**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Julian Zanon

**Estados de borda em junções de isolantes topológicos 2D
e ferromagnetos: textura de spin e espectro**

São Carlos

2021

Julian Zanon

**Estados de borda em junções de isolantes topológicos 2D
e ferromagnetos: textura de spin e espectro**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica

Orientador: Prof. Dr. José Carlos Egues

Versão corrigida

**São Carlos
2021**

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Zanon, Julian

Estados de borda em junções de isolantes topológicos 2D e ferromagnetos: textura de spin e espectro / Julian Zanon; orientador José Carlos Egues - versão corrigida -- São Carlos, 2021.

135 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2021.

1. Estados de borda. 2. Textura de spin. 3. Junções 2D TI/FM. 4. Modelo BHZ. 5. Bulk-edge correspondence. I. Egues, José Carlos, orient. II. Título.

*Dedico este trabalho à todos aqueles que, como eu, buscam compreender um pouco a
incompreensível natureza da realidade.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço de coração a Deus, a meu pai, minha mãe e meus irmãos. Obrigado por vocês estarem sempre ao meu lado e fazer a minha vida mais feliz, amo muito todos vocês.

Aos meus amigos Gabriel, Caio, Pablo, Caroline, Loryanne, Estevão, Rodrigo, Laís, Lucas e Ronaldo, por estarem sempre compartilhando das minhas alegrias e também dos momentos de tristeza. Obrigado Juliana também por estar presente nestes últimos meses, você é incrível.

Agradeço em especial ao meu orientador José Carlos Egues e a minha coorientadora Poliana Penteado. Vocês foram fundamentais em meu amadurecimento, desde do entendimento da Física em si como também de questões práticas da vida. Obrigado por tudo, espero que possamos ter muitas mais discussões frutíferas ao longo dos anos.

Ao Antônio Zegarra e ao professor Wei Chen, muito obrigado pelas diversas discussões as quais ajudaram muito no andamento deste trabalho, desde da ideia inicial, até a parte técnica. Obrigado também aos professores Diogo Pinto e Miled Moussa do Instituto de Física de São Carlos por contribuírem muito na minha formação.

Por fim, mas não menos importante, muito obrigado a todas as pessoas que contribuíram para que meu trabalho remoto pudesse ocorrer, desde do setor administrativo como também no setor técnico, como o Ricardo e o Luciano. Um agradecimento especial também à Maria Cristina, pelo seu apoio e ao meu psicólogo Daniel por todo aconselhamento.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

*“So do all who live to see such times. But that is not for them to decide.
All we have to decide is what to do with the time that is given us.”*
J.R.R. Tolkien

RESUMO

ZANON, J. **Estados de borda em junções de isolantes topológicos 2D e ferromagnetos:** textura de spin e espectro. 2021. 135p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

A utilização de materiais com acoplamentos spin-órbita em dispositivos eletrônicos tem despertado grande interesse na área da spintrônica. Entre os materiais promissores se encontram os isolantes topológicos (TIs), uma vez que eles possuem a seguinte característica peculiar: são isolantes em seu *bulk*, mas possuem estados condutores em suas superfícies (3D)/ bordas (2D). Estes estados metálicos são spin polarizados e protegidos contra espalhamento. Eles poderiam potencialmente ser usados em conjunto com um ferromagneto para transferir e manipular dados. Neste trabalho, nós investigamos junções 2D entre um TI e um isolante normal (NI), e entre um TI e um metal ferromagnético (FM). Modelamos nosso sistema usando o bem conhecido Hamiltoniano Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ). Exploramos duas diferentes rotas: (i) um modelo *tight-binding*, o qual é obtido a partir de uma base mínima e os seus parâmetros são obtido realizando um mapeamento com o Hamiltoniano BHZ contínuo, e (ii) uma versão discretizada do modelo BHZ obtida a partir do método das diferenças finitas. Uma das principais diferenças entre as duas técnicas, é como a interface é levada em conta. Aqui mostramos em detalhes como os dois modelos podem ser mapeados um no outro. Então, investigamos a estrutura de bandas do sistema e analisamos as funções de onda e textura de spins de estados das bordas e do *bulk*. Além disso, exploramos o papel que diversas simetrias presentes no sistema desempenham, sendo elas: a inversão espacial, partícula-buraco e reversão temporal. Interessantemente, para a junção TI/NI encontramos que é preciso que tanto a simetria de inversão espacial como a simetria partícula-buraco sejam quebradas, para que a degenerescência em spin seja levantada. Nós também examinamos o comportamento dos estados de borda quando a simetria de reversão temporal no sistema é quebrada, e como a magnetização da camada FM afeta a textura de spin. Concluimos o trabalho estabelecendo a validade de ambas as técnicas.

Palavras-chave: Estados de borda. Textura de spin. Junções 2D TI/FM. Modelo BHZ. Bulk-edge correspondence.

ABSTRACT

ZANON, J. **Edge states in ferromagnetic/2D-topological-insulator junctions: spin texture and spectrum.** 2021. 135p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

In the past couple of years, there has been great interest in the search for materials with potential application in the area of spintronics, whose goal is to use the spin of the electron as a means, for example, to store information. Among a variety of candidates, there exists a class of insulators called topological insulators (TIs) that are very promising, since they have a very peculiar feature: they are insulating in their bulk but possess conducting states on their surfaces (3D)/edges (2D). These metallic states are spin-polarized and protected against backscattering. They could possibly be used in conjunction with a ferromagnet to transfer and manipulate data. In this work, we investigate junctions of 2D TIs and either a normal insulator (NI) or a ferromagnet (FM). We model our system using the well-known Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) Hamiltonian. We explore two different routes: (i) a tight-binding model, which accounts for a reduced basis set and whose parameters are obtained by mapping it onto the continuum BHZ Hamiltonian, and (ii) a discretized version of the BHZ model based on the finite difference method. One of the main differences between these two approaches is how the interface is taken into account. Here we show in detail how the two models can be mapped onto each other. We then obtain the band structure of the system and analyze the wave functions and spin textures of the edge and bulk states. In addition, we examine the role played by the several symmetries present in our system, namely inversion, particle-hole, and time-reversal symmetries. Interestingly, we find that in a TI/NI junction both inversion and particle-hole symmetries must be broken to lift the spin degeneracy. We also examine the behavior of the edge states when time-reversal symmetry is broken and how the magnetization of the FM layer affects the spin texture. We conclude by establishing the validity of both approaches.

Keywords: Edge-states. Spin texture. 2D - TI/FM junctions. BHZ model. Bulk-edge correspondence.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Quantização (curva vermelha) da resistência Hall $R_H = \rho_{xy}$ em função do campo magnético $\mathbf{B}$. Em cada platô ($n = 1, 2, 3, \dots$) nota-se o anulamento da resistência ρ_{xx} 27
- Figura 2 – Visão semi-clássica da condução elétrica I através das "skipping orbits", enquanto o *bulk* permanecia isolante (pois $\sigma_{xx} = 0$). 28
- Figura 3 – Estrutura de bandas para o modelo de Kane e Mele com as bandas dos estados de *bulk* (B.B.) e as bandas de condução (C.B.) em a), estas referentes aos estados com spins *up* e *down* nas bordas em do sistema em b). Note que em b), devido a reversão temporal presente no sistema, há dois estados se propagando em direções opostas e com spins opostos. 29
- Figura 4 – Heteroestrutura de HgTe/CdTe crescida na direção z com o tamanho d do poço quântico no regime trivial ($d < d_c$) em a) e no regime topológico ($d > d_c$) em c), com d_c sendo o tamanho crítico. Em b) e d) é representado a estrutura de bandas referentes aos níveis de energia E_1 e H_1 do poço ao longo de uma das direções do plano xy , com um *gap* E_g . Quando $d < d_c$ e $d > d_c$ têm-se, respectivamente, $E_1 > H_1$ (isolante normal-NI) e $E_1 < H_1$ (isolante topológico - TI). 30
- Figura 5 – Interface entre uma região trivial (2D - NI) e outra topológica (2D - TI) em a) com os estados condutores em vermelho e azul, referentes as bandas de mesma cor em b). Estes estados de propagam ao longo da interface, em direções opostas e com spins opostos, indicados pelas flechas pretas ($\uparrow$ e $\downarrow$) em b). 31
- Figura 6 – Para que as bandas do NI e do TI sejam ordenadas de maneira contrária, o *gap* E_g na interface TI/Ni deve vir à fechar. 32
- Figura 7 – Representação tridimensional da interface da Fig.(5a), i.e, o sistema é infinito para $x \rightarrow \pm$ e há somente uma interface para y . Note que para cada momento $\vec{k}$ há uma orientação diferente para o spin (flechas pretas par). 32
- Figura 8 – Estruturas de bandas para o HgTe (a) e para o CdTe (b); em ambos as linhas tracejadas e contínuas representam, respectivamente, os casos em que os parâmetros de Luttinger são nulos e não nulos; para o CdTe os estados $|\Gamma_8, \pm\frac{1}{2}\rangle$ e $|\Gamma_6, \pm\frac{1}{2}\rangle$ estão associados, respectivamente, as bandas de valência e condução enquanto que para o HgTe vemos um ordenamento invertido. Note ainda que as bandas associadas aos estados $|\Gamma_7, \pm\frac{1}{2}\rangle$ estão afastadas das demais em energia. 41

- Figura 9 – Representação da Heteroestrutura de HgTe/CdTe com o qual utilizamos para derivar o modelo BHZ. Para este sistema as bandas de *bulk* (representadas pelas parábolas em verde e em preto) possuem um ordenamento invertido para o poço $|z| < d$ quando comparadas com aquelas presentes nas regiões para $|z| > d$. Conforme aumentamos o tamanho d do poço, os subníveis de energia E_1 e HH_1 dentro do poço invertem. Esta inversão é o que resulta um isolante topológico no modelo efetivo do BHZ. 42
- Figura 10 – Gráfico das energias para os estados $|E_n \pm \rangle$ e $|HH_n \pm \rangle$ em função do tamanho d do poço. As curvas em verde referem-se ao caso em que $f_{1/2,n}(z)$ e $f_{4/5,n}(z)$ são, respectivamente, ímpares e pares; as curvas em vermelho referem-se ao caso em que $f_{1/2,n}(z)$ e $f_{4/5,n}(z)$ são, respectivamente, pares e ímpares; já as curvas em preto e azul estão associadas, respectivamente, com as paridades ímpar e par para $f_{3/6,n}(z)$. A curva chamada de LH_n refere-se aos casos em que há uma maior contribuição da parte de *light-hole*, i.e., $\int f_{4/5,n}(z)dz > \int f_{1/2,n}(z)dz$ para o estado $|E_n \pm \rangle$. Em um tamanho $d_c \approx 67\text{\AA}$ as energias do poço $E_1 \pm$ e $HH_1 \pm$ se cruzam. 44
- Figura 11 – Estrutura de bandas para o *bulk* do modelo BHZ, com o mapa de cores representando a contribuição dos termos associados aos elétrons $|E_1 \pm \rangle$ ou aos buracos $|H_1 \pm \rangle$. Para $M > 0$ em a) tem-se o regime não topológico e para $M < 0$ em b) tem-se o regime topológico. 48
- Figura 12 – Isolante Topológico 2D (2D-TI) em uma geometria de fita, sendo L a largura da fita. Temos ao longo de x condições de contorno periódicas e em y iremos considerar tanto as condições de contorno abertas como as periódicas. 56
- Figura 13 – Estrutura de bandas para a) quando temos condições de contorno periódicas em $y = 0$ e em $y = L$ e, em b) quando temos condições de contorno abertas, apresentando bandas que se cruzam em $k = 0$ associadas aos estados de borda; *Spin* $\uparrow$ ($\downarrow$), i.e., *up* (*down*) representa as projeções para o spin na direção z . A cor vermelha representa a dupla degenerescência em spin. 59
- Figura 14 – Estrutura de bandas para fita de 2D-TI quando há a simetria de partícula-buraco, i.e., $C = D = 0$ em a) e quando não há, i.e., $C = 0$ e $D = -730$ em b). Ao contrário de a), em que o ponto de Dirac está $E(k_x = 0) = 0$, em b) o ponto de Dirac está em $E(k_x = 0) \approx 7 \text{ meV}$. . . 60

- Figura 15 – Estrutura de bandas em a) com os pontos em amarelo e em verde relacionados às funções de onda ao quadrado em b), onde as curvas tracejada e contínuas correspondem, respectivamente, ao spin *up* e *down*; note em b) que cada uma das curvas é duplamente degenerada. 60
- Figura 16 – Componentes x em a), y em b) e z em c) da textura de spin dos estados referentes aos pontos em amarelo e verde na Fig.(15a). As curvas tracejadas estão associadas ao spin *down* e as contínuas ao spin *up*. 61
- Figura 17 – Mudança dos estados de *bulk* em a) para aqueles de borda em b). Comparando c) e e), com d) e f), vemos que os estados deixam de estar mais presentes ao longo do *bulk* e passam à estar mais presentes nas bordas. 62
- Figura 18 – Estados de borda para a fita. Em a) temos os pontos em verde e amarelo da estrutura de bandas analisado em b) e c), respectivamente, através do módulo quadrado da função de onda e da componente z da textura de spin; em d) representamos este estados com spin *up* e *down* (flechas perpendiculares ao plano), com momentos k_x e $-k_x$ representados, respectivamente, pelas retas em vermelho e azul no plano. 63
- Figura 19 – Sistema considerado na dedução do modelo TB; os pontos azuis sobre o plano (infinito) representam os sítios, sendo a e b parâmetros de rede ao longo das direções x e y , respectivamente. 68
- Figura 20 – Interações ao longo do eixo x envolvendo os orbitais p e s (esferas); os termos t_{as} , t_{asp_x} , t_{ap_xs} , $t_{ap_{yy}}$ e $t_{ap_{xx}}$ representam os *hoppings* diferentes de zero e a o parâmetro de rede ao longo do eixo x 71
- Figura 21 – Interações ao longo do eixo y envolvendo os orbitais p e s (esferas); os termos t_{bs} , t_{bsp_y} , $t_{bp_y s}$, $t_{bp_{yy}}$ e $t_{bp_{xx}}$ representam os *hoppings* diferentes de zero, sendo b o parâmetro de rede ao longo do eixo y 72
- Figura 22 – Isolante Topológico 2D (2D-TI) em uma geometria de fita, sendo L a largura da fita. Temos ao longo de x condições de contorno periódicas e em y iremos considerar tanto as condições de contorno abertas como as periódicas. 76
- Figura 23 – Estrutura de bandas para o modelo TB com condições de contorno periódica $\Psi(y=0) = \Psi(L=0)$ em a) e *hard-wall* $\Psi(y=0) = \Psi(L=0) = 0$ em b). Somente em b) as bandas dos estados de borda ocorrem, pois para $y=0$ e $y=L$ há uma mudança de M na fronteira (i.e., $M = -10.0 \text{ meV} \rightarrow M = \infty$) e, assim, uma mudança na topologia das bandas. 77

Figura 24 – Temos em a) e b), respectivamente, condições de contorno periódica $\Psi(y = 0) = \Psi(y = L)$ e <i>hard-wall</i> $\Psi(y = 0) = \Psi(y = L) = 0$. Os pontos em laranja e em preto são referentes, respectivamente, ao modelo TB e discretizado.	77
Figura 25 – Estrutura de bandas para o caso em que temos condições <i>hard - wall</i> para as bordas da fita, i.e., $\Psi(y = 0) = \Psi(y = L) = 0$. Os pontos em amarelo e verde referem-se aos estados presentes na Fig.(26).	79
Figura 26 – Funções de onda ao quadrado em a) e componentes z , x e y da textura de spin, respectivamente, em b), c) e d) para os pontos em verde e amarelo da estrutura de bandas Fig.(25). Cada uma das curvas em a) são duplamente degeneradas, pois para cada k_x temos dois spins opostos, como visto em b).	79
Figura 27 – Comparação entre o modelo TB (curvas em preto) e a discretização (curvas em verde) para as funções de onda ao quadrado em a) e a componente z da textura de spin em b).	80
Figura 28 – Estrutura de bandas para o regime topológico utilizando o modelo TB. Os pontos em amarelo e verde são analisados nas Figs.(29).	81
Figura 29 – Temos em a) as funções de onda referentes aos pontos em amarelo e em verde da estrutura de bandas presente - Fig.(28), com as curvas tracejada e contínua correspondente, respectivamente, ao spin <i>up</i> e <i>down</i> , como mostrado em b) através da componente z da textura de spin.	81
Figura 30 – Tanto em a) onde temos as funções de onda ao quadrado, com cada curva (preta ou verde) duplamente degenerada, quanto em b) onde vemos a componente z da textura de spin, notamos que o resultado do modelo TB (em preto) está em acordo com o obtido através da discretização (em verde).	82
Figura 31 – Junção entre uma camada de isolante topológico e outra camada X , com L_{TI} e L_X sendo a largura para cada camada. Temos condições de contorno periódicas em x e <i>hard-wall</i> em $y = 0$ e em $y = L_{TI} + L_X$	83
Figura 32 – Junção entre uma camada de isolante topológico (TI) e outra de isolante normal (NI) com cada uma contendo, respectivamente, uma largura L_{TI} e L_{NI} . Temos condições periódicas para x e condições <i>hard wall</i> em $y = 0$ e em $y = L_{TI} + L_{NI}$	94
Figura 33 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/NI via diferenças finitas (a) e TB b); o mapa de cores mostra a projeção do spin (com $\hbar = 1$) na direção z para cada estado da banda. Note que não há degenerescência em spin para cada k_x (com $k_x \neq 0$); as flechas em preto em b) indicam onde as bandas dos estados de borda estavam quando tínhamos a fita de TI (i.e., ao invés da camada NI).	95

- Figura 34 – Estruturas de bandas para a junção 2D - TI/NI com diferentes valores para M_0 . Em $M_0 = 10$ meV há duas energias em $k_x = 0$ em que as bandas dos estados de borda se cruzam, uma em $E \approx 7$ meV e $E \approx 0$ meV; aumentando M_0 , este último ponto se aproxima do primeiro. . . . 96
- Figura 35 – Estrutura de bandas para diferentes valores de D (com $D = D_0$) para a junção 2D - TI/NI. Os demais parâmetros (e.g., A, B e C) foram retirados da Tab.4. Para $D=0$ meV.nm², temos surpreendentemente a presença de degenerescência em spin para cada k_x , como mostra a cor vermelha na Fig.(35a). 97
- Figura 36 – Diferença de energia $\Delta E_{k=0}$ em função de $|D|$ em a), com $\Delta E_{k=0}$ sendo a diferença de energia entre os pontos indicados pelas flechas pretas em b). $\Delta E_{k=0} \approx 0$ para $|D|=0$ devido à hibridização dos estados de borda. 98
- Figura 37 – Estrutura de bandas para a junção 2D-TI/NI com $D_0 = 0$ em a) e com $D_0 = -800$ meV.nm² em b); tanto em a) como em b) temos $D=0$. O valor dos outros parâmetros foram retirados da Tab.4. Diminuindo D_0 a degenerescência também levanta, mas esta é menor do que ao mudar $D = D_0$, Fig.(35). 99
- Figura 38 – Estrutura de bandas para a junção 2D-TI/NI com $C_0 = 0$ em a) e com $C_0 = 10$ meV.nm² em b); tanto em a) como em b) temos $C \neq C_0$, com C e os demais parâmetros ($A, A_0, B, B_0, \dots$) retirados da Tab.4. 99
- Figura 39 – Estrutura de bandas para a fita de TI (i.e., $M < 2B$ no modelo BHZ) com $D=0$ meV.nm² em a) e com $D=-800$ meV.nm² em b). Os demais parâmetros ($A, B, C, \dots$) são retirados da Tab.4. O mapa de cores indica a porcentagem da parte de elétrons $|E_1 \pm\rangle$ (em amarelo) e buracos $|H_1 \pm\rangle$ (em preto) para cada estado referente à um ponto da banda. 100
- Figura 40 – Estrutura de bandas para a fita de NI (i.e., $M > 2B$ no modelo BHZ) com $D=0$ meV.nm² em a) e com $D=-800$ meV.nm² em b). Os demais parâmetros ($A, B, C, \dots$) são retirados da Tab.4. Neste caso não há inversão para as bandas, como visto em amarelo (banda de condução) e em preto (banda de valência), referentes à contribuição de elétrons ($|E_1 \pm\rangle$) e buracos ($|H_1 \pm\rangle$). 100
- Figura 41 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/NI com a contribuição de elétrons ($|E_1 \pm\rangle$) e buracos ($|H_1 \pm\rangle$) para cada estado do sistema em a) e um zoom em b) do quadrado vermelho em a). As flechas em b) indicam os anti-cruzamentos entre as bandas de caráter eletrônico do TI (em amarelo) com aquelas de caráter de buraco do NI (em preto). . 101

- Figura 42 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/NI para $D = D_0 = -400$ meV.nm² em a) e $D = D_0 = -800$ meV.nm² em b); tanto em a) como em b) o mapa de cores representa a contribuição de elétrons ($|E_1\pm\rangle$) e buracos ($|H_1\pm\rangle$) em cada estado. Diminuindo D , duas bandas dos estados de borda passam à ter um caráter maior de buraco. 102
- Figura 43 – Região da banda de valência da Fig.(35d) com os pontos destacados em amarelo, verde e preto para $k_x = -0.019$ nm⁻¹ em a) e para $k_x = 0.019$ nm⁻¹ em b), referentes aos estados explorados nas Figs.(44), (45) e (46). Note a quebra de degenerescência em cada k_x 103
- Figura 44 – Funções de onda ao quadrado em função da largura do sistema 2D - TI/NI para os pontos amarelo, verde e preto da Fig.(43) para $k_x = -0.019$ nm⁻¹ em a) e para $k_x = -0.019$ nm⁻¹ em b). Há apenas um estado para cada energia E e as funções de onda decaem na interface, como indicado pela flecha vermelha em $y = 400$ nm (veja *insets*). 103
- Figura 45 – Componente z da textura de spin em função da largura do sistema 2D - TI/NI para os estados da Fig.(44) referentes à $k_x = -0.019$ nm⁻¹ em a) e à $k_x = -0.019$ nm⁻¹ em b). Os spins em a) são relacionadas com os de mesma cor de b) pela simetria de reversão temporal. 104
- Figura 46 – Componentes x em a) e y em b) da textura de spin em função da largura do sistema 2D - TI/NI para os estados referentes à $k_x = -0.019$ nm⁻¹ da Fig.(44a). Estas componentes também são zero para os estados da Fig.(44b) referentes à $k_x = 0.019$ nm⁻¹. 104
- Figura 47 – Estrutura de bandas da Fig.(42b) com os pontos azul, verde, amarelo e laranja (em destaque) analisados na Fig.(48). Como visto na Fig.(35d), não há degenerescência neste caso em cada k_x 105
- Figura 48 – Funções de onda ao quadrado para $k_x = -0.019$ nm⁻¹ em a) e para $k_x = 0.019$ nm⁻¹ em b); as cores em azul, verde, laranja e amarelo referem-se aos pontos da Fig.(47). As funções de onda se localizam tanto na interface TI/NI (curvas verde e amarelo) quanto na interface entre TI e o vácuo (curvas azul e laranja). 106
- Figura 49 – Componentes z da textura de spin para as funções de onda da Fig.(47) para $k_x = -0.019$ nm⁻¹ em a) e para $k_x = 0.019$ nm⁻¹ em b); as cores em azul, verde, laranja e amarelo referem-se aos pontos da Fig.(47). Não há degenerescência, pois em cada $E(k_x)$ há somente um spin. 106
- Figura 50 – Região da banda de valência da Fig.(41a) com os pontos em preto, verde e laranja analisados nas Fig.(51). Aqui há degenerescência em cada k_x e a simetria partícula-buraco está presente. 107

Figura 51 – Funções de onda ao quadrado em função da largura do sistema 2D - TI/Ni para os pontos azul, verde e laranja da Fig.(50) para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b), com as respectivas componentes z de spin em c) e d). Observa-se que há dois estados para cada energia E . Como mostrado pelos <i>insets</i> as funções de onda decaem na interface TI/Ni.	107
Figura 52 – Estrutura de bandas da Fig.(41a) com os pontos em preto e verde analisados nas Fig.(53). As bandas dos estados de borda (em vermelho) possuem contribuição equivalente de elétrons $ E_1 \pm\rangle$ e buracos $ H_1 \pm\rangle$	108
Figura 53 – Funções de onda ao quadrado para $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b), e as respectivas componentes z da textura de spin em c) e em d); as cores em azul e verde referem-se aos pontos da Fig.(52). Para energia E e k_x há dois estados, um localizado na interface TI/Ni em $y = 400 \text{ nm}$ (indicado pela flecha vermelha), e o outro localizado na interface TI/vácuo em $y = 0 \text{ nm}$	109
Figura 54 – Junção bidimensional entre uma camada de isolante topológico (TI) com largura L_{TI} e um ferromagneto condutor (FM) com largura L_{NI} , com sendo $\vec{m}$ sua magnetização uma largura. Temos condições de contorno periódicas em x e <i>hard-wall</i> para $y = 0$ e em $y = L_{TI} + L_{FM}$	110
Figura 55 – Estrutura de bandas para a fita de FM com a magnetização na direção x em a), na direção y em b) e na direção z em c) com os parâmetros da Tab.5; as direções são indicadas pelos ângulos θ e ϕ das coordenadas esféricas mostradas em d). Cada banda de a), b) e c), é degenerada em orbital (s e p), sendo que em a) e b) as bandas com projeção zero (em azul forte) são do orbital p degeneradas também em spin.	113
Figura 56 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM para quando a magnetização do FM está na direção x em a), y em c) e z em e). Em b), d) e f) é mostrado um <i>zoom</i> para a região quadriculada em preto, respectivamente, de a), c) e e). Diferente das bandas referentes às flechas vermelhas, as bandas indicadas pelas flechas azuis emergem para o <i>bulk</i> do FM e há uma abertura de um ante - cruzamento em $E(k_x = 0) \approx 0.21 \text{ eV}$	114
Figura 57 – Ante-cruzamento das bandas indicadas pelas flechas azuis para quando a magnetização está em x , referente à Fig.(56b), em a) e suas respectivas texturas de spin no espaço k_x em b). A região <i>I</i> e <i>II</i> possui texturas de spin opostas, conforme é considerado valores maiores para k_x	115
Figura 58 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM com $\vec{m} = m \hat{z}$. Os pontos preto, amarelo e verde referem-se aos estados analisados na Fig.(59).	116

- Figura 59 – Função de onda ao quadrado em a) e as componentes z , x e y da textura de spin em b), c) e d) em função da largura da junção 2D - TI/FM, quando a magnetização é $\vec{m} = m\hat{z}$. As cores referem-se aos pontos preto, amarelo e verde da Fig.(58). 117
- Figura 60 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM com a magnetização do FM na direção x para o caso correto em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle = 0$ em a) e o caso errado em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle \neq 0$ em b). Os pontos preto, amarelo e verde referem-se aos estados analisados nas Figs.(61) e (62). As flechas em preto indicam o local de encontro das bandas de borda com aquelas do FM. 118
- Figura 61 – Função de onda ao quadrado em a) e componente z da textura de spin em b) em função da largura da junção 2D - TI/FM para os pontos preto, amarelo e verde da Fig.(60). Note que o estado associado ao ponto preto (verde) está mais presente na interface TI/FM (na camada FM). 118
- Figura 62 – Componentes x em a) e y em b) da textura de spin para os estados da Fig.(61a). Note no *inset* que a componente x adquire um valor negativo logo antes da interface e, depois, passa à ser positivo. Como na Fig.(61), as curvas tracejadas mostram que a correção $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle = 0$ muda pouco os resultados do caso não correto, em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle \neq 0$. 119
- Figura 63 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM com a magnetização do FM na direção y para o caso correto em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle = 0$ em a) e o caso errado em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle \neq 0$ em b). Os pontos preto, amarelo e verde referem-se aos estados analisados nas Fig.(64). As flechas em preto indicam o local de encontro das bandas de borda com aquelas do FM. 119
- Figura 64 – Funções de onda ao quadrado em a) e as componentes z em b), x em c) e y em d) da textura de spin para quando a magnetização do FM está ao longo da direção y , i.e., $\theta = \phi = \frac{\pi}{2}$; em d) é visto através do *inset* que $\langle \sigma_y \rangle$ torna-se negativo na interface, antes de passar à ser positivo na camada FM. Cada cor refere-se aos pontos da Fig.(63). Neste caso a componente y da textura de spin que torna-se diferente de zero, enquanto que a x é zero. 120
- Figura 65 – Textura de spin no espaço k para a região das bandas na Fig.(60a) indicada pelas flechas pretas; as flechas pontilhadas indicam a mudança da textura de spin. Aqui, temos k_x paralelo à componente $\langle \sigma_x \rangle$ 121
- Figura 66 – Estrutura de bandas para fita de FM sem a tensão externa em a) e com a tensão externa em b). Ao considerarmos um potencial químico externo μ_0 , as bandas em a) descem em energia como em b). 123

Figura 67 – Estrutura de bandas obtida a partir do TB em a) e a partir do discretizado em b), com a magnetização em z . Os estados referentes aos pontos preto, amarelo e verde são explorados na Fig.(68).	126
Figura 68 – Perfis das funções de onda em a) e componente z da textura de spin em b), para os pontos em preto, amarelo e verde da Fig.(67). As curvas tracejadas e contínuas referem-se, respectivamente, aos resultados obtidos a partir do TB e do modelo discreto.	126
Figura 69 – Estrutura de bandas obtida a partir do TB em a) e a partir do discretizado em b), com a magnetização em x . Os estados referentes aos pontos preto, amarelo e verde são explorados na Fig.(70).	127
Figura 70 – Funções de onda ao quadrado em a) e componentes z da textura de spin em b), referentes aos pontos em preto, amarelo e verde da Fig.(69). As linhas contínuas e tracejadas referem-se, respectivamente, aos resultados obtidos do modelo TB e discretizado.	127
Figura 71 – Componentes x em a) e y em b) da textura de spin para os pontos destacados em preto, amarelo e verde na Fig.(69). As linhas contínuas e tracejadas, referem-se também aqui, aos resultados obtidos do modelo TB e do discretizado.	127

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Base do momento angular total $\{ J, m_J\rangle\}$, onde J é o momento angular total e m_J é a sua projeção. Γ_6 esta associado a simetria do tipo s (“ <i>electron-like</i> ”), já Γ_7 e Γ_8 estão associados a simetria do tipo p (“ <i>hole-like</i> ”).	37
Tabela 2	– Parâmetros do modelo de Kane 8×8 para os materiais HgTe e CdTe. .	41
Tabela 3	– Parâmetros para o modelo BHZ para $d \approx 70$ Å.	47
Tabela 4	– Parâmetros das camadas TI e NI.	95
Tabela 5	– Parâmetros para a junção 2D - TI/FM.	112
Tabela 6	– Parâmetros para a junção 2D - TI/FM (modelo discreto).	123

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	Isolantes Topológicos e o Modelo BHZ	29
1.2	Estados de bordas em junções	32
1.3	Outline da dissertação	33
2	MODELO CONTÍNUO: BHZ	35
2.1	Dedução do Modelo	35
2.2	Simetrias presentes no BHZ	48
2.2.1	Reversão temporal	48
2.2.2	Partícula - buraco	50
2.2.3	Inversão espacial	52
2.2.4	Rotação para o eixo z	53
2.2.5	Matrizes de spin na base do modelo BHZ	54
2.3	Diferenças Finitas - Fita	55
2.3.1	Estrutura de bandas	59
2.3.2	Estados de borda e de <i>bulk</i>	60
3	MODELO TIGHT BINDING	65
3.1	Método tight binding	65
3.2	Modelo mínimo para o BHZ	68
3.3	Modelo mínimo - fita (2D)	75
3.3.1	Estrutura de bandas	76
3.3.2	Estados de borda e <i>bulk</i>	78
4	DIFERENTES JUNÇÕES PARA 2D - TI	83
4.1	Junção a partir das Diferenças Finitas	84
4.2	Junção a partir do método Tight Biding	89
4.3	Tight Binding e Diferenças Finitas	91
4.4	Interface - 1: TI/NI	94
4.4.1	Estrutura de bandas	95
4.4.2	Estados de borda e texturas de spin	103
4.5	Interface - 2: TI/FM	110
4.5.1	Estrutura de bandas	112
4.5.2	Estados de borda e texturas de spin	116
4.6	TI/FM: Tight Binding e Diferenças Finitas	121
4.6.1	Estados de borda e estrutura de bandas	125

5	CONCLUSÃO	129
	REFERÊNCIAS	131

1 INTRODUÇÃO

Há várias décadas a busca e a compreensão de novos estados da matéria, como a supercondutividade e o magnetismo, têm sido alguns dos objetivos fundamentais presentes na física da matéria condensada. Ao longo desta busca, descobertas surpreendentes fizeram surgir novas áreas de estudo empurrando a tecnologia para novos patamares. Entre os diversos achados, se encontra o efeito Hall quântico inteiro medido por von Klitzing *et.al.*,¹ um dos marcos iniciais para o que viria a ser a área dos materiais topológicos.²⁻⁴

Em essência, as medidas de resistência hall R_H realizadas por Klitzing¹ mostravam que um gás de elétrons bi-dimensional, em baixas temperaturas e sob altos campos magnéticos, exibía um padrão de quantização $R_H = \frac{h}{e^2 n}$ com e sendo a carga do elétron, $n = 1, 2, \dots$ um número inteiro e h a constante de Planck. Associado à isso, havia a quantização da condutividade $\sigma_{xy} = R_H^{-1} = e^2 n/h$ ao mesmo tempo que $\sigma_{xx} = 0$, Fig.(1).

Figura 1 – Quantização (curva vermelha) da resistência Hall $R_H = \rho_{xy}$ em função do campo magnético B . Em cada platô ($n = 1, 2, 3, \dots$) nota-se o anulamento da resistência ρ_{xx} .

Fonte: Adaptada de COOPER *et.al.*.⁵

Era assim relatado as primeiras medidas do efeito Hall quântico inteiro (ou do inglês "*Integer Quantum Hall Effect*" - IQHE). Trabalhos posteriores⁶⁻⁸ explicaram que o IQHE estava relacionado com o preenchimento dos níveis de Landau presentes no sistema* e que a condução elétrica, para quando R_H era um platô, ocorria sem dissipação nas bordas do sistema enquanto o *bulk* do sistema se mantinha um isolante ($\sigma_{xx} = 0$).

* Foi também mostrado, pelo trabalho de Thouless, Kohmoto, Nightingale e Nijs⁹⁻¹⁰ que o número inteiro n para $\sigma_{xy} = R_H^{-1} = e^2 n/h$ era consequência de um invariante topológico (chamado de TKNN) que contava o número de canais de condução elétrica presentes na borda do sistema.

Em uma visão semi-clássica, na região dos platôs para a resistência Hall, a corrente I fluiria no sistema através das "skipping orbits", Fig.(2).

Figura 2 – Visão semi-clássica da condução elétrica I através das "skipping orbits", enquanto o *bulk* permanecia isolante (pois $\sigma_{xx} = 0$).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na visão semi-clássica, Fig.(2), as "skipping orbits" ocorriam devido ao movimento síncrotron do elétron e do tamanho finito do sistema. Em outras palavras, quando o campo magnético é aplicado perpendicularmente no sistema, os elétrons realizam um movimento síncrotron (uma "órbita") no plano. Porém, aqueles presentes nas bordas ao tentarem completarem o movimento são impedidos pelo tamanho finito do sistema e, assim, pulam para a órbita seguinte realizando as "skipping orbits".

Ao longo das duas décadas seguintes às medidas de Klitzing *et.al.*, havia um esforço para que se pudesse obter um efeito semelhante ao do IQHE (i.e., condução elétrica sem dissipação), mas sem a utilização de campos magnéticos. Foi então, já nos 2000, que alguns trabalhos^{11–13} mostraram a possibilidade de se obter uma corrente de spin sem dissipação e sem a necessidade de campos magnéticos (o que fazia a simetria de reversão temporal ser preservada no sistema), utilizando-se de sistemas com a presença do efeito spin-órbita.

Entre estes novos trabalhos, com a ausência do campo magnético, havia o modelo *tight binding* proposto por Kane e Mele¹⁴ onde um termo de spin-órbita era introduzido no Hamiltoniano efetivo que descreve o grafeno. Este termo, fazia com que o grafeno obtivesse bandas condutoras[†] referentes à estados presentes nas bordas do sistema, enquanto o *bulk* permanecia isolante, Fig.(3). Havia assim uma quantização semelhante ao do IQHE, com $\sigma_{xy} = \pm e^2/h$, com a diferença de que ao manter a simetria de reversão temporal, o sistema deixava de apresentar somente um estado em cada borda do sistema (chamados de "chiral") e passava à apresentar dois estados polarizados em spin, os quais se propagavam em direções opostas em cada borda do sistema (chamados de "helical").

Entretanto, tendo em vista que para o grafeno o termo de spin-órbita apresentava-se pequeno (o que resultava em um gap de $\sim 30\mu\text{eV}$), era necessário o uso de outro material em que tal termo fosse mais relevante para que o efeito proposto fosse medido. Este

[†] Kane e Mele mostraram também^{15–16} que era possível definir um invariante topológico chamado de Z_2 , caracterizado por $\nu = 0, 1$. Este indicaria quando estas bandas condutoras estariam (fase topológica) ou não estariam (fase trivial) presentes no sistema.

Figura 3 – Estrutura de bandas para o modelo de Kane e Mele com as bandas dos estados de *bulk* (B.B.) e as bandas de condução (C.B.) em a), estas referentes aos estados com spins *up* e *down* nas bordas em do sistema em b). Note que em b), devido a reversão temporal presente no sistema, há dois estados se propagando em direções opostas e com spins opostos.

Fonte: Adaptada de KANE *et.al.*¹⁴

problema foi contornado alguns anos mais tarde com o modelo proposto por Bernevig, Hughes e Zhang¹⁷ (BHZ), o qual logo foi experimentalmente observado por König *et.al.*¹⁸ e passando a comprovar uma nova classe de materiais, os chamados isolantes topológicos (do inglês, "*topological insulators*" - TIs).

1.1 Isolantes Topológicos e o Modelo BHZ

Antes de abordarmos os TIs podemos recordar que um isolante é, em essência, um material que possui um *gap* de energia separando as suas bandas de valência daquelas de condução, de maneira a impossibilitar condução de corrente elétrica no sistema. Esta característica ocorre tanto para um sistema infinito (o *bulk*) como para um sistema finito (possuindo, e.g., interfaces com o vácuo). Este isolante chamaremos de normal (NI, i.e., do inglês "*Normal Insulator*").

Por outro lado, os isolantes que são considerados topológicos apresentam um *gap* em *bulk*, mas em geometrias finitas passam à exibir estados condutores presentes em suas fronteiras, e.g., em suas bordas (para sistemas 2D, i.e., 2D - TIs) ou superfícies (para sistemas 3D, i.e., 3D - TIs). Estes estados metálicos são protegidos pela simetria de reversão temporal, o que torna-os robustos contra espalhamentos por impurezas e faz deles *helicals*, como mostrado para o grafeno na Fig.(3b).[‡] Portanto, a diferença fundamental entre um NI e um TI é o aparecimento de estados metálicos no sistema, uma vez que este é finito.

Para que estes estados condutores ocorram, os TIs necessitam que as bandas referentes aos estados de *bulk* estejam ordenadas de maneira diferente do que é visto em isolantes comuns. Esta correspondência entre o *bulk* e as bordas do sistema, é chamada na

[‡] Para diferenciar um isolante trivial de um outro topológico é utilizado também os chamados invariantes topológicos, como o TKNN, a fase de Berry, o $\mathcal{Z}_2$, etc.^{10,16,19}

literatura como "*bulk-edge correspondence*" e, a qual, entenderemos com mais detalhes a seguir considerando o modelo BHZ.

O BHZ é um modelo efetivo que descreve isolantes topológicos bidimensionais (2D - TIs). Quando proposto por Bernevig *et.al.*,¹⁷ foi derivado (como mostrado no Cap.(2)) considerando um poço quântico formado a partir de uma heteroestrutura de HgTe/CdTe, Figs.(4b) e (4d). Neste sistema, foi possível contornar o problema ocorrido com o grafeno devido ao fato do Te possuir um grande efeito spin-órbita e, também, do HgTe possuir já em seu *bulk* um ordenamento não trivial em suas bandas, o que propiciava encontrar um regime topológico[§] no qual o *gap* para as bandas de *bulk* era da ordem de 10^{-3} eV.

Figura 4 – Heteroestrutura de HgTe/CdTe crescida na direção z com o tamanho d do poço quântico no regime trivial ($d < d_c$) em a) e no regime topológico ($d > d_c$) em c), com d_c sendo o tamanho crítico. Em b) e d) é representado a estrutura de bandas referentes aos níveis de energia E_1 e H_1 do poço ao longo de uma das direções do plano xy , com um *gap* E_g . Quando $d < d_c$ e $d > d_c$ têm-se, respectivamente, $E_1 > H_1$ (isolante normal-NI) e $E_1 < H_1$ (isolante topológico - TI).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.(4), é representado o poço quântico formado na região em que o HgTe é confinado pelas camadas de CdTe. O modelo BHZ descreve então a região do plano xy , onde as bandas de energia (formadas pelos níveis E_1 de elétrons e H_1 de buracos) podem se apresentar ordenadas trivialmente (em que $E_1 > H_1$) resultando em um NI com um *gap* E_g , Fig.(4b), ou ordenadas não trivialmente (em que $H_1 > E_1$) resultando em um TI

[§] Em outros trabalhos^{20–,21} é mostrado a possibilidade de mapear o modelo BHZ para outros materiais em que o ordenamento das bandas do HgTe não está presente. Em outras palavras, o ordenamento das bandas é essencial no sistema final, e.g., para a heteroestrutura.

com $\text{gap} - E_g$, Fig.(4d). Devido à presença de diferentes simetrias no Hamiltoniano BHZ, como discutido no Cap.(2), cada banda é duplamente degenerada em spin.

É importante destacar que (como discutido na ref.²²), a ordem 4 do Hamiltoniano matricial do modelo BHZ está relacionado ao número mínimo para que seja possível obter um isolante com a presença da simetria de reversão temporal e com spin. Em outras palavras, um isolante necessita de ao menos duas bandas (uma para $E(k_x) > 0$ e outra para $E(k_x) < 0$), mas com a simetria de reversão temporal cada uma dessas é multiplicada por um fator 2 referente ao spin, uma vez que esta simetria faz com que dois estados (um em k e outro em $-k$) com spins apontando em direções opostas possuam a mesma energia (veja seção (2.2)).

Como mencionado anteriormente, os estados metálicos ocorrem no regime topológico quando o sistema possui alguma fronteira. Para um sistema 2D, como a região na qual o HgTe está confinado na Fig.(4), essa fronteira pode ser feita em alguma região do plano xy com um isolante normal (e.g., um NI obtido do modelo BHZ em que $d < d_c$)[¶], uma maneira de fazer isso é considerarmos uma junção, Fig.(5b), entre um NI e um TI obtidos a partir dos diferentes casos do HgTe/CdTe na Fig.(4).

Figura 5 – Interface entre uma região trivial (2D - NI) e outra topológica (2D - TI) em a) com os estados condutores em vermelho e azul, referentes as bandas de mesma cor em b). Estes estados de propagam ao longo da interface, em direções opostas e com spins opostos, indicados pelas flechas pretas ($\uparrow$ e $\downarrow$) em b).

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig.(5) mostra o que ocorre quando é realizado uma interface entre uma região trivial (NI) com outra topológica (TI). Na região da interface, surgem estados metálicos que se deslocam em direções opostas e com spins opostos. Assim, a estrutura de bandas passa à apresentar bandas condutoras na região do gap das bandas de *bulk*, devido ao *bulk-edge correspondence*, mostrado na Fig.(6).

Quando realizamos uma interface entre um TI e um NI, as bandas de *bulk* de cada um destes materiais possuem um ordenamento diferente, como visto na Fig.(4). Em outras palavras, o gap para o NI e o TI é, respectivamente, dado por E_g e $-E_g$ como mostrado

[¶] O vácuo pode ser considerado como um NI que possui $E_g \rightarrow +\infty$. Este é o caso para quando resolvemos numericamente o BHZ com condições *hard-wall* no Cap.(2).

Figura 6 – Para que as bandas do NI e do TI sejam ordenadas de maneira contrária, o *gap* E_g na interface TI/NI deve vir à fechar.

Fonte: Elaborada pelo autor.

na Fig.(6). O *bulk-edge correspondence* refere-se então a necessidade de que, ao mudar o *gap* de E_g para $-E_g$, este venha zerar em algum ponto para a interface resultando no aparecimento de bandas condutoras, Fig.(5b). Os estados metálicos são então ditos "topologicamente protegidos", pois enquanto o *gap* para as bandas de *bulk* do TI estiver presente, estes estados também estarão.

Não obstante, os estados na borda do TI são protegidos contra espalhamento pela simetria de reversão temporal. Essa possibilita que os estados sejam *helicals*, ou seja, dois estados com spins opostos se movendo em direções opostas em uma mesma borda do sistema. Este efeito de possuir o spin atrelado ao momento recebe o nome de *spin-momentum locking*, como mostrado na Fig.(7).

Figura 7 – Representação tridimensional da interface da Fig.(5a), i.e, o sistema é infinito para $x \rightarrow \pm$ e há somente uma interface para y . Note que para cada momento $\vec{k}$ há uma orientação diferente para o spin (flechas pretas par).

Fonte: Elaborada pelo autor.

1.2 Estados de bordas em junções

Os TIs de forma geral, têm sido largamente pesquisados para o seu uso em novas tecnologias devido a presença destes estado topológicos em suas bordas. Uma de suas aplicações, seria a possibilidade de servir como uma plataforma para a obtenção de Majoranas em matéria condensada.^{23–24}

Além disso, na área de spintrônica estes estados de bordas polarizados em spin têm sido também alvos de constantes pesquisas. Uma das suas potencialidades de uso, reside no fato de poder utilizar estes estados em junções com camadas magnéticas. Em outras palavras, os estados de uma camada de TI possibilitaria manipular a magnetização de uma camada ferromagnética, sem a necessidade de polarizar previamente a corrente elétrica. Deste modo, este sistema poderia ser implementado, e.g, em memórias magnéticas.^{25–26}

Deste modo, tendo em vista estas possíveis aplicações o foco deste trabalho foi o estudo de duas junções bidimensionais já previamente estudadas na literatura: isolante topológico/isolante normal (2D - TI/NI)²⁷ e um isolante topológico/ferromagneto condutor (2D - TI/FM).²⁸

1.3 Outline da dissertação

No Cap.(2), descrevemos em linhas gerais como o modelo BHZ é derivado utilizando o Hamiltoniano de Kane 8×8 . Para isso, resumimos a teoria do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ e a teoria de perturbação de Löwdin.

Também no Cap.(2) foi mostrado quais simetrias estão presentes no modelo BHZ e como são as matrizes de spin em sua base. Por fim, aplicamos o método das diferenças finitas (ou discretização) ao modelo BHZ para estudar a estrutura de bandas, os estados de *bulk* e de borda para uma fita de isolante topológico (2D - TI), enfatizando as simetrias ali presentes bem como o *bulk boundary correspondece*.

Revisamos brevemente o método *tight binding* (TB) no Cap.(3), tanto no formalismo contínuo (i.e., como normalmente é apresentado na ref.²⁹), como também no formalismo de segunda quantização. Considerando então este último formalismo e utilizando uma rede quadrada com uma base mínima, obtemos um modelo *tight binding* para um isolante topológico bi-dimensional, como na ref.,¹⁶ com seus parâmetros mapeados no modelo BHZ.

Ainda no Cap.(3), enfatizamos as diferenças presentes entre as matrizes de spin do modelo *tight binding* e aquelas obtidas do modelo BHZ, devido as diferenças na base dos dois modelos. Por fim, para uma geometria de fita obtemos resultados semelhantes aos das diferenças finitas e comparamos os dois métodos.

Para investigarmos estas duas junções, como mostrado no Cap.(4), utilizamos o método das diferenças finitas (também chamado aqui de discretização) para o modelo BHZ e, também, derivamos um modelo *tight binding* com uma base mínima tendo em vista o trabalho da ref.¹⁶ Mostramos como estes dois métodos podem ser mapeados um no outro, tendo em vista os termos que acoplam as duas camadas.

Para a junção 2D - TI/NI, exploramos aspectos até então não estudados no trabalho²⁷ como a obtenção da estrutura de bandas para o sistema como um todo (bandas de borda mais as de *bulk*) e a comparação entre os estados de *bulk* com os de borda,

através da textura de spins e o perfil das funções de onda, ambos ao longo da junção. Além disso, mostramos que a degenerescência em spin para cada ponto da estrutura de bandas é levantada não somente devido a quebra da simetria de inversão espacial, mas também devido à quebra da simetria-partícula buraco no sistema.

Na junção 2D - TI/FM reproduzimos alguns dos resultados presentes na ref.²⁸ e identificamos uma pequena correção relacionada com as matrizes de spin. Não obstante, abordamos com maiores detalhes os pontos de cruzamento da banda dos estados de borda e, também, como a magnetização afeta o *spin-momentum locking* para outros pontos na estrutura de bandas. Por fim, comparamos o modelo *tight binding* com um modelo discretizado análogo, tendo em vista possíveis correções vindas da base completa do modelo BHZ, as quais se mostram pequenas.

2 MODELO CONTÍNUO: BHZ

Neste capítulo iremos estudar o modelo derivado por Bernevig, Hughes e Zhang,¹⁷ conhecido como modelo BHZ. Na seção (2.1) descreveremos em linhas gerais como este modelo é deduzido a partir do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$, usando a teoria de perturbação de Löwdin; na seção (2.2) iremos derivar os operadores de spin na base do modelo BHZ e exploraremos as simetrias que o mesmo possui (como a reversão temporal e a simetria de inversão).

Por fim, na seção (2.3), aplicaremos o método das diferenças finitas (também denominado aqui como discretização) ao modelo BHZ em uma geometria de fita, afim de explorarmos a estrutura de bandas, as funções de onda para estados presentes no *bulk* e nas bordas do sistema, bem como a textura de spins ao longo da largura da fita. Veremos a correspondência entre o *bulk* e as bordas (i.e., "*bulk-edge corresponce*") para quando as bordas desta fita possuem condições periódicas e abertas de contorno.

2.1 Dedução do Modelo

Como mostrado em,^{17,30} e já explorado em outros trabalhos de nosso grupo,^{27,31} o BHZ é obtido a partir de uma heteroestrutura de HgTe/CdTe utilizando o modelo de Kane 8×8 e o formalismo de Löwdin.

Para que possamos compreender como Bernevig *et. al.* deriva o seu modelo em¹⁷ devemos entender como o modelo de Kane 8×8 (usado para derivar o modelo BHZ) é obtido a partir do método $\vec{k} \cdot \vec{p}$; para discussões mais detalhadas veja .³²⁻³⁵ De forma sucinta, o método $\vec{k} \cdot \vec{p}$ é uma técnica na qual conseguimos descrever a estrutura de bandas próxima a um ponto $\vec{k}_0$ onde temos um extremo de energia, a partir do conhecimento do Hamiltoniano e da base (obtida a partir de técnicas *abi-nitio*) que melhor descreve a região ao redor de $\vec{k}_0$. Consideremos o Hamiltoniano como sendo aquele dado para um elétron em um potencial periódico $V(\vec{r})$ e com spin-órbita,

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) - \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \vec{\sigma} \cdot [\vec{p} \times \vec{\nabla} V(\vec{r})]. \quad (2.1)$$

onde o terceiro termo ao lado direito da igualdade é o termo de spin-órbita, m_0 é a massa do elétron livre, $\vec{p}$ é o momento linear, c é a velocidade da luz e $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ é o operador vetorial das matrizes de Pauli associado ao spin $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$.^{33-34,36}

Como $V(\vec{r})$ possui a simetria de translação da rede cristalina podemos utilizar a função de Bloch

$$\Psi_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

onde n é o índice da banda, σ o índice de spin e $\vec{k}$ o vetor de onda, para obtermos a partir da Eq.(2.1) o chamado Hamiltoniano de Bloch $H(\vec{k})$.^{29,37} Utilizando as Eqs.(2.1) e (2.2)

na equação de Schrödinger $\hat{H}\Psi_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = E_n\Psi_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r})$ obtemos para $u_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r})$

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) - \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{\nabla}V) + \frac{\hbar^2}{2m_0}k^2 + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k} \cdot \vec{\Pi} \right] u_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = E_n(\vec{k})u_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r}), \quad (2.3)$$

com

$$\vec{\Pi} = \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}V). \quad (2.4)$$

Repare que os primeiros três termos dentro dos colchetes na Eq.(2.3) são equivalente aos de H , na Eq.(2.1), e os dois últimos são

$$H(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{k}^2 + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k} \cdot \vec{\Pi}, \quad (2.5)$$

tal que, a Eq.(2.3) pode ser escrita como

$$[H + H(\vec{k})]u_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = E_n(\vec{k})u_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r}). \quad (2.6)$$

Estamos interessados em um extremo de energia, tal que

$$\frac{\partial E(\vec{k}_0)}{\partial k_i} = 0. \quad (2.7)$$

Deste modo, podemos expandir $E_n(k)$ da Eq.(2.6) ao redor deste extremo, e então $H(\vec{k})$ torna-se uma perturbação para H .

Devemos notar que, para os materiais pertencentes ao grupo II-VI como o HgTe e CdTe, $\vec{k}_0$ se encontra no ponto de alta simetria Γ , ou seja, em $\vec{k}_0 = \vec{0}$.³⁸⁻³⁹ Considerando $\vec{k} = \vec{k}_0 = \vec{0}$ na Eq.(2.6), supomos que a sua solução é dada por um conjunto $\{u_{n,\vec{0},\sigma}(\vec{r})\}$ o qual também é solução para H . Utilizando a notação $\langle \vec{r} | n, \vec{k}, \sigma \rangle = u_{n,\vec{k},\sigma}(\vec{r})$ temos agora $\{|n, \vec{0}, \sigma\rangle\}$ como a solução para $\vec{k} = \vec{0}$, e assim, a seguinte expansão

$$\begin{aligned} |n, \vec{k}, \sigma\rangle &= \sum_{n', \sigma'} a_{n,n',\sigma'}(\vec{k}) |n', \vec{0}\rangle \otimes |\sigma\rangle, \\ &= \sum_{n', \sigma} a_{n,n',\sigma}(\vec{k}) |n', \sigma\rangle, \end{aligned} \quad (2.8)$$

pode ser utilizada em

$$\left[\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) - \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{\nabla}V) + \frac{\hbar^2}{2m_0}k^2 + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k} \cdot \vec{\Pi} \right] |n, \vec{k}, \sigma\rangle = E_n(\vec{k}) |n, \vec{k}, \sigma\rangle, \quad (2.9)$$

para reescrevermos a Eq.(2.6) como

$$[H + H(\vec{k})] \sum_{n', \sigma} a_{n,n',\sigma}(\vec{k}) |n', \sigma\rangle = E_n(\vec{k}) \sum_{n', \sigma} a_{n,n',\sigma}(\vec{k}) |n', \sigma\rangle. \quad (2.10)$$

Projetando a Eq.(2.10) em um autoestado de H dado por $\langle n'', \sigma' |$ temos que

$$\sum_{n', \sigma} \left\{ \left[E_{n'}(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} \right] \delta_{n'', n'} \delta_{\sigma', \sigma} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{P}_{n'' n'}^{\sigma' \sigma} + \Delta_{n'' n'}^{\sigma' \sigma} \right\} a_{n,n',\sigma}(\vec{k}) = E_n(\vec{k}) a_{n,n'',\sigma}(\vec{k}), \quad (2.11)$$

onde

$$\vec{P}_{n''n'}^{\sigma'\sigma} = \langle n'', \sigma' | \vec{\Pi} | n', \sigma \rangle, \quad (2.12)$$

e

$$\Delta_{n''n'}^{\sigma'\sigma} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \langle n'', \sigma' | \vec{p} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) | n', \sigma \rangle. \quad (2.13)$$

A partir dos termos entre chaves na Eq.(2.11) conseguimos construir uma matriz $N \times N$ com N sendo o número de elementos em $\{|n, \vec{0}\rangle\}$. Realizamos o truncamento em N elementos tendo o conhecimento de quais estados são de maior relevância para a descrição das bandas ao redor do ponto $\vec{k}_0$, para isso, são utilizados cálculos *ab-initio* alinhados com teoria de grupos.⁴⁰ Para os materiais HgTe e CdTe temos que ao redor do ponto Γ (i.e., $\vec{k}_0 = \vec{0}$) as bandas do tipo *s* e *p* são as de maior relevância, tal que $N = 8$, i.e., dois elementos para as do tipo *s* e seis para as do tipo *p*. Utilizamos assim a base usual do momento angular total $\{|J, m_J\rangle\}$ dada na Tab.1 e retirada da ref.,³⁶ em que J é o momento angular total e m_J a sua projeção.

Tabela 1 – Base do momento angular total $\{|J, m_J\rangle\}$, onde J é o momento angular total e m_J é a sua projeção. Γ_6 esta associado a simetria do tipo *s* (“*electron-like*”), já Γ_7 e Γ_8 estão associados a simetria do tipo *p* (“*hole-like*”).

$ u\rangle$	Γ	$ J, m_J\rangle$	u_{J, m_J}
$ u_1\rangle$	Γ_6	$ \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$i S\rangle \otimes \frac{1}{2}\rangle$
$ u_2\rangle$	Γ_6	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$i S\rangle \otimes -\frac{1}{2}\rangle$
$ u_3\rangle$	Γ_8	$ \frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(X\rangle + i Y\rangle) \otimes +\frac{1}{2}\rangle$
$ u_4\rangle$	Γ_8	$ \frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{6}}(X\rangle + i Y\rangle) \otimes -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} Z\rangle \otimes +\frac{1}{2}\rangle$
$ u_5\rangle$	Γ_8	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$\frac{-1}{\sqrt{6}}(X\rangle - i Y\rangle) \otimes +\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} Z\rangle \otimes -\frac{1}{2}\rangle$
$ u_6\rangle$	Γ_8	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}(X\rangle - i Y\rangle) \otimes -\frac{1}{2}\rangle$
$ u_7\rangle$	Γ_7	$ \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(X\rangle + i Y\rangle) \otimes -\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Z\rangle \otimes +\frac{1}{2}\rangle$
$ u_8\rangle$	Γ_7	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(X\rangle - i Y\rangle) \otimes +\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} Z\rangle \otimes -\frac{1}{2}\rangle$

Fonte: CALSAVERINI *et.al.*³⁶

Afim de utilizarmos a base descrita na Tab.1 para determinar os elementos de matriz entre chaves ao lado esquerdo da Eq.(2.11), devemos notar que apesar da base $\{|u_i\rangle\}$ (com $i = 1, 2, \dots, 8$) estar relacionada com as bandas mais relevantes em torno de $\vec{k}_0$ é possível que esta base seja suficiente para descrever a física do problema. Este é o caso do Hamiltoniano de Kane 8×8 a partir do qual o modelo BHZ é obtido, que necessita de correções advindas de bandas mais remotas. Assim sendo, devemos introduzir no que se segue o método de perturbação de Löwdin que nos permite levar em conta tais correções.

Para descrevermos a seguir o método de Löwdin,⁴¹ o qual possui estreita semelhança com outras técnicas de perturbação tal como a do "*Folding Down*" (veja, e.g., ref.³³), seguiremos a ref.³⁴ Consideremos um Hamiltoniano como exemplo H_e que pode ser expresso como a soma de duas partes

$$H_e = H^0 + H', \quad (2.14)$$

onde conhecemos as energias E_n e os autoestados $\{|n\rangle\}$ de H^0 , já H' é uma perturbação para H_e . Em seguida, assumamos que o conjunto $\{|n\rangle\}$ possa ser dividido em dois subespaços A e B , de maneira que estamos interessados somente no primeiro. A ideia do método de Löwdin consiste em conseguirmos encontrar uma transformação e^{-S} de maneira à eliminar os acoplamentos entre os subespaços A e B em H_e (e advindos de H'), tal que, possamos obter um Hamiltoniano efetivo $\tilde{H}$ o qual, por sua vez, é o resultado de considerarmos somente o subespaço A de H_e tratando o efeito do subespaço B em A (i.e., os acoplamentos entre os dois subespaços) como uma correção. De maneira mais explícita, sendo $\mathcal{M} = \{|m\rangle, |m'\rangle, \dots\}$ e $\mathcal{L} = \{|l\rangle, |l'\rangle, \dots\}$ com $\mathcal{M} \in A$ e $\mathcal{L} \in B$, temos que o Hamiltoniano efetivo $\langle m | \tilde{H} | m' \rangle = \tilde{H}_{mm'}$ é obtido a partir da seguinte expansão

$$\tilde{H}_{mm'} = H_{mm'}^0 + H'_{mm'} + \frac{1}{2} \sum_l H'_{m,l} H'_{l,m'} \left[\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E_{m'} - E_l} \right] + \dots \quad (2.15)$$

Note então que os dois primeiros termos ao lado direito da igualdade na Eq.(2.15), referem-se somente ao subespaço A , enquanto que a partir do terceiro termo temos correções advindas do subespaço B . Podemos, portanto, agora descrever em linhas gerais como obter o Hamiltoniano de Kane 8×8 de interesse aqui.

A dedução do modelo de Kane 8×8 envolve as seguintes considerações:

(i) Consideramos que $H^0 = H$ e $H' = H(\vec{k})$ para a Eq.(2.14) com H e $H(\vec{k})$ dados, respectivamente, pela Eq.(2.1) e Eq.(2.5).

(ii) Como descrito em,⁴² para o caso dos materiais HgTe e CdTe (presentes no grupo II-VI) podemos realizar a aproximação $\vec{\Pi} \rightarrow \vec{p}$ na Eq.(2.4) e assim obter $\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{P}_{n''n'}^{\sigma'\sigma} \approx \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{n''n'}^{\sigma'\sigma}$ na Eq.(2.11), pois a energia do termo

$$\frac{\hbar^2}{4m_0^3 c^2} \langle n'', \sigma' | \vec{k} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V) | n', \sigma \rangle \quad (2.16)$$

representa menos de 1 % da energia dada por $\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}_{n''n'}^{\sigma'\sigma} = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \langle n'', \sigma' | \vec{p} | n', \sigma \rangle$.

(iii) Assumimos o subespaço A formado pelo conjunto $\{|J, m_J\rangle\}$ da Tab.1. Já o conjunto B consideramos bandas remotas referentes aos estados de base de representações irredutíveis (veja refs.^{33,35}).

(iv) O método de Löwdin é utilizado truncando a Eq.(2.15) até a primeira ordem em energia. A partir de (i) e (ii), teremos então apenas termos referentes à $\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}$ acoplando

o subespaço de interesse A com B , ou seja,

$$\tilde{H}_{mm'} = H_{mm'} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_l \frac{|\langle l | \vec{k} \cdot \vec{p} | m \rangle|^2}{(E_m - E_l)} \quad (2.17)$$

com E_l dado pelas energias de bandas mais remotas e com $H_{mm'}$ dado por

$$H_{mm'} = \langle m | \frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{2m_0} k^2 | m' \rangle - \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle m | \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{\nabla} V) | m' \rangle + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \langle l | \vec{p} | l' \rangle. \quad (2.18)$$

Note que a Eq.(2.17) leva em conta também que o subespaço de interesse A é degenerado,³⁵ i.e., $E_m = E_{m'}$. Isto faz com que o fator $1/2$ presente na Eq.(2.15) deixe de aparecer para $\tilde{H}_{mm'}$.

Utilizando então as considerações (i), (ii), (iii) e (iv), podemos calcular cada termo $\tilde{H}_{mm'}$ para a Eq.(2.17), o que vem nos resultar o Hamiltoniano de Kane 8×8

$$H_{8 \times 8}^{kane} = \begin{pmatrix} h_{2 \times 2} & h_{2 \times 6} \\ h_{6 \times 2}^\dagger & h_{6 \times 6} \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

$$h_{2 \times 2} = \begin{pmatrix} T & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

$$h_{6 \times 6} = \begin{pmatrix} U + V & -\bar{S}_- & R & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_- & -\sqrt{2}R \\ -\bar{S}_-^\dagger & U - V & C & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_- \\ R^\dagger & C^\dagger & U - V & \bar{S}_+^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_+ & -\sqrt{2}V \\ 0 & R^\dagger & \bar{S}_+ & U + V & \sqrt{2}R^\dagger & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_+ \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_-^\dagger & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_+^\dagger & \sqrt{2}R & U - \Delta & C \\ -\sqrt{2}R^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_-^\dagger & -\sqrt{2}V & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_+^\dagger & C^\dagger & U - \Delta \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

$$h_{2 \times 6} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}P k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P k_z & \frac{1}{\sqrt{6}}P k_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}P k_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}P k_- \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}P k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P k_z & \frac{1}{\sqrt{2}}P k_- & -\frac{1}{\sqrt{3}}P k_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}P k_z \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

onde

$$T = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0}(2F + 1)k_{||}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0}k_z(2F + 1)k_z, \quad (2.23)$$

$$U = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 k_{||}^2 + k_z \gamma_1 k_z), \quad (2.24)$$

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_2 k_{||}^2 - 2k_z \gamma_2 k_z), \quad (2.25)$$

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}(\mu k_+^2 - \bar{\gamma} k_-^2), \quad (2.26)$$

$$\bar{S}_\pm = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}k_\pm(\{\gamma_3, k_z\} + [\kappa, k_z]), \quad (2.27)$$

$$\tilde{S}_\pm = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}k_\pm(\{\gamma_3, k_z\} - \frac{1}{3}[\kappa, k_z]), \quad (2.28)$$

$$C = \frac{\hbar^2}{m_0}k_-[\kappa, k_z], \quad (2.29)$$

$$\bar{\gamma} = \frac{(\gamma_3 + \gamma_2)}{2}, \quad (2.30)$$

$$\mu = \frac{(\gamma_3 - \gamma_2)}{2}. \quad (2.31)$$

com E_c e E_v sendo as energias, respectivamente, para as bandas de condução e valência em $\vec{k} = \vec{k}_0 = \vec{0}$; γ_1 , γ_2 e γ_3 são os chamados parâmetros de Luttinger^{33–35}, os quais estão relacionados com os termos $\frac{|\langle l|\vec{k} \cdot \vec{p}|m\rangle|^2}{(E_m - E_l)}$ da Eq.(2.17). Temos ainda os parâmetros

$$P = -\frac{\hbar}{m_0}\langle S|p_x|X\rangle = \hbar\sqrt{\frac{E_p}{2m_0}}, \quad (2.32)$$

$$\Delta = \frac{3\hbar^2}{4m_0^2c^2}\langle X|\frac{\partial V}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}|Y\rangle, \quad (2.33)$$

com $\langle S|p_x|X\rangle = \langle S|p_Y|Y\rangle = \langle S|p_x|Z\rangle$ e P sendo o parâmetro de Kane.^{34,36} Note que o Hamiltoniano, Eq.(2.19), já foi escrito tendo em mente que estamos interessados em uma heteroestrutura com z sendo o eixo de crescimento. Assim, consideramos $k_z \rightarrow k_z = \partial_z$ e realizamos a simetrização dos parâmetros que o acompanham, uma vez que estes mudam entre os materiais devido à dependência com o eixo z . Portanto, nas Eqs.(2.23)-(2.29), temos o anti-comutador $\{a, b\}$ e comutador o $[a, b]$ para qualquer elementos a e b .

Por outro lado, considerando em *bulk* cada um destes materiais que formam a heteroestrutura, não necessitamos realizar a mudança $k_z \rightarrow k_z = \partial_z$. Então, afim de diagonalizarmos o Hamiltoniano de Kane, Eq.(2.19), utilizamos os parâmetros $\mathcal{P}_{01}$ e $\mathcal{P}_{02}$ presentes na Tab. 2 e mantemos k_z com $k_x = k_y = 0$ obtendo a estrutura de bandas presente na Fig.(8).

Tabela 2 – Parâmetros do modelo de Kane 8×8 para os materiais HgTe e CdTe.

	$\mathcal{P}_{01} - \text{HgTe}$	$\mathcal{P}_{02} - \text{CdTe}$	$\mathcal{P}_2 - \text{Hg}_{0.32}\text{Cd}_{0.68}\text{Te}$
γ_1	4.1	1.47	2.3
γ_2	0.5	-0.28	-0.03
γ_3	1.3	0.03	0.44
κ	-0.4	-1.31	-1.02
F	0.0	-0.09	0.88
Δ	1.08	0.91	1.2
E_P	18.8	18.8	18.8
E_{Γ_8}	$E_c = 0$ meV	$E_v = -570$ meV	-387 meV
E_{Γ_6}	$E_v = -303$ meV	$E_c = 1036$ meV	607 meV
E_g	-303 meV	1606 meV	994 meV

Fonte: NOVIK *et.al.*⁴³

Na Fig.(8) as linhas tracejadas (contínuas) referem-se ao caso em que não temos (temos) as correções advindas de bandas remotas, i.e., quando os parâmetros de Luttinger são zero (diferentes de zero). Vemos que, tanto para o HgTe quanto para o CdTe, ao não considerarmos as correções das bandas remotas (i.e., tomando os parâmetros de Luttinger

Figura 8 – Estruturas de bandas para o HgTe (a) e para o CdTe (b); em ambos as linhas tracejadas e contínuas representam, respectivamente, os casos em que os parâmetros de Luttinger são nulos e não nulos; para o CdTe os estados $|\Gamma_8, \pm \frac{1}{2}\rangle$ e $|\Gamma_6, \pm \frac{1}{2}\rangle$ estão associados, respectivamente, as bandas de valência e condução enquanto que para o HgTe vemos um ordenamento invertido. Note ainda que as bandas associadas aos estados $|\Gamma_7, \pm \frac{1}{2}\rangle$ estão afastadas das demais em energia.

Fonte: Elaborada pelo autor.

iguais à zero) as curvaturas das bandas referentes aos estados de *heavy-hole* $|\Gamma_8, \pm \frac{3}{2}\rangle$ ficam erradas, quando comparadas com o caso em que as correções são consideradas (i.e.,

os parâmetros de Luttinger são diferentes de zero) e com os resultados experimentais.³⁹ Além disso, vemos que para o CdTe os estados $|\Gamma_8, \pm\frac{1}{2}\rangle$ (*light-hole*) e $|\Gamma_6, \pm\frac{1}{2}\rangle$ (*electron*) estão associados, respectivamente, à banda de valência e de condução, ou seja, temos um ordenamento normal. Por outro lado, as bandas para o HgTe possuem uma ordem invertida* para tais estados, ou seja, os estados $|\Gamma_8, \pm\frac{1}{2}\rangle$ e $|\Gamma_6, \pm\frac{1}{2}\rangle$ estão relacionados, respectivamente, com à banda de condução e de valência.

Uma vez que já temos a inversão das bandas em *bulk* para o HgTe este pode ser considerado um semiconductor topológico, mas para obtermos um isolante topológico devemos abrir um *gap* entre suas bandas de *light-hole* e *heavy-hole*. Para isso, devemos ter algum tipo de tensão no sistema o que pode ser alcançado construindo um poço quântico⁴⁴ em uma heteroestrutura HgTe/CdTe, como na Fig.(9), a qual vem então à nos dar o modelo BHZ.

Figura 9 – Representação da Heteroestrutura de HgTe/CdTe com o qual utilizamos para derivar o modelo BHZ. Para este sistema as bandas de *bulk* (representadas pelas parábolas em verde e em preto) possuem um ordenamento invertido para o poço $|z| < d$ quando comparadas com aquelas presentes nas regiões para $|z| > d$. Conforme aumentamos o tamanho d do poço, os subníveis de energia E_1 e HH_1 dentro do poço invertem. Esta inversão é o que resulta um isolante topológico no modelo efetivo do BHZ.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como temos uma heteroestrutura ao longo do eixo z , Fig.(9), os parâmetros do modelo de Kane $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \kappa, \dots$ podem mudar como

$$\mathcal{P}(z) = \begin{cases} \mathcal{P}_{01} & , |z| < d/2 \\ \mathcal{P}_2 & , |z| > d/2 \end{cases} \quad (2.34)$$

* Isto ocorre devido a correções vindas do termo de massa, de Darwin e o efeito spin-orbita.³¹

sendo $\mathcal{P}_{01}$ e $\mathcal{P}_2$ dados na Tab.2. Os parâmetros $\mathcal{P}_2$ são obtidos utilizando o método "Virtual Crystal Approximation"(VCA)⁴⁵ dado por

$$P(\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}) = (1-x)P(\text{HgTe}) + xP(\text{CdTe}), \quad (2.35)$$

com $x = 0.68$ e $P(m)$ sendo o parâmetro $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \kappa$ ou F do material m , e a energia do *gap* E_g dada por

$$E_g = (1-x)E_{g(\text{HgTe})} + xE_{g(\text{CdTe})} + (1-x)0.112. \quad (2.36)$$

Assim, em resumo, para deduzirmos o modelo de Bernevig *et.al.*¹⁷ devemos seguir os seguintes procedimentos e aproximações:

(1) A partir da Fig.(8) vemos que as bandas *split-off* estão afastadas energeticamente das demais, deste modo, podemos desprezá-las e com isso temos um Hamiltoniano de Kane 6×6 . Realizamos essa aproximação tendo em vista que a teoria de perturbação de Löwdin considera correções que vão com o inverso da energia.[†]

(2) Dividimos o Hamiltoniano de Kane $H_{6 \times 6}$, Eq.(2.19), como a soma de dois termos

$$H_{6 \times 6}(\vec{k}_{||}, \hat{k}_z) = H_{6 \times 6}(0, \hat{k}_z) + H'_{6 \times 6}(\vec{k}_{||}, 0), \quad (2.37)$$

e resolvemos $H_{6 \times 6}(0, \hat{k}_z) |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ para o sistema presente na Fig.(9) utilizando a aproximação da função envelope^{32-33,46} dada por

$$|\psi\rangle = \sum_{l=1}^6 f_l(z) |u_l\rangle, \quad (2.38)$$

com $|u_l\rangle$ dado pela Tab.1 e $f_l(z)$ sendo as funções envelopes. Assim, encontramos um conjunto de auto-estados dado por

$$|\psi_{E+}\rangle = f_{1,n}(z) \left| \Gamma_6, \frac{1}{2} \right\rangle + f_{4,n}(z) \left| \Gamma_8, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |E_n + \rangle, \quad (2.39)$$

$$|\psi_{E-}\rangle = f_{2,n}(z) \left| \Gamma_6, -\frac{1}{2} \right\rangle + f_{5,n}(z) \left| \Gamma_8, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |E_n - \rangle, \quad (2.40)$$

$$|\psi_{H+}\rangle = f_{3,n}(z) \left| \Gamma_8, \frac{3}{2} \right\rangle \equiv |HH_n + \rangle, \quad (2.41)$$

$$|\psi_{H-}\rangle = f_{6,n}(z) \left| \Gamma_8, -\frac{3}{2} \right\rangle \equiv |HH_n - \rangle, \quad (2.42)$$

onde n refere-se aos diferentes níveis de energia que aparecem dentro do poço ($|z| < d/2$), já $f_{1/2,n}(z)$ e $f_{4/5,n}(z)$ estão associadas, respectivamente, aos estados de *electron* e *light-hole*; devido a simetria de reflexão em z (i.e., o potencial de confinamento é simétrico

[†] Para o caso em que as *split-off* são consideradas verifique a ref.³¹

ao redor de $z = d/2$) temos que tanto $f_{1/2,n}(z)$ quanto $f_{4/5,n}(z)$ podem ser pares ou ímpares, sendo ainda possível mostrar que a paridade entre elas devem ser diferentes. Por fim, $f_{3/6,n}(z)$ estão relacionadas aos estados *heavy-holes*, os quais podem ser tanto pares como ímpares também devido a simetria de reflexão em z .

Afim de simplificarmos a obtenção do modelo BHZ e uma vez que estas funções envelopes se transformam em parâmetros no modelo efetivo final, não iremos aqui explicitá-las, mas em suma, estas possuem a forma de senos e cossenos hiperbólicos e são obtidas ao resolvermos $H_{6 \times 6}(0, \hat{k}_z) |\psi\rangle = E |\psi\rangle$. Para isso, aplicamos as condições de contorno em que as as funções de onda, Eqs.(2.39) - (2.42), devem ser contínuas em $z = \pm d/2$ e que para $z \rightarrow \pm\infty$ devem ser finitas e, assim, obtemos quatro equações transcendentais que ao serem resolvidas, utilizando os parâmetros da Tab.2, nos resultam as n energias dentro do poço mostrado na Fig.(10).

Figura 10 – Gráfico das energias para os estados $|E_n \pm\rangle$ e $|HH_n \pm\rangle$ em função do tamanho d do poço. As curvas em verde referem-se ao caso em que $f_{1/2,n}(z)$ e $f_{4/5,n}(z)$ são, respectivamente, ímpares e pares; as curvas em vermelho referem-se ao caso em que $f_{1/2,n}(z)$ e $f_{4/5,n}(z)$ são, respectivamente, pares e ímpares; já as curvas em preto e azul estão associadas, respectivamente, com as paridades ímpar e par para $f_{3/6,n}(z)$. A curva chamada de LH_n refere-se aos casos em que há uma maior contribuição da parte de *light-hole*, i.e., $\int f_{4/5,n}(z)dz > \int f_{1/2,n}(z)dz$ para o estado $|E_n \pm\rangle$. Em um tamanho $d_c \approx 67\text{\AA}$ as energias do poço $E_1 \pm$ e $HH_1 \pm$ se cruzam.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.(10) temos as soluções das energias para a região $|z| < d/2$ da Fig.(9). É possível notar que para um tamanho crítico de $d_c \approx 67\text{\AA}$ há um cruzamento entre as energias $E_1 \pm$ com as de $HH_1 \pm$, estas últimas passam a ter um valor maior do que as primeiras para $d > d_c$ e neste regime encontramos um isolante topológico. Portanto, a base do modelo BHZ vem do fato de considerarmos somente os estados $|E_1 \pm\rangle$ e $|H_1 \pm\rangle \equiv |HH_1 \pm\rangle$ referentes as energias para $n = 1$ que se cruzam em $d \approx d_c$.

(3) Tendo diagonalizado $H_{6 \times 6}(0, \hat{k}_z)$ e realizado a análise para as energias do poço, Fig.(10), para obtermos o Hamiltoniano do modelo BHZ utilizamos a teoria de perturbação de Löwdin, truncando até o segundo termo do lado direito da igualdade na Eq.(2.15). Consideramos então $\tilde{H} = H_{BHZ}$, $H' = H'_{6 \times 6}(\vec{k}_{||}, 0)$ e levamos em conta somente o subespaço de interesse A composto pela base $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$ dada por

$$|E_1+\rangle = f_1(z) \left| \Gamma_6, \frac{1}{2} \right\rangle + f_4(z) \left| \Gamma_8, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (2.43)$$

$$|E_1-\rangle = f_2(z) \left| \Gamma_6, -\frac{1}{2} \right\rangle + f_5(z) \left| \Gamma_8, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (2.44)$$

$$|H_1+\rangle = f_3(z) \left| \Gamma_8, \frac{3}{2} \right\rangle, \quad (2.45)$$

$$|H_1-\rangle = f_6(z) \left| \Gamma_8, -\frac{3}{2} \right\rangle. \quad (2.46)$$

(4) Além disso, devemos considerar o operador de reversão temporal $\mathcal{T} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{\sigma}_y} K = -i\hat{\sigma}_y \hat{K}$ (o qual será explorado para o modelo BHZ na seção (2.2)), tal que, atuando-o na base do modelo de Kane 6×6

$$\begin{cases} \mathcal{T} \left| \Gamma_6, \pm \frac{1}{2} \right\rangle &= \mp \left| \Gamma_6, \mp \frac{1}{2} \right\rangle \\ \mathcal{T} \left| \Gamma_8, \pm \frac{1}{2} \right\rangle &= \pm \left| \Gamma_8, \mp \frac{1}{2} \right\rangle \\ \mathcal{T} \left| \Gamma_8, \pm \frac{3}{2} \right\rangle &= \mp \left| \Gamma_8, \mp \frac{3}{2} \right\rangle \end{cases}, \quad (2.47)$$

possamos, ao atuar $\mathcal{T}$ na base do modelo BHZ

$$\begin{cases} \mathcal{T} |E+\rangle &= |E-\rangle \\ \mathcal{T} |H+\rangle &= |H-\rangle \\ \mathcal{T} |E-\rangle &= -|E+\rangle \\ \mathcal{T} |H-\rangle &= -|H+\rangle \end{cases}, \quad (2.48)$$

encontrar as seguintes relações para as funções envelopes

$$\left(f_3(z)\right)^* = -f_6(z) ; \quad \left(f_1(z)\right)^* = -f_2(z) ; \quad \left(f_4(z)\right)^* = f_5(z). \quad (2.49)$$

(5) Por fim, utilizando as considerações (1), (2), (3) e (4) obtemos os seguintes termos diferentes de zero para o modelo BHZ

$$\langle E_1 \pm | H_{BHZ} | E_1 \pm \rangle = C + M - (D + B)k_{||}^2, \quad (2.50)$$

$$\langle H_1 \pm | H_{BHZ} | H_1 \pm \rangle = C - M - (D - B)k_{||}^2, \quad (2.51)$$

$$\langle E_1 + |H_{BHZ}|H_1 + \rangle = -\langle H_1 - |H_{BHZ}|E_1 - \rangle = Ak_+, \quad (2.52)$$

$$\langle E_1 - |H_{BHZ}|H_1 - \rangle = -\langle H_1 + |H_{BHZ}|E_1 + \rangle = Ak_-, \quad (2.53)$$

sendo os parâmetros A, B, C, D e M dados por

$$A = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \int_{-\infty}^{+\infty} f_4^*(z) \left(\{\gamma_3(z), \hat{k}_z\} + \{\kappa(z), \hat{k}_z\} \right)^\dagger f_3(z) dz, \quad (2.54)$$

$$B = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \int_{-\infty}^{+\infty} |f_1(z)|^2 \frac{(2F(z) + 1)}{2} dz + \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(|f_4(z)|^2 \frac{(-\gamma_1(z) + \gamma_2(z))}{2} + |f_3(z)|^2 \frac{(\gamma_1(z) + \gamma_2(z))}{2} \right) dz, \quad (2.55)$$

$$D = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \int_{-\infty}^{+\infty} |f_1(z)|^2 \frac{(2F(z) + 1)}{2} dz + \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(|f_4(z)|^2 \frac{(-\gamma_1(z) + \gamma_2(z))}{2} - |f_3(z)|^2 \frac{(\gamma_1(z) + \gamma_2(z))}{2} \right) dz, \quad (2.56)$$

$$C = \frac{E_{E_1\pm} + E_{H_1\pm}}{2}, \quad (2.57)$$

$$M = \frac{E_{E_1\pm} - E_{H_1\pm}}{2}. \quad (2.58)$$

Observe que estes parâmetros contidos no modelo BHZ possuem relação direta com integrais das funções envelopes, que por sua vez dependem do tamanho d do poço. Com a Eq.(2.58), vemos que o parâmetro que controla a inversão das bandas neste modelo é dado por M , tal que, quando $E_{E_1\pm} > E_{H_1\pm}$ encontramos o regime normal $M > 0$, mas ao termos $E_{E_1\pm} < E_{H_1\pm}$ (i.e., $d > d_c$) obtemos $M < 0$ referente ao limite topológico.

Portanto, a partir das Eqs.(2.50) - (2.53), o Hamiltoniano final do modelo BHZ na base $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$ pode ser escrito como

$$H_{TI}(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} \epsilon(\vec{k}_{||}) + M(\vec{k}_{||}) & Ak_+ & 0 & 0 \\ Ak_- & \epsilon(\vec{k}_{||}) - M(\vec{k}_{||}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon(\vec{k}_{||}) + M(\vec{k}_{||}) & -Ak_- \\ 0 & 0 & -Ak_+ & \epsilon(\vec{k}_{||}) - M(\vec{k}_{||}) \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

com $H_{TI} \equiv H_{BHZ}$, e as cores azul e vermelho referentes aos blocos $+$ (i.e., $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle\}$) e $-$ (i.e., $\{|E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$), respectivamente. Ainda, de maneira mais compacta, a Eq.(2.59) pode ser reescrita como

$$H_{TI}(k_x, k_y) = \epsilon(\vec{k}_{||})\sigma_0 \otimes \tau_0 + M(\vec{k}_{||})\sigma_0 \otimes \tau_z + Ak_x\sigma_z \otimes \tau_x + Ak_y\sigma_0 \otimes \tau_y. \quad (2.60)$$

com $\epsilon(\vec{k}_{||}) = (C - Dk_{||}^2)$, $M(\vec{k}_{||}) = (M - Bk_{||}^2)$ e $k_{||}^2 = k_x^2 + k_y^2$; onde $\sigma_0 = 1_{2 \times 2}$ e $\tau_0 = 1_{2 \times 2}$ atuam, respectivamente, no espaço de spin e de pseudo-spin. Diagonalizando então este Hamiltoniano, encontramos as seguintes energias

$$E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) = C - Dk_{||}^2 \pm \eta \sqrt{A^2 k_{||}^2 + (M - Bk_{||}^2)^2}, \quad (2.61)$$

com seus respectivos auto-estados dado por

$$|\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = \mathcal{C} e^{i\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} |\psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle, \quad (2.62)$$

onde $\mathcal{C}$ é a constante de normalização e

$$\begin{aligned} |\psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle &= \eta \left(\frac{M - Bk_{||}^2 \pm [A^2 k_{||}^2 + (M - Bk_{||}^2)^2]^{1/2}}{A(k_x - \eta i k_y)} \right) |E_1 \eta\rangle + |H_1 \eta\rangle \\ &= \eta g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |E_1 \eta\rangle + |H_1 \eta\rangle, \end{aligned} \quad (2.63)$$

e $\eta = \pm$, ou seja, o índice relacionado ao bloco + ou - do Hamiltoniano H_{TI} , Eq.(2.59). Por fim, mantendo $k_x = k$ e assumindo $k_y = 0$ (pois o modelo BHZ é isotrópico) encontramos a estrutura de bandas presente na Fig.(11), considerando as Eqs.(2.61) e os valores dos respectivos parâmetros da Tab.3 .

Tabela 3 – Parâmetros para o modelo BHZ para $d \approx 70$ Å.

$M = -10.0$ meV
$A = 375$ meV.nm
$B = -1120$ meV.nm ²
$C = 0$ meV
$D = -730$ meV.nm ²

Fonte: MICHETTI *et.al.*²⁷

Na Fig.(11) temos a estrutura de bandas em *bulk* para o modelo BHZ, com as cores representando a contribuição dos estados $|E_1 \pm\rangle$ e $|H_1 \pm\rangle$, i.e., quanto mais amarelo (preto) maior a contribuição do estado $|E_1 \pm\rangle$ ($|H_1 \pm\rangle$). A partir da Fig.(11a), em que $M > 0$, encontramos um regime não topológico no qual as bandas possuem um ordenamento normal, i.e., as amarelas e pretas referem-se, respectivamente, às de condução e de valência.

Por outro lado, ao termos $M < 0$ vemos na Fig.(11b) que as bandas referentes aos estados $|E_1 \pm\rangle$ e $|H_1 \pm\rangle$ adquirem uma ordem invertida que, por sua vez, torna-se cada vez maior (tendo em vista a porcentagem da contribuição pelo mapa de cores) conforme aproximamos da região do *gap* e de $k = 0$. Neste regime em que ocorre a inversão, como veremos nas seções na seção (2.3), é onde encontramos estados presentes na borda do sistema quando o modelo BHZ passa à ser considerado em uma geometria finita.

Figura 11 – Estrutura de bandas para o *bulk* do modelo BHZ, com o mapa de cores representando a contribuição dos termos associados aos elétrons $|E_1 \pm \rangle$ ou aos buracos $|H_1 \pm \rangle$. Para $M > 0$ em a) tem-se o regime não topológico e para $M < 0$ em b) tem-se o regime topológico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

2.2 Simetrias presentes no BHZ

O modelo BHZ possui diferentes simetrias,³⁰ as quais nos auxiliam em calcularmos os invariantes topológicos comentado na introdução, bem como simplificar certas contas a partir de seu Hamiltoniano, Eq.(2.59). Entretanto, estas simetrias podem vir a serem quebradas em certas situações, e nestes casos, podemos nos perguntar o que ocorre com a estrutura de bandas, os estados de *bulk* e os de bordas do TI.

Vamos aqui sumarizar as relações de simetria presentes no *bulk* do TI - Eq.(2.59), para então explorarmos algumas destas simetrias para duas junções com TI no Cap.(4).

2.2.1 Reversão temporal

O operador de reversão temporal é definido, para partículas de spin meio,⁴⁷ como $\hat{\mathcal{T}} = e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{\sigma}_y} K = -i\hat{\sigma}_y \hat{K}$ com $\hat{K}$ sendo o operador de conjugação. Para escrevermos $\hat{\mathcal{T}}$ na base em que obtemos o modelo BHZ $\{|\lambda\rangle\} = \{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$, devemos realizar a seguinte expansão

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T} &= \sum_{\lambda, \lambda'} \langle \lambda | \hat{\mathcal{T}} | \lambda' \rangle | \lambda \rangle \langle \lambda' | \\
 &= \sum_{\lambda, \lambda'} \langle \lambda | (-i\hat{\sigma}_y \hat{K}) | \lambda' \rangle \hat{K} | \lambda \rangle \langle \lambda' | \\
 &= \sum_{\lambda, \lambda'} \mathcal{T}_{\lambda \lambda'} \hat{K} | \lambda \rangle \langle \lambda' |,
 \end{aligned} \tag{2.64}$$

onde utilizamos a propriedade distributiva do operador de conjugação $\hat{K}ab = \hat{K}a\hat{K}b$ e $\mathcal{T}_{\lambda\lambda'} = \langle \lambda | \hat{\mathcal{T}} | \lambda' \rangle$. Então, através das Eqs.(2.47), (2.48) e (2.49), calculamos os elementos de matriz $\mathcal{T}_{\lambda\lambda'}$ resultando-nos que o operador $\hat{\mathcal{T}}$ na base do modelo BHZ é dado por

$$\mathcal{T} = -i\sigma_y \otimes \tau_0 \hat{K}, \quad (2.65)$$

com σ_y e $\tau_0 = 1_{2 \times 2}$ atuando, respectivamente, no espaço de spin e de pseudo-spin.

Para que um Hamiltoniano de Bloch $H(\vec{k})$ possua a simetria de reversão temporal precisamos ter que $\mathcal{T} H(\vec{k}) \mathcal{T}^{-1} = H(-\vec{k})$.⁴⁸ Para mostrarmos esta relação no modelo BHZ, partimos da Eq.(2.60) com $H_{TI}(\vec{k}_{||}) \equiv H_{TI}(k_x, k_y)$ e considermos os comutadores dados por

$$\tau_z = \frac{1}{2i}[\tau_x, \tau_y] ; \quad \sigma_z = \frac{1}{2i}[\sigma_x, \sigma_y], \quad (2.66)$$

e assim

$$\begin{aligned} \mathcal{T} H_{TI}(\vec{k}_{||}) &= \epsilon(\vec{k}_{||}) (\sigma_0 \otimes \tau_0) \mathcal{T} + M(\vec{k}_{||}) (\sigma_0 \otimes \tau_z) \mathcal{T} - A k_x (\sigma_z \otimes \tau_x) \mathcal{T} - A k_y (\sigma_0 \otimes \tau_y) \mathcal{T} \\ &= H_{TI}(-\vec{k}_{||}) \mathcal{T} \end{aligned} \quad (2.67)$$

e como $\mathcal{T} \mathcal{T}^{-1} = 1_{4 \times 4}$, temos de fato que $\mathcal{T} H_{TI}(\vec{k}_{||}) \mathcal{T}^{-1} = H_{TI}(-\vec{k}_{||})$. Busquemos agora como os auto-estados, Eq.(2.62), mudam com o operador de reversão temporal $\mathcal{T}$. Para isso reescrevamos $|\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle$ como

$$|\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} \eta |\eta\rangle \otimes (g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle), \quad (2.68)$$

com $\eta = \pm$. Atuando $\mathcal{T}$ na Eq.(2.68) encontramos

$$\begin{aligned} \mathcal{T} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} \eta (-i\sigma_y \otimes \tau_0 \hat{K}) (|\eta\rangle \otimes (g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle)) \\ &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} \eta (-\delta_{\eta,+} |-\rangle + \delta_{\eta,-} |+\rangle) \otimes (g_{\pm}^{\bar{\eta}}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle), \end{aligned} \quad (2.69)$$

sendo $\bar{\eta} = -\eta$. De maneira mais explícita, para $\eta = +$, temos da Eq.(2.69) que

$$\begin{aligned} \mathcal{T} |\Psi_{\pm}^{+}(\vec{k}_{||})\rangle &= -\mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} |-\rangle \otimes (g_{\pm}^{+}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle) \\ &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} |-\rangle \otimes (g_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle) \\ &= |\Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||})\rangle, \end{aligned} \quad (2.70)$$

com o fato de que $g_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}) = -g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})$. Já, para $\eta = -$, obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{T} |\Psi_{\pm}^{-}(\vec{k}_{||})\rangle &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} |+\rangle \otimes (g_{\pm}^{-}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle) \\ &= -\mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} |+\rangle \otimes (g_{\pm}^{+}(-\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle) \\ &= -|\Psi_{\pm}^{+}(-\vec{k}_{||})\rangle. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Temos ainda que se $H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle$ é válida para $\eta = \pm$, então aplicando $\mathcal{T}$ em ambos lados da igualdade encontramos para $\eta = +$

$$\mathcal{T} H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{+}(\vec{k}_{||})\rangle = E_{\pm}^{+}(\vec{k}_{||}) \mathcal{T} |\Psi_{\pm}^{+}(\vec{k}_{||})\rangle, \quad (2.72)$$

tal que, o lado esquerdo da igualdade resulta em

$$\begin{aligned}\mathcal{T} H_{TI}(\vec{k}_{||}) \left| \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right\rangle &= \mathcal{T} H_{TI}(\vec{k}_{||}) \mathcal{T}^{-1} \mathcal{T} \left| \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right\rangle \\ &= H_{TI}(-\vec{k}_{||}) \mathcal{T} \left| \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right\rangle \\ &= E_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \left| \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right\rangle,\end{aligned}\tag{2.73}$$

enquanto que o lado direito da igualdade na Eq.(2.72) nos resulta em

$$\mathcal{T} \left| \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right\rangle \stackrel{\text{Eq.(2.70)}}{=} \left| \Psi_{\pm}^{-}(\vec{k}_{||}) \right\rangle,\tag{2.74}$$

e portanto, considerando as Eqs.(2.73) e (2.74) encontramos que $E_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) = E_{\pm}^{+}(\vec{k}_{||})$. De maneira semelhante, encontramos a partir de $\eta = -$, que $E_{\pm}^{+}(-\vec{k}_{||}) = E_{\pm}^{-}(\vec{k}_{||})$. Deste modo, vemos que $\hat{\mathcal{T}}$ relaciona as energias em $\vec{k}_{||}$ e em $-\vec{k}_{||}$ como

$$E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) = E_{\pm}^{\bar{\eta}}(-\vec{k}_{||}),\tag{2.75}$$

com $\bar{\eta} = -\eta$.

Como estaremos interessados em estudar os estados de *bulk* e de borda para o modelo BHZ nas próximas seções, vamos aqui deduzir uma expressão que será útil para analisarmos os resultados da textura de spin lá presentes. Utilizando as Eqs.(2.70)-(2.71), temos que

$$\begin{aligned}\left\langle \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right| \sigma_z \left| \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right\rangle &= \left\langle \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right| \mathcal{T}^{-1} \mathcal{T} \sigma_z \mathcal{T}^{-1} \mathcal{T} \left| \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right\rangle \\ &= \left\langle \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right| \mathcal{T} \sigma_z \mathcal{T}^{-1} \left| \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right\rangle \\ &= -\left\langle \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right| \sigma_z \mathcal{T} \mathcal{T}^{-1} \left| \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right\rangle \\ &= -\left\langle \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right| \sigma_z \left| \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right\rangle,\end{aligned}\tag{2.76}$$

relação esta que pode ser escrita como

$$\left\langle \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right| \sigma_z \left| \Psi_{\pm}^+(\vec{k}_{||}) \right\rangle = -\left\langle \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right| \sigma_z \left| \Psi_{\pm}^{-}(-\vec{k}_{||}) \right\rangle,\tag{2.77}$$

e, assim, para $\vec{k}_{||}$ e $-\vec{k}_{||}$ obtemos valores médios de spin iguais em módulo e diferentes em sinais, ou seja, temos spins invertidos quando comparamos $\vec{k}_{||}$ com $-\vec{k}_{||}$. Uma vez que não temos termos que acoplam o bloco + e - no modelo BHZ, demonstramos facilmente que

$$\left\langle \Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) \right| \sigma_x \left| \Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) \right\rangle = \left\langle \Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) \right| \sigma_y \left| \Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) \right\rangle = 0.\tag{2.78}$$

2.2.2 Partícula - buraco

O modelo BHZ, Eq.(2.60), deduzido na seção (2.1) é expresso na base $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$ com E_1 e H_1 representando, respectivamente, os estados presentes na banda de condução e de valência, i.e., representam partículas e buracos. Podemos então ter a simetria de partícula - buraco associado à um operador $\mathcal{P}$, de maneira semelhante ao que

é visto para um supercondutor do tipo p , tal que, quando o seu Hamiltoniano $H(\vec{k})$ possui esta simetria obtemos que $\mathcal{P}H(\vec{k})\mathcal{P}^{-1} = -H(-\vec{k})$.⁴⁸

Para o modelo BHZ temos que $\mathcal{P} = \sigma_z \otimes \tau_x K^{49,50}$ deste modo

$$\begin{aligned} \mathcal{P} H_{TI}(\vec{k}_{||}) &= \mathcal{P} \epsilon(\vec{k}_{||}) \sigma_0 \otimes \tau_0 + \mathcal{P} M(\vec{k}_{||}) \sigma_0 \otimes \tau_z + \\ &+ \mathcal{P} A k_x \sigma_z \otimes \tau_x + \mathcal{P} A k_y \sigma_0 \otimes \tau_y \\ &= \epsilon(\vec{k}_{||}) \sigma_0 \otimes \tau_0 \mathcal{P} - M(\vec{k}_{||}) \sigma_0 \otimes \tau_z \mathcal{P} + \\ &+ A k_x \sigma_z \otimes \tau_x \mathcal{P} + A k_y \sigma_0 \otimes \tau_y \mathcal{P}, \end{aligned} \quad (2.79)$$

e como $\mathcal{P}\mathcal{P}^{-1} = 1_{4 \times 4}$ obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{P} H_{TI}(\vec{k}_{||}) \mathcal{P}^{-1} &= \epsilon(\vec{k}_{||}) \sigma_0 \otimes \tau_0 - M(\vec{k}_{||}) \sigma_0 \otimes \tau_z + A k_x \sigma_z \otimes \tau_x + A k_y \sigma_0 \otimes \tau_y \\ &\neq -H_{TI}(-\vec{k}_{||}). \end{aligned} \quad (2.80)$$

Como $\epsilon(\vec{k}_{||}) = C - Dk_{||}^2$, temos que a desigualdade da Eq.(2.80) ocorre devido ao fato de C e D serem diferentes de zero, ou seja, o modelo BHZ possui em *bulk* a quebra da simetria de partícula - buraco. Por outro lado, se considerarmos que $C = D = 0$ então encontramos que

$$\mathcal{P} H_{TI}(\vec{k}_{||}) \mathcal{P}^{-1} = -H_{TI}(-\vec{k}_{||}), \quad (2.81)$$

e, assim, o modelo BHZ passa a ter a simetria partícula - buraco.

A partir da relação do operador $\mathcal{P}$ com o Hamiltoniano H_{TI} , podemos buscar uma relação para as energias $E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})$ e seus auto-estados $|\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle$ utilizando o operador de simetria partícula - buraco. Em outras palavras, considerando que

$$H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle \quad (2.82)$$

e aplicando $\mathcal{P}$ nos dois lados da igualdade da Eq.(2.82) obtemos

$$\mathcal{P} H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) \mathcal{P} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle, \quad (2.83)$$

sendo que o lado esquerdo da igual é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{P} H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle &= \mathcal{P} H_{TI}(\vec{k}_{||}) \mathcal{P}^{-1} \mathcal{P} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle \\ &= -H_{TI}(-\vec{k}_{||}) \mathcal{P} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle \\ &= -E(-\vec{k}_{||}) \mathcal{P} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle, \end{aligned} \quad (2.84)$$

e portanto, através das Eqs.(2.83) e (2.84) vemos que a energia $E(-\vec{k}_{||})$ do estado $\mathcal{P} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle$ relaciona com a energia $E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})$ do estado $|\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle$ como

$$E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) = -E_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}). \quad (2.85)$$

A Eq.(2.85) nos diz que, quando $H_{TI}(\vec{k}_{||})$ possui a simetria de partícula-buraco isto nos resulta que, se há um estado com energia $E^{\eta}(\vec{k}_{||})$ na banda de condução então por meio de $\mathcal{P}$ encontramos um outro estado na banda de valência com energia $-E^{\eta}(-\vec{k}_{||})$. Isto se traduz em termos bandas simétricas ao redor de $E = 0$, como veremos na seção (2.3).

2.2.3 Inversão espacial

A simetria de inversão envolve aplicar um operador $\hat{\mathcal{I}}$ para em um ket do espaço real $|\vec{r}\rangle$, de maneira que obtemos

$$\hat{\mathcal{I}}|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle \quad (2.86)$$

ou, para um Hamiltoniano $H(\vec{k})$ temos que $\hat{\mathcal{I}} H(\vec{k}) \hat{\mathcal{I}}^{-1} = H(-\vec{k})$.^{42, 48, 51} Para o modelo BHZ, Eq.(2.60), o operador de inversão é dado por $\mathcal{I} = -\sigma_0 \otimes \tau_z$,³⁰ com o qual é possível mostrar através das Eqs.(2.66) que

$$\begin{aligned} \mathcal{I} H_{TI}(\vec{k}_{||}) &= \epsilon(\vec{k}_{||}) \sigma_0 \otimes \tau_0 \mathcal{I} + M(\vec{k}_{||}) \sigma_0 \otimes \tau_z \mathcal{I} - A k_x \sigma_z \otimes \tau_x \mathcal{I} - A k_y \sigma_0 \otimes \tau_y \mathcal{I} \\ &= H_{TI}(-\vec{k}_{||}), \mathcal{I} \end{aligned} \quad (2.87)$$

como temos que $\mathcal{I}\mathcal{I}^{-1} = 1_{4 \times 4}$, então da Eq.(2.87) obtemos que $\mathcal{I} H_{TI}(\vec{k}_{||}) \mathcal{I}^{-1} = H_{TI}(-\vec{k}_{||})$.

Busquemos agora como os auto-estados $|\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle$, Eq.(2.63), se modificam com o operador $\mathcal{I}$ e qual a relação para as energias que conseguimos a partir disso. De maneira semelhante ao realizado para o operador de reversão temporal, temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{I} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} \eta \left(-\sigma_0 \otimes \tau_z \right) |\eta\rangle \otimes \left(g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle \right) \\ &= -\mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} \eta |\eta\rangle \otimes \left(g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle - |H_1\rangle \right) \\ &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} \eta |\eta\rangle \otimes \left(g_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle \right) \\ &= |\Psi_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||})\rangle, \end{aligned} \quad (2.88)$$

e, portanto,

$$\mathcal{I} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = |\Psi_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||})\rangle. \quad (2.89)$$

A partir da Eq.(2.89) conseguimos encontrar uma relação para as energias, ou seja, multiplicando pela esquerda por $\mathcal{I}$ toda a equação $H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle$ temos

$$\mathcal{I} H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) \mathcal{I} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle, \quad (2.90)$$

tal que, o lado esquerdo pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{I} H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle &= \mathcal{I} H_{TI}(\vec{k}_{||}) \mathcal{I}^{-1} \mathcal{I} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle \\ &= H_{TI}(-\vec{k}_{||}) \mathcal{I} |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle \\ &= H_{TI}(-\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||})\rangle \\ &= E_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||})\rangle, \end{aligned} \quad (2.91)$$

onde utilizamos a Eq.(2.89). Assim, a partir das Eqs.(2.90) e (2.91) encontramos que as energias em $\vec{k}_{||}$ e em $-\vec{k}_{||}$ possuem a seguinte relação

$$E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) = E_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}). \quad (2.92)$$

Combinando o resultado da Eq.(2.92) com o resultado advindo da simetria de reversão temporal, $E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) = E_{\pm}^{\bar{\eta}}(-\vec{k}_{||})$, obtemos que em $\vec{k}_{||}$ e em $-\vec{k}_{||}$ temos estados degenerados uma vez que

$$\begin{cases} E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) &= E_{\pm}^{\bar{\eta}}(\vec{k}_{||}) \\ E_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}) &= E_{\pm}^{\bar{\eta}}(-\vec{k}_{||}) \end{cases}, \quad (2.93)$$

em outras palavras, tanto em $\vec{k}_{||}$ quanto em $-\vec{k}_{||}$ temos dois estados com spins opostos.

2.2.4 Rotação para o eixo z

Por fim, o modelo BHZ é isotrópico para o plano xy e assim possui a simetria de rotação em torno do eixo z para qualquer ângulo θ ,³⁰ com seu operador dado por

$$R_z(\theta) = e^{i\theta \sigma_z \otimes (2-\tau_z)/2}, \quad (2.94)$$

tal que, considerando um caso particular de $\theta = \pi$ e expandindo a exponencial em $R_z(\theta)$ obtemos que

$$R_z(\pi) = -i\sigma_z \otimes \tau_z, \quad (2.95)$$

aplicado-o sobre o Hamiltoniano BHZ, Eq.(2.60), e utilizando os comutadores das Eqs.(2.66) obtemos

$$\begin{aligned} R_z(\pi) H_{TI}(\vec{k}_{||}) &= \epsilon(\vec{k}_{||})\sigma_0 \otimes \tau_0 R_z(\pi) + M(\vec{k}_{||})\sigma_0 \otimes \tau_z R_z(\pi) \\ &\quad - A k_x \sigma_z \otimes \tau_x R_z(\pi) - A k_y \sigma_0 \otimes \tau_y R_z(\pi) \\ &= H_{TI}(-\vec{k}_{||}) R_z(\pi) \end{aligned} \quad (2.96)$$

como $R_z(\pi) R_z^{-1}(\pi) = 1_{4 \times 4}$, então da Eq.(2.96) concluímos que $R_z(\pi) H_{TI}(\vec{k}_{||}) R_z^{-1}(\pi) = H_{TI}(-\vec{k}_{||})$.

De maneira semelhante ao realizado para as simetrias anteriores, vamos buscar como os auto-estados se transformam com $R_z(\pi)$ e quais as possíveis relações que conseguimos obter para as energias. Para $|\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle$ temos que

$$\begin{aligned} R_z(\pi) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} \left(-i\sigma_z \otimes \tau_z \right) \eta |\eta\rangle \otimes \left(g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle \right) \\ &= -\mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} i\eta^2 |\eta\rangle \otimes \left(g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle - |H_1\rangle \right) \\ &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} i\eta^2 |\eta\rangle \otimes \left(-g_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle \right) \\ &= \mathcal{C} e^{\vec{r} \cdot \vec{k}_{||}} e^{i\eta \frac{\pi}{2}} \eta |\eta\rangle \otimes \left(g_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}) |E_1\rangle + |H_1\rangle \right) \\ &= e^{i\eta \frac{\pi}{2}} |\Psi_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||})\rangle, \end{aligned} \quad (2.97)$$

ou seja,

$$R_z(\pi) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = e^{i\eta \frac{\pi}{2}} |\Psi_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||})\rangle. \quad (2.98)$$

Já para obter as relações para as energias, temos que

$$R_z(\pi) H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle = E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) R_z(\pi) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle \quad (2.99)$$

manipulando o lado esquerdo da igualdade acima

$$\begin{aligned}
R_z(\pi) H_{TI}(\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle &= R_z(\pi) H_{TI}(\vec{k}_{||}) R_z^{-1}(\pi) R_z(\pi) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle \\
&= H_{TI}(-\vec{k}_{||}) R_z(\pi) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle \\
&= e^{i\frac{\pi}{2}} H_{TI}(-\vec{k}_{||}) |\Psi_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||})\rangle \\
&= E_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}) e^{i\frac{\pi}{2}} |\Psi_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||})\rangle \\
&= E_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}) R_z(\pi) |\Psi_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||})\rangle
\end{aligned} \tag{2.100}$$

encontramos, com a Eq.(2.99), a mesma relação obtida para a simetria de inversão, ou seja,

$$E_{\pm}^{\eta}(-\vec{k}_{||}) = E_{\pm}^{\eta}(\vec{k}_{||}) . \tag{2.101}$$

2.2.5 Matrizes de spin na base do modelo BHZ

Nas próximas seções exploraremos a textura de spin para o modelo BHZ na geometria de uma fita, bem como para outros sistemas possuindo junções. Para isso, devemos saber como escrever as matrizes de spin na base do modelo BHZ.

Na seção (2.1) vimos que a base do modelo BHZ, Eqs.(2.43)(2.46), está associada com a do momento angular total $|J, m_J\rangle$ em que $J = L + S$ e $m_J = m_L + m_s$; sendo L (S) o momento angular orbital (de spin) e m_L (m_s) a sua respectiva projeção em relação ao eixo z . Para representarmos, nesta base, as matrizes de spin a partir de seu operador $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} = \frac{\hbar}{2} (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ devemos realizar a expansão

$$\begin{aligned}
\hat{S} &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\lambda' \lambda} \langle \lambda | \hat{\sigma} | \lambda' \rangle | \lambda \rangle \langle \lambda' | \\
&= \frac{\hbar}{2} \sum_{\lambda' \lambda} \hat{\sigma}_{\lambda \lambda'} | \lambda \rangle \langle \lambda' | ,
\end{aligned} \tag{2.102}$$

com $\{|\lambda\rangle\} = \{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$. Como temos que $\hat{\sigma}_z|s\rangle = m_s|s\rangle$, $\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-$ e $\hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_+ - \hat{\sigma}_-$, sendo $\hat{\sigma}_+$ ($\hat{\sigma}_-$) o operador de levantamento (e de abaixamento)⁵² -, ⁴⁷ podemos calcular a partir da base do modelo BHZ (a qual é composta pelos estados da Tab.1) os termos $\hat{\sigma}_{\lambda \lambda'}$ e, portanto, obtemos as seguintes matrizes de spin

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \alpha & \beta & 0 \\ \alpha^* & 0 & 0 & 0 \\ \beta^* & 0 & 0 & -\alpha^* \\ 0 & 0 & \alpha & 0 \end{pmatrix} , \tag{2.103}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\alpha & -i\beta^* & 0 \\ i\alpha^* & 0 & 0 & 0 \\ i\beta & 0 & 0 & -i\alpha^* \\ 0 & 0 & i\alpha & 0 \end{pmatrix} , \tag{2.104}$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.105)$$

onde temos que

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{3}} \int_{-\infty}^{+\infty} f_3(z) [f_2(z)]^* dz, \quad (2.106)$$

$$\beta = \int_{-\infty}^{+\infty} [f_1(z)]^* f_2(z) dz + \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{+\infty} [f_4(z)]^* f_5(z) dz, \quad (2.107)$$

$$\gamma = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{+\infty} |f_1(z)|^2 dz. \quad (2.108)$$

Utilizamos acima as relações da Eq.(2.49) e as condições de normalização para $|E_1 \pm\rangle$ dado por

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (|f_{1/2}(z)|^2 + |f_{4/5}(z)|^2) dz = 1, \quad (2.109)$$

e para $|H_1 \pm\rangle$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f_{3/6}(z)|^2 dz = 1. \quad (2.110)$$

Para calcularmos as integrais Eqs.(2.106) - (2.108), assumimos que o poço estaria em um regime em que as energias $E_1 \pm$ e $HH_1 \pm$ estivessem invertidas, i.e., $d \approx 7.5$ nm (veja Fig.(10)) e assim, encontramos os seguintes valores para os parâmetros α , β e γ

$$\alpha = 0, \quad \beta = 0.9568, \quad \gamma = 0.9136. \quad (2.111)$$

Notamos assim que as funções envelopes $f_{4/5}(z)$ associadas aos estados *light-hole*, fazem com que $S_z \neq \frac{\hbar}{2} \sigma_z \otimes \tau_0$. Como veremos na próxima seção, isso faz com que o spin não possua o valor de sua projeção na direção z igual à $\pm \hbar/2$, apesar de ser a única componente diferente de zero. Por fim, vemos também que $S_x \neq \frac{\hbar}{2} \sigma_x \otimes \tau_0$ e $S_y \neq \frac{\hbar}{2} \sigma_y \otimes \tau_0$.

2.3 Diferenças Finitas - Fita

O modelo BHZ é resolvido analiticamente em outros trabalhos para sistemas semi-infinitos,²⁷ bem como para uma geometria de fita,⁵³ para a obtenção dos estados de borda. Aqui, vamos utilizar o método das diferenças finitas (também denominado como discretização) para resolvermos a equação de Schrödinger $H_{TI} \Psi = E \Psi$ para o modelo BHZ para uma fita bidimensional, Fig.(12), afim de obtermos tanto estados (e energias) de *bulk* como das bordas.

Para isso, notemos que neste sistema temos condições de contorno periódicas e abertas (*hard-wall*), respectivamente, para os eixos x e y , o que torna k_x um bom número

Figura 12 – Isolante Topológico 2D (2D-TI) em uma geometria de fita, sendo L a largura da fita. Temos ao longo de x condições de contorno periódicas e em y iremos considerar tanto as condições de contorno abertas como as periódicas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

quântico enquanto para k_y temos que realizar a substituição $k_y \rightarrow -i\partial_y$. Assim, para discretizarmos de maneira apropriada as derivas presentes no Hamiltoniano H_{TI} do modelo BHZ, Eq.(2.60), escrevamos

$$H_{TI}(k_x, -i\partial_y) = H_{TI}(k_x, 0) + H_{TI}(0, -i\partial_y), \quad (2.112)$$

onde

$$H_{TI}(k_x, 0) = \begin{pmatrix} M_+ - B_+ k_x^2 & A k_x & 0 & 0 \\ A k_x & M_- - B_- k_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_+ - B_+ k_x^2 & -A k_x \\ 0 & 0 & -A k_x & M_- - B_- k_x^2 \end{pmatrix}, \quad (2.113)$$

e

$$H_{TI}(0, -i\partial_y) = \begin{pmatrix} B_+ \partial_y^2 & A \partial_y & 0 & 0 \\ -A \partial_y & B_- \partial_y^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_+ \partial_y^2 & A \partial_y \\ 0 & 0 & -A \partial_y & B_- \partial_y^2 \end{pmatrix}. \quad (2.114)$$

Consideremos primeiro $H_{TI}(0, -i\partial_y) \Psi = E \Psi$, onde $\Psi = (\psi^+, \psi^-)^T$ e $\psi^\pm = (\psi^{E\pm}, \psi^{H\pm})^T$, sendo T a transposta da matriz. Não obstante, devemos lembrar que estamos assumindo condições de contorno *hard-wall* para $y = 0$ e $y = L$, o que implica em termos $\Psi(y = 0) = \Psi(y = L) = 0$. Deste modo, ao discretizarmos o eixo y

$$y_i = (i - 1)h_y, \quad (2.115)$$

com $i = 1, \dots, N_y$, $h_y = \frac{L}{N_y - 1}$ e para $y_i \in [0, L]$, aproximamos as derivadas de primeira e segunda ordem, respectivamente, pelas fórmulas de dois e três pontos^{54 -55} dadas por

$$\partial_y \psi(y) \simeq \frac{\psi(y_{i+1}) - \psi(y_{i-1}))}{2h_y} + \mathcal{O}(h_y^2) = \frac{\psi_{i+1} - \psi_{i-1}}{2h_y} + \mathcal{O}(h_y^2), \quad (2.116)$$

$$\partial_y^2 \psi(y) \simeq \frac{\psi(y_{i+1}) - 2\psi(y_i) + \psi(y_{i-1}))}{h_y^2} + \mathcal{O}(h_y^2) = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h_y^2} + \mathcal{O}(h_y^2). \quad (2.117)$$

Note que a condição de *hard-wall* implica, após a discretização, que $\psi_1^{E\pm} = \psi_1^{H\pm} = 0$ e $\psi_{N_y}^{E\pm} = \psi_{N_y}^{H\pm} = 0$. Por outro lado, se tivéssemos condições periódicas de contorno $\Psi(y = 0) = \Psi(y = L)$, após a discretização teríamos que $\psi_1^{E\pm} = \psi_{N_y}^{E\pm}$ e $\psi_1^{H\pm} = \psi_{N_y}^{H\pm}$.

Deste modo, para $H(0, -i\partial_y) \psi^+ = E \psi^+$ obtemos as seguintes equações

$$\frac{B_+}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{E+} - 2\psi_i^{E+} + \psi_{i-1}^{E+}] + \frac{A}{2h_y} [\psi_{i+1}^{H+} - \psi_{i-1}^{H+}] = E \psi_i^{E+}, \quad (2.118)$$

$$-\frac{A}{2h_y} [\psi_{i+1}^{E+} - \psi_{i-1}^{E+}] + \frac{B_-}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{H+} - 2\psi_i^{H+} + \psi_{i-1}^{H+}] = E \psi_i^{H+}. \quad (2.119)$$

Como não há termos que acoplem os blocos $+$ e $-$ em H_{TI} , ao realizarmos a mudança $+\rightarrow -$ para ψ^+ no sistema acima, obtemos relações semelhantes para $H(0, -i\partial_y) \psi^- = E \psi^-$; note que k_x se torna um parâmetro aqui e, por conveniência, este foi omitido na notação de Ψ . Portanto, reescrevendo as Eqs.(2.118) e (2.119) matricialmente como

$$H_{h_y} \psi^+ = E \psi^+, \quad (2.120)$$

com $\psi^+ = (\psi_2^{E+}, \psi_3^{E+}, \psi_4^{E+}, \dots, \psi_{N-1}^{E+}, \psi_2^{H+}, \psi_3^{H+}, \psi_4^{H+}, \dots, \psi_{N-1}^{H+})^T$ e

$$H_{h_y} = \begin{pmatrix} \frac{-2B_+}{h_y^2} & \frac{B_+}{h_y^2} & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{A}{2h_y} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{B_+}{h_y^2} & \frac{-2B_+}{h_y^2} & \frac{B_+}{h_y^2} & \ddots & \vdots & \frac{-A}{2h_y} & 0 & \frac{A}{2h_y} & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \frac{-A}{2h_y} & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \frac{B_+}{h_y^2} & 0 & 0 & \ddots & 0 & \frac{A}{2h_y} \\ 0 & \dots & 0 & \frac{B_+}{h_y^2} & \frac{-2B_+}{h_y^2} & 0 & \dots & 0 & \frac{-A}{2h_y} & 0 \\ 0 & \frac{-A}{2h_y} & 0 & 0 & 0 & \frac{-2B_-}{h_y^2} & \frac{B_-}{h_y^2} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{A}{2h_y} & 0 & \frac{-A}{2h_y} & 0 & 0 & \frac{B_-}{h_y^2} & \frac{-2B_-}{h_y^2} & \frac{B_-}{h_y^2} & \ddots & 0 \\ 0 & \frac{A}{2h_y} & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 & \frac{-A}{2h_y} & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \frac{B_-}{h_y^2} \\ 0 & \dots & 0 & \frac{A}{2h_y} & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{B_-}{h_y^2} & \frac{-2B_-}{h_y^2} \end{pmatrix}, \quad (2.121)$$

e junto do bloco $-$ dado por $H_{TI}(0, -i\partial_y) \psi^- = E \psi^-$, encontramos para $H_{TI}(0, -i\partial_y) \Psi = E \Psi$ que

$$\mathcal{H}_{h_y} \Psi = E \Psi, \quad (2.122)$$

com

$$\mathcal{H}_{h_y} = \begin{pmatrix} H_{h_y} & 0 \\ 0 & H_{h_y} \end{pmatrix}, \quad (2.123)$$

e

$$\Psi = (\psi^+, \psi^-) \quad (2.124)$$

$$\psi^\pm = (\psi_2^{E\pm}, \psi_3^{E\pm}, \psi_4^{E\pm}, \dots, \psi_{N-1}^{E\pm}, \psi_2^{H\pm}, \psi_3^{H\pm}, \psi_4^{H\pm}, \dots, \psi_{N-1}^{H\pm})^T. \quad (2.125)$$

Por fim, para $H_{TI}(k_x, 0)$ não há termos que dependem de derivadas e, portanto, discretizando $H_{TI}(k_x, 0) \psi^+ = E \psi^+$ obtemos que

$$H_{k_x} \psi^+ = E \psi^+, \quad (2.126)$$

é dado por

$$H_{k_x} = \begin{pmatrix} h_+(k_x) & h(k_x) \\ h(k_x) & h_-(k_x) \end{pmatrix}, \quad (2.127)$$

$$h_{\pm}(k_x) = \begin{pmatrix} M_{\pm} - B_{\pm} k_x^2 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & M_{\pm} - B_{\pm} k_x^2 & \vdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & M_{\pm} - B_{\pm} k_x^2 \end{pmatrix}, \quad (2.128)$$

$$h(k_x) = \begin{pmatrix} Ak_x & 0 & \dots & 0 \\ 0 & Ak_x & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Ak_x \end{pmatrix}. \quad (2.129)$$

Por fim, com o bloco $-$ de $H_{TI}(k_x, 0)$ e com o a Eq.(2.126), encontramos para

$$\mathcal{H}_{k_x} \Psi = E \Psi, \quad (2.130)$$

o seguinte resultado

$$\mathcal{H}_{k_x} = \begin{pmatrix} H_{k_x} & 0 \\ 0 & H_{-k_x} \end{pmatrix}, \quad (2.131)$$

e, por fim, a equação de Schrödinger $H_{TI} \Psi = E \Psi$ depois da discretização torna-se

$$\mathcal{H}_{TI} \Psi = E \Psi, \quad (2.132)$$

com Ψ dado pelas Eqs.(2.124) e (2.125), e com

$$\mathcal{H}_{TI} = \mathcal{H}_y + \mathcal{H}_{k_x}. \quad (2.133)$$

Devemos notar que, a Eq.(2.132) é resolvida para cada k_x , deste modo temos que Ψ também depende de k_x , ou seja, $\Psi \equiv \Psi_{k_x}$.

Nas seções a seguir, resolvemos o Hamiltoniano $\mathcal{H}_{TI}$ da Eq.(2.132) utilizando o Python 3 alinhado com certas bibliotecas como o Scipy, Numpy, Pandas e Matplotlib. Obtemos a estrutura de bandas para o sistema e exploramos os estados de *bulk* e de borda para a fita, através do módulo quadrado da função de onda $|\Psi|^2$ e do valor médio de spin $\langle \sigma_{\eta} \rangle$ (com $\eta = x, y, z$) em função do eixo de confinamento da fita. Para calcularmos $\langle \sigma_{\eta} \rangle$, também denominado aqui como textura de spin, utilizamos as matrizes dadas nas Eqs.(2.103) - (2.105) com $\hbar = 1$.

2.3.1 Estrutura de bandas

Em uma primeira análise para a fita, vamos explorar a consequência para a estrutura de bandas quando temos condições de contorno abertas (*hard-wall*) ou periódicas, i.e., $\Psi(y=0) = \Psi(y=L) = 0$ ou $\Psi(y=0) = \Psi(y=L)$, respectivamente. Para isso, utilizamos os parâmetros para o modelo BHZ presentes na Tab.3 e consideramos que a fita tenha uma largura $L = 400$ nm com o passo da discretização sendo $h_y = 1.0$ nm, assim diagonalizamos o Hamiltoniano $\mathcal{H}_{TI}$ e obtemos a estrutura de bandas da Fig.(13).

Figura 13 – Estrutura de bandas para a) quando temos condições de contorno periódicas em $y = 0$ e em $y = L$ e, em b) quando temos condições de contorno abertas, apresentando bandas que se cruzam em $k = 0$ associadas aos estados de borda; $Spin \uparrow (\downarrow)$, i.e., *up (down)* representa as projeções para o spin na direção z . A cor vermelha representa a dupla degenerescência em spin.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.(13) temos a estrutura de bandas para os casos em que as condições de contorno em $y = 0$ e em $y = L$ são periódicas (i.e., $\Psi(y=0) = \Psi(y=L)$), na Fig.(13a), e *hard-wall* (i.e., $\Psi(y=0) = \Psi(y=L) = 0$), na Fig.(13b). O mapa de cores mostra o valor da projeção do spin $\langle \sigma_z \rangle$ para cada ponto da estrutura de bandas e a cor vermelha indica que há a presença de degenerescência em spin para cada k_x . Como veremos, na seção (2.3.2), estas bandas permanecem sempre degeneradas devido à termos tanto a simetria de inversão como a de reversão temporal.

Comparando as Figs.(13a) e (13b), notamos que ao termos condições de contorno abertas em nosso sistema deixamos de ter um *gap* e passamos a ter bandas que se cruzam em $k_x = 0$ referentes aos estados de borda. Isto se deve ao fato de que, uma vez no regime topológico, no qual ocorre uma inversão das bandas em *bulk*, Fig.(11), a presença de interfaces com uma região onde as bandas não estão invertidas (aqui referente à condição de *hard-wall*, i.e, $M \rightarrow +\infty$), faz com que surjam estados na região do *gap* do TI.

Além disso, como comentado na seção (2.2), o BHZ possui a simetria de partícula-buraco quebrada em *bulk*, e isto pode ser verificado como segue na Fig.(14). Notamos que para $C = D = 0$, Fig.(14a), temos que $E^\eta(k_x) = -E^\eta(-k_x)$ e o cruzamento das bandas de

estado de borda (chamado de ponto de Dirac) ocorre em $k_x = 0$ com $E^\eta(0) = 0$. Por outro lado, ao quebrarmos esta simetria vemos a partir da Fig.(14b) que $E^\eta(k_x) \neq -E^\eta(-k_x)$ e o ponto de Dirac passa à ocorrer em $E(0) \approx 7$ meV.

Figura 14 – Estrutura de bandas para fita de 2D-TI quando há a simetria de partícula-buraco, i.e., $C = D = 0$ em a) e quando não há, i.e., $C = 0$ e $D = -730$ em b). Ao contrário de a), em que o ponto de Dirac está $E(k_x = 0) = 0$, em b) o ponto de Dirac está em $E(k_x = 0) \approx 7$ meV.

Fonte: Elaborada pelo autor.

2.3.2 Estados de borda e de *bulk*

Para analisarmos os estados presentes em nosso sistema, comparando os de *bulk* com os de borda, vamos aqui manter as condições *hard-wall* de contorno, i.e., $\Psi(y = 0) = \Psi(y = L) = 0$ e utilizar os parâmetros utilizados para obter a Fig.(13b).

Consideremos primeiro os pontos em amarelo e em verde, presentes na estrutura de bandas na Fig.(15). A partir da Fig.(15b), identificamos que os estados associados

Figura 15 – Estrutura de bandas em a) com os pontos em amarelo e em verde relacionados às funções de onda ao quadrado em b), onde as curvas tracejada e contínuas correspondem, respectivamente, ao spin *up* e *down*; note em b) que cada uma das curvas é duplamente degenerada.

Fonte: Elaborada pelo autor.

aos pontos em amarelo e em verde da Fig.(15a) possuem uma amplitude de probabilidade maior ao redor de $y = 100$ nm e de $y = 300$ nm, indicando que estes estão presentes no *bulk* da fita $|\Psi|^2 = 0$. Como no caso de uma partícula em um potencial quadrado infinito unidimensional, a função de onda apresenta um modo de vibração n (aqui igual à $n = 2$). Cada um destes pontos selecionados possui uma degenerescência em spin, o que pode ser melhor identificado a partir da Fig.(16).

Figura 16 – Componentes x em a), y em b) e z em c) da textura de spin dos estados referentes aos pontos em amarelo e verde na Fig.(15a). As curvas tracejadas estão associadas ao spin *down* e as contínuas ao spin *up*.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.(16) apresentamos as componentes x , y e z da textura de spin em função da largura da fita, para os pontos destacados em amarelo e verde na estrutura de bandas da Fig.(15). A partir da Fig.(16c) podemos notar que para cada ponto, verde e amarelo, há duas curvas referentes a spins opostos e, devido à simetria de reversão temporal, a curva tracejada em amarelo é equivalente à curva verde contínua (ou seja, spin *up* de $-k_x$ é igual ao spin *down* de k_x). Além disso, se assumirmos

$$\langle \sigma_z \rangle \equiv \sigma_z^{k_x}(y), \quad (2.134)$$

ou seja, a componente z da textura de spin seja uma função de y (com k_x como parâmetro), vemos na Fig.(16c) que as curvas contínuas em verde e amarelo são equivalentes através da simetria de inversão, i.e., o estado spin *up* para k_x é equivalente ao de spin *up* para $-k_x$ se para um deles realizarmos a mudança $y \rightarrow -y$ para $y' = y + L/2$ (com $L/2 = 200$

nm sendo o eixo de simetria) em $\sigma_z^{k_x}(y)$, referente à simetria de inversão. Por fim, as componentes x e y da textura de spin são zero devido ao fato de não haver termos que acoplam os blocos $+$ e $-$ no modelo BHZ, Eq.(2.60).

Para compararmos a diferença que ocorre entre estados de *bulk* e borda, consideremos pontos da estrutura de bandas mais próximos das bandas referentes aos estados de borda, como mostrado nas Figs.(17a) e (17b).

Figura 17 – Mudança dos estados de *bulk* em a) para aqueles de borda em b). Comparando c) e e), com d) e f), vemos que os estados deixam de estar mais presentes ao longo do *bulk* e passam à estar mais presentes nas bordas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Nas Figs.(17c) e (17e) temos, respectivamente, as funções de onda ao quadrado e a componente z da textura de spin para os estados referentes aos pontos em amarelo e verde

da Fig.(17a). Já nas Figs.(17d) e (17f), temos os estados referentes aos pontos presentes na Fig.(17b).

Comparando as Figs.(17c) e (17e), respectivamente, com as Figs.(17d) e (17f), notamos que; diferente dos pontos da Fig.(17a) que possuem a amplitude de probabilidade e a componente z da textura de spin mais presentes ao longo do interior da fita, para os pontos da Fig.(17b) estas grandezas se encontram mais presentes próximas das bordas do sistema. Além disso, podemos identificar as mesmas simetrias de inversão e reversão temporal comentadas para os pontos da Fig.(15a). Por fim, as componentes x e y da textura de spin aqui também são zero, apesar de estarem omitidas.

Como último caso, consideremos os pontos presentes na estrutura de bandas da Fig.(18a).

Figura 18 – Estados de borda para a fita. Em a) temos os pontos em verde e amarelo da estrutura de bandas analisado em b) e c), respectivamente, através do módulo quadrado da função de onda e da componente z da textura de spin; em d) representamos este estados com spin *up* e *down* (flechas perpendiculares ao plano), com momentos k_x e $-k_x$ representados, respectivamente, pelas retas em vermelho e azul no plano.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A partir das Figs.(18b) e (18c), podemos notar que os estados relacionados aos pontos das bandas que se cruzam em $k_x = 0$, estão presentes ao longo das bordas do sistema, enquanto que no *bulk* da fita não há a presença. Além disso, conseguimos verificar

a degenerescência em spin que ocorre em cada ponto; tal que, a partir da Fig.(18c), notamos que a simetria de inversão relaciona o estado de spin *up* (*down*) para $-k_x$ com aquele de spin *up* (*down*) para k_x como discutido na Fig.(16); já a simetria de reversão temporal, faz com que os estado de spin *up* (*down*) em $-k_x$ seja relacionado com aquele de spin *down* (*up*) em k_x . Na Fig.(18d), representamos os spins destes estados pelas flechas perpendiculares à fita, e em cada borda temos o *spin momentum locking*, ou seja, para uma dada borda do sistema temos dois spins opostos se propagando com momentos opostos.

Por fim, observemos que, devido as matrizes de spin na base do modelo BHZ terem uma correção das funções envelopes *light hole*, Eq.(2.103), temos que o valor médio da componente z de spin para um dos estados presente no ponto verde (ou amarelo) é dado por

$$\int \langle \sigma_z(y) \rangle dy \approx 0.92 \quad (2.135)$$

o que, por sua vez, mostra que o spin z é aproximadamente um bom número quântico para o modelo BHZ.

3 MODELO TIGHT BINDING

Através deste capítulo iremos na seção (3.1) apresentar o método Tight Binding (TB) realizando a sua conexão entre o formalismo contínuo e o da segunda quantização; na seção (3.2) iremos derivar um modelo TB para isolantes topológicos bidimensionais, utilizando o formalismo de segunda quantização.

Já na seção (3.3) vamos resolver este modelo TB para uma fita, afim de obtermos a estrutura de bandas, as funções de onda e as texturas de spin ao longo da largura da fita, para estados de *bulk* e das bordas. No final, compararemos os resultados do TB com aqueles obtidos da discretização da seção (2.3).

3.1 Método tight binding

O método TB nos possibilita calcular a estrutura de bandas para um sólido utilizando-se dos orbitais que são soluções para um único átomo (ou daqueles que compõem a base do cristal). Em outras palavras, neste método tratamos o potencial cristalino como uma correção para as energias atômicas e as funções atômicas servem de base na qual expandimos a função de Bloch. Como veremos, este método é análogo ao que encontramos para a teoria de perturbação não degenerada da mecânica quântica.^{29,37,52}

Em linhas gerais, para descrevermos o método TB, consideramos que o Hamiltoniano que descreve o cristal é dado por

$$H = H_{at} + \Delta U \quad (3.1)$$

onde $H_{at} = \vec{p}^2/2m + V_{at}(\vec{r})$ é o Hamiltoniano para um único átomo e $\Delta U = U(\vec{r}) - V_{at}(\vec{r})$ é o termo considerado como correção para H_{at} . Deste modo, no limite que $\Delta U \rightarrow 0$ a solução para H torna-se a mesma daquela para H_{at} , ou seja,

$$H_{at} \phi_\alpha(\vec{r}) = \epsilon_\alpha \phi_\alpha(\vec{r}) \quad (3.2)$$

com $\phi_\alpha(\vec{r})$ sendo o orbital atômico (estamos desconsiderando o spin aqui) para uma auto-energia ϵ_α , ambos relativos a um número quântico α , e com

$$\int \phi_\beta^*(\vec{r}) \phi_\alpha(\vec{r}) d^3\vec{r} = \delta_{\beta\alpha} . \quad (3.3)$$

Por outro lado, uma vez que $\Delta U \neq 0$ e $U(\vec{r})$ é translacionalmente invariante a função de onda para o cristal, para obedecer o teorema de Bloch, passa à ser a seguinte combinação linear

$$\psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \varphi_n(\vec{r} - \vec{R}) , \quad (3.4)$$

com $\vec{R}$ sendo um vetor da rede de Bravais, N sendo o número de células unitárias, n o índice da banda e

$$\varphi_n(\vec{r} - \vec{R}) = \sum_{\alpha} b_{\alpha,n} \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) \quad (3.5)$$

uma combinação linear dos orbitais atômicos ϕ_{α} centrados em cada posição $\vec{R}$; temos aqui somente um átomo na base, se houvessem mais, deveríamos acrescentar um somatório na Eq.(3.4) contando tanto quanto fossem estes átomos que compõem a base.⁴⁰

Queremos então encontrar a solução para

$$H \psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) \quad (3.6)$$

para isso podemos, utilizando a Eq.(3.4), reescrever a Eq.(3.5) como

$$\psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R},\alpha} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} b_{\alpha,n} \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) \quad (3.7)$$

e então substituindo a Eq.(3.7) na Eq.(3.6) temos

$$(H_{at} + \Delta U) \sum_{\vec{R},\alpha} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} b_{\alpha,n} \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) = E_n(\vec{k}) \sum_{\vec{R},\alpha} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} b_{\alpha,n} \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}), \quad (3.8)$$

multiplicando ambos os lados da igualdade por $\phi_{\beta}^*(\vec{r})$ e integrando em $\vec{r}$ encontramos

$$\sum_{\vec{R},\alpha} b_{\alpha,n} \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) (H_{at} + \Delta U) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) d^3\vec{r} = E_n(\vec{k}) \sum_{\vec{R},\alpha} b_{\alpha,n} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) d^3\vec{r}, \quad (3.9)$$

a qual podemos reorganizar do lado esquerdo da igualdade, utilizando a Eq.(3.2), como

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{R},\alpha} b_{\alpha,n} \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) (H_{at} + \Delta U) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) d^3\vec{r} &= \sum_{\alpha} b_{\alpha,n} \left\{ \epsilon_{\beta} \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) \phi_{\alpha}(\vec{r}) d^3\vec{r} + \right. \\ &+ \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) \Delta U \phi_{\alpha}(\vec{r}) d^3\vec{r} \Big\} \\ &+ \sum_{\vec{R} \neq \vec{0},\alpha} b_{\alpha,n} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \left\{ \epsilon_{\beta} \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) d^3\vec{r} \right. \\ &+ \left. \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) \Delta U \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) d^3\vec{r} \right\} \end{aligned} \quad (3.10)$$

e fazendo o mesmo para o lado direito da igualdade na Eq.(3.9), obtemos da Eq.(3.9) junto da Eq.(3.3), que

$$\begin{aligned} (\epsilon_{\alpha} - E(\vec{k})) b_{\alpha,n} &= (E(\vec{k}) - \epsilon_{\alpha}) \sum_{\vec{R} \neq \vec{0},\alpha} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) d^3\vec{r} \right) b_{\alpha,n} + \\ &- \sum_{\alpha} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) \Delta U \phi_{\alpha}(\vec{r}) d^3\vec{r} \right) b_{\alpha,n} \\ &- \sum_{\vec{R} \neq \vec{0},\alpha} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_{\beta}^*(\vec{r}) \Delta U \phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}) d^3\vec{r} \right) b_{\alpha,n}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

A Eq.(3.11) mostra que de fato o TB é uma técnica análoga à teoria de perturbação de primeira ordem não degenerada, pois através dos estados não perturbados ϕ_α encontramos uma correção $E(\vec{k})$ para as energias ϵ_α tratando ΔU como uma perturbação. Para calculá-la e obtermos a estrutura de bandas $E(\vec{k})$, devemos fitar as integrais ao lado direito da igualdade com valores retirados de experimentos ou de técnicas *ab initio*; entretanto, estas integrais podem ser simplificadas (ou até mesmo zeradas) através da simetria dos orbitais como feito na seção (3.2).

Observemos ainda que a Eq.(3.11) forma uma matriz que possui a ordem igual ao número de orbitais que compõem a expansão da Eq.(3.5) (se considerássemos o spin, teríamos essa ordem multiplicada por dois); este número depende tanto da quantidade de átomos que forma a base do cristal quanto a região da estrutura de bandas que temos interesse, e.g., para o grafeno (desconsiderando o spin e lembrando que há dois átomos de carbono na base) ao considerarmos somente os orbitais p_z encontramos somente a dispersão linear em torno do ponto K a partir de uma matriz 2×2 , mas ao tratarmos junto os orbitais s , p_x e p_y encontramos uma matriz 8×8 que nos gera bandas com energias mais altas tanto no ponto K , como ao longo de Γ e M .⁴⁰

Ao derivarmos a Eq.(3.11) utilizamos as funções de Bloch presentes na Eq.(3.7) que são funções estendidas ao longo do cristal, porém, é possível derivarmos um modelo TB utilizando o método de segunda quantização.^{56–57} Para isso, utilizamos o procedimento canônico de expandir o operador de campo $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$ nas funções de onda do Hamiltoniano de partícula única, aqui estas são os orbitais $\Phi_\alpha^*(\vec{r} - \vec{R}_i)$ localizados em cada sítio $\vec{R}_i$, i.e.,

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_{i,\alpha} \Phi_\alpha^*(\vec{r} - \vec{R}_i) c_{i,\alpha}^\dagger. \quad (3.12)$$

assim, temos da Eq.(3.12) que o operador de campo $\hat{\psi}(\vec{r})$, o qual cria uma função de onda no espaço real, está relacionado com uma expansão de funções localizadas em N sítios, e com cada um destes tendo um conjunto α de orbitais $\Phi_\alpha^*(\vec{r} - \vec{R}_i)$.

Então, para obtermos um modelo TB a partir da Eq.(3.12) utilizamos a relação de segunda quantização^{58–61} dada por

$$\mathcal{H}_{TB} = \int \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) H \hat{\psi}(\vec{r}) d^3\vec{r}, \quad (3.13)$$

com H dado pela Eq.(3.1). Assim, com a Eq.(3.13) junto da Eq.(3.12), obtemos integrais análogas ao visto na Eq.(3.11) porém temos que $\mathcal{H}$ forma uma matriz que possui a ordem igual ao número de elementos em $\{\Phi_\alpha\}$ vezes a quantidade de sítios que estamos considerando em nossa rede. Note ainda que, apesar de estarmos utilizando a teoria de segunda quantização, podemos considerar que temos somente uma partícula em nosso sistema uma vez que não há termos explícitos relacionados à interação elétron - elétron, i.e., somente temos interação para formar o potencial cristalino $U(\vec{r})$, o qual já é algo efetivo nesta teoria e que torna-se somente um parâmetro a ser fitado.

3.2 Modelo mínimo para o BHZ

Como alguns outros modelos efetivos,⁴⁰ podemos utilizar o método TB apresentado na seção (3.1) para deduzir o modelo BHZ discutido no Cap.(2). Para isso, vamos considerar uma base mínima por meio da qual conseguimos utilizar a descrição dos orbitais atômicos, de maneira semelhante ao realizado em¹⁶⁻⁵¹.

Como mencionado no Cap.(2), o modelo BHZ é uma descrição efetiva para um poço quântico formado a partir de uma heteroestrutura de HgTe/CdTe. Em outras palavras, a partir de uma estrutura 3D obtemos um sistema bidimensional na região em que confinamos o HgTe entre camadas de Hg_{1-x}Cd_xTe. Desta forma, a base na qual o modelo BHZ é descrito $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$, Eqs.(2.43) - (2.46), contém funções envelopes que resquícios do confinamento realizado. O sistema que utilizamos para derivar o modelo TB já é bidimensional e a sua base não contém informações relativas ao confinamento. Em outras palavras, o método TB aqui é desenvolvido considerando o sistema da Fig.(19) onde cada orbital atômico esta centrado em uma posição $\vec{R}_i$, com i sendo o i -ésimo sítio

Figura 19 – Sistema considerado na dedução do modelo TB; os pontos azuis sobre o plano (infinito) representam os sítios, sendo a e b parâmetros de rede ao longo das direções x e y , respectivamente.

Fonte: Elaborada pelo autor.

da rede. Já a nossa base é dada por $\{|s_i+\rangle, |p_i^+\rangle, |s_i-\rangle, |p_i^--\rangle\}$, sendo representada no espaço real como

$$\langle \vec{r} | s_i+\rangle = \Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_i) |+\rangle = \Phi_{s,+}(\vec{r} - \vec{R}_i) , \quad (3.14)$$

$$\langle \vec{r} | s_i-\rangle = \Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_i) |-\rangle = \Phi_{s,-}(\vec{r} - \vec{R}_i) , \quad (3.15)$$

$$\langle \vec{r} | p_i^++\rangle = [\Phi_{p_x}(\vec{r} - \vec{R}_i) + i\Phi_{p_y}(\vec{r} - \vec{R}_i)] |+\rangle = \Phi_{p^+,+}(\vec{r} - \vec{R}_i) , \quad (3.16)$$

$$\langle \vec{r} | p_i^--\rangle = [\Phi_{p_x}(\vec{r} - \vec{R}_i) - i\Phi_{p_y}(\vec{r} - \vec{R}_i)] |-\rangle = \Phi_{p^-, -}(\vec{r} - \vec{R}_i) , \quad (3.17)$$

com $\Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_i)$, $\Phi_{p_x}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ e $\Phi_{p_y}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ representando, respectivamente, os orbitais s , p_x e p_y . Note que, como enfatizado no Cap.(2), uma vez que a interação spin-órbita foi

considerada, os estados que formam a base do modelo BHZ são auto-estados do operador de momento angular total J_z e J^2 ; isto, por sua vez, também ocorre aqui para o modelo TB, ou seja, na base $\{|s_i+\rangle, |p_i^++\rangle, |s_i-\rangle, |p_i^--\rangle\}$ temos para o orbital s que $\sigma = +, -$ representa as projeções de J_z (i.e., $j_z = \pm 1/2$), já para o orbital p temos σ equivalente à $j_z = \pm 3/2$.

Para deduzirmos nosso Hamiltoniano TB utilizamos o procedimento de segunda quantização dado pela Eq.(3.13), ou seja,

$$\mathcal{H}_{TB} = \int \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) H \hat{\psi}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (3.18)$$

onde $H = H_{ato} + \Delta U(\vec{r})$, com $H_{ato} = H_0 + H_{SO}$ e $\Delta U(\vec{r}) = U(\vec{r}) - V_0(\vec{r})$; tal que, $H_0 = p^2/2m + V_{at}(\vec{r})$ onde $U(\vec{r})$ e $V_{at}(\vec{r})$ são, respectivamente os potenciais da rede e atômico, H_{SO} é o termo de spin-órbita para uma única partícula e $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$ é o operador de campo. Observe que, para utilizarmos o método TB devemos expandir nosso operador de campo na base dos orbitais atômicos apresentados nas Eqs.(3.14)-(3.17), ou seja,

$$\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma,\alpha} \Phi_{\alpha\sigma}^\dagger(\vec{r} - \vec{R}_i) c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger \quad (3.19)$$

onde $c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger$ cria um elétron na posição i com um orbital α e uma projeção da componente z do momento angular total σ ; sendo $\alpha = s, p^\sigma$ com $\sigma = \pm$ e $\Phi_{\alpha,\sigma}(\vec{r} - \vec{R}_i)$ um spinor dado por

$$\Phi_{\alpha\sigma}(\vec{r} - \vec{R}_i) = \Phi_\alpha(\vec{r} - \vec{R}_i) |\sigma\rangle. \quad (3.20)$$

Assim, podemos reescrever a Eq.(3.18) utilizando as Eqs.(3.19) e (3.20) como

$$\mathcal{H}_{TB} = \sum_{i,\alpha,\sigma} \sum_{j,\alpha',\sigma'} \int d^3\vec{r} \Phi_\alpha^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \langle\sigma| (H_{ato} + \Delta U(\vec{r})) |\sigma'\rangle \Phi_{\alpha'}(\vec{r} - \vec{R}_j) c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{j,\alpha',\sigma'} \quad (3.21)$$

podemos então simplificar a equação acima separando o somatório para $i = j$, $\alpha = \alpha'$ e outra para $i \neq j$, α, α' obtendo assim

$$\mathcal{H}_{TB} = \sum_{i,\alpha,\sigma} \epsilon_{i,\alpha} c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma} + \sum_{i \neq j, \alpha, \alpha', \sigma} t_{\alpha\alpha'}^{ij} c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{j,\alpha',\sigma} \quad (3.22)$$

sendo então $\epsilon_{i,\alpha}$ as energias de sítio dadas por

$$\epsilon_{i,\alpha} = \int d^3\vec{r} \Phi_\alpha^*(\vec{r} - \vec{R}_i) H_{ato} \Phi_\alpha(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (3.23)$$

e $t_{\alpha\alpha'}^{ij}$ são os termos* de *hopping* que conectam sítios diferentes dados por

$$t_{\alpha\alpha'}^{ij} = \int d^3\vec{r} \Phi_\alpha^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_{\alpha'}(\vec{r} - \vec{R}_j). \quad (3.24)$$

* $\epsilon_{i,\alpha}$ e $t_{\alpha\alpha'}^{ij}$ são conhecidos como parâmetros de Slater-Koster.⁶²

este termo pode ser interpretado como a amplitude de probabilidade para que um elétron salte entre dois orbitais α e α' localizados em posições $\vec{R}_i$ e $\vec{R}_j$.

Com a Eq.(3.23), podemos notar que o primeiro somatório na Eq.(3.22) contém apenas os seguintes termos

$$\begin{aligned}\epsilon_{i,s} &= \int d^3 \vec{r} \Phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_i) H_{ato} \Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_i) \\ &\equiv \epsilon_s ,\end{aligned}\tag{3.25}$$

$$\begin{aligned}\epsilon_{i,p} &= \int d^3 \vec{r} \Phi_p^*(\vec{r} - \vec{R}_i) H_{ato} \Phi_p(\vec{r} - \vec{R}_i) \\ &\equiv \epsilon_p .\end{aligned}\tag{3.26}$$

Por outro lado, o segundo somatório da Eq.(3.22) possui diversos termos envolvendo a interação de diferentes sítios com diferentes orbitais. Para simplificar o problema, utilizamos a aproximação de primeiros vizinhos $t_{\alpha\alpha'}^{ij} = t_{\alpha\alpha'}^{ii+\delta}$ com $\delta = \pm a, \pm b$. Assim, podemos reescrever o segundo somatório da Eq.(3.22) para o i - ésimo sítio como

$$\begin{aligned}\sum_{i+\delta, \alpha, \alpha', \sigma} t_{\alpha\alpha'}^{ii+\delta} c_{i, \alpha, \sigma}^\dagger c_{i+\delta, \alpha', \sigma} &= t_{s,s}^{i,i\pm a} c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} + t_{s,s}^{i,i\pm a} c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,s,-} \\ &+ t_{s,s}^{i,i\pm b} c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + t_{s,s}^{i,i\pm b} c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,s,-} \\ &+ t_{p^+,p^+}^{i,i\pm a} c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} + t_{p^-,p^-}^{i,i\pm a} c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm a,p^-, -} \\ &+ t_{p^+,p^+}^{i,i\pm b} c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,p^+,+} + t_{p^-,p^-}^{i,i\pm b} c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -} \\ &+ t_{s,p^+}^{i,i\pm a} c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} + t_{s,p^-}^{i,i\pm a} c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,p^-, -} \\ &+ t_{s,p^+}^{i,i\pm b} c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,p^+,+} + t_{s,p^-}^{i,i\pm b} c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -} \\ &+ t_{p^+,s}^{i,i\pm a} c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} + t_{p^-,s}^{i,i\pm a} c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm a,s,-} \\ &+ t_{p^+,s}^{i,i\pm b} c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + t_{p^-,s}^{i,i\pm a} c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm b,s,-} .\end{aligned}\tag{3.27}$$

Para analisarmos os termos na Eq.(3.27), consideremos a propriedade de que um orbital p pode ser descrito como um produto entre uma função ímpar com outra par, e.g., $\Phi_{p_x}(r) = x \Phi(r)$ sendo $\Phi(r)$ par em torno de $\vec{r} = \vec{0}$. Deste modo, ao longo do eixo x temos os seguintes termos

$$\begin{aligned}t_{s,s}^{i,i\pm a} &= \int d^3 \vec{r} \Phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm a}) \\ &\equiv t_{as}\end{aligned}\tag{3.28}$$

$$\begin{aligned}t_{s,p^{+(-)}}^{i,i\pm a} &= \int d^3 \vec{r} \Phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_p(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm a}) \\ &= \pm \int d^3 \vec{r} \Phi_s(x, y, z) \Delta U(\vec{r}) (x - a) \Phi(x \mp a, y, z) \\ &\equiv \pm t_{asp_x} ,\end{aligned}\tag{3.29}$$

$$\begin{aligned}
t_{p^{+(-)},s}^{i,i\pm a} &= \int d^3\vec{r} \Phi_p^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm a}) \\
&= \int d^3\vec{r} \Phi_{p_x}(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \Phi_s(\vec{r} \mp a\hat{x}) \\
&\equiv \pm t_{ap_{xs}} ,
\end{aligned} \tag{3.30}$$

$$\begin{aligned}
t_{p^{+(-)},p^{+(-)}}^{i,i\pm a} &= \int d^3\vec{r} \Phi_p^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_p(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm a}) \\
&= \int d^3\vec{r} \Phi_{p_x}(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \Phi_{p_x}(\vec{r} \mp a\hat{x}) + \int d^3\vec{r} \Phi_{p_y}(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \Phi_{p_y}(\vec{r} \mp a\hat{x}) \\
&= t_{ap_{xx}} + t_{ap_{yy}} \equiv t_{ap} ,
\end{aligned} \tag{3.31}$$

cada uma das integrais acima podem ser representadas pelos seguintes desenhos da Fig.(20).

Figura 20 – Interações ao longo do eixo x envolvendo os orbitais p e s (esferas); os termos t_{as} , t_{asp_x} , t_{ap_xs} , $t_{ap_{yy}}$ e $t_{ap_{xx}}$ representam os *hoppings* diferentes de zero e a o parâmetro de rede ao longo do eixo x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

De maneira análoga ao realizado acima, temos ao longo do eixo y para a Eq.(3.27) os seguintes *hoppings* não nulos

$$\begin{aligned}
t_{s,s}^{i,i\pm b} &= \int d^3\vec{r} \Phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm b}) \\
&\equiv t_{bs} ,
\end{aligned} \tag{3.32}$$

$$\begin{aligned}
t_{s,p^+}^{i,i\pm b} &= \int d^3\vec{r} \Phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_p(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm b}) \\
&= i \int d^3\vec{r} \Phi_s(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \Phi_{p_y}(\vec{r} \mp b\hat{y}) \\
&\equiv \pm i t_{bsp_y} ,
\end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned}
t_{s,p^-}^{i,i\pm b} &= \int d^3\vec{r} \Phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_{p^-}(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm b}) \\
&= -i \int d^3\vec{r} \Phi_s(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \Phi_{p_y}(\vec{r} \mp b\hat{y}) \\
&\equiv \mp i t_{bsp_y},
\end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned}
t_{p^+,s}^{i,i\pm b} &= \int d^3\vec{r} \Phi_{p^+}^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm b}) \\
&= -i \int d^3\vec{r} \Phi_{p_y}(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \Phi_s(\vec{r} \mp b\hat{y}) \\
&\equiv \mp i t_{bp_{y}s},
\end{aligned} \tag{3.35}$$

$$\begin{aligned}
t_{p^-,s}^{i,i\pm b} &= \int d^3\vec{r} \Phi_{p^-}^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm b}) \\
&= i \int d^3\vec{r} \Phi_{p_y}(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \Phi_s(\vec{r} \mp b\hat{y}) \\
&\equiv \pm i t_{bp_{y}s},
\end{aligned} \tag{3.36}$$

$$\begin{aligned}
t_{p^{+(-)},p^{+(-)}}^{i,i\pm b} &= \int d^3\vec{r} \Phi_{p^+}^*(\vec{r} - \vec{R}_i) \Delta U(\vec{r}) \Phi_{p^+}(\vec{r} - \vec{R}_{i\pm b}) \\
&= \int d^3\vec{r} \Phi_{p_x}(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \Phi_{p_x}(\vec{r} \mp b\hat{y}) + \int d^3\vec{r} \Phi_{p_y}(\vec{r}) H \Phi_{p_y}(\vec{r} \mp b\hat{y}) \\
&= t_{bp_{xx}} + t_{bp_{yy}} \equiv t_{bp},
\end{aligned} \tag{3.37}$$

e, semelhante à Fig.(20), cada uma das integrais presentes nas Eqs.(3.32)-(3.37) são representadas na Fig.(21).

Figura 21 – Interações ao longo do eixo y envolvendo os orbitais p e s (esferas); os termos t_{bs} , t_{bsp_y} , $t_{bp_y s}$, $t_{bp_{yy}}$ e $t_{bp_{xx}}$ representam os *hoppings* diferentes de zero, sendo b o parâmetro de rede ao longo do eixo y .

Podemos então utilizar as Eqs.(3.28) - (3.31) e as Eqs.(3.32) - (3.37) para rescrevermos a Eq.(3.27) como

$$\begin{aligned}
\sum_{i,i+\delta,\alpha,\alpha',\sigma,\sigma'} t_{\alpha\alpha'}^{ii+\delta} c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i+\delta,\alpha',\sigma} = \sum_i \left[t_{as} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,s,-}) \right. \\
+ t_{bs} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,s,-}) \\
+ t_{ap} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} + c_{i,p^-,+}^\dagger c_{i\pm a,p^-,+}) \\
+ t_{bp} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,p^+,+} + c_{i,p^-,+}^\dagger c_{i\pm b,p^-,+}) \\
\pm t_{asp_x} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,p^-,+}) \\
\pm it_{bsp_y} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,p^+,+}) \mp it_{bsp_y} (c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,p^-,+}) \\
\pm t_{ap_x s} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} + c_{i,p^-,+}^\dagger c_{i\pm a,s,-}) \\
\left. \mp it_{bp_y s} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+}) \pm it_{bp_y s} (c_{i,p^-,+}^\dagger c_{i\pm b,s,-}) \right] . \quad (3.38)
\end{aligned}$$

Observe que os termos de *hopping* e as energias em sítio são desconhecidas aqui, pois dependem de integrais que envolvem $\Delta U(\vec{r})$ e o qual, por sua vez, seria somente obtido através de cálculos *ab-initio* os quais complicariam a derivação de nosso modelo. Portanto, de maneira a simplificar a dedução pretendida aqui, podemos buscar um mapeamento entre os parâmetros do modelo TB com aqueles encontrados no BHZ (i.e., os termos A, B, C, D e M).

Uma vez que o BHZ foi descrito no espaço dos momentos $\vec{k}$, para buscarmos o devido mapeamento entre o modelo contínuo e o TB devemos realizar a transformada de Fourier do Hamiltoniano TB da Eq.(3.22). Assim, utilizando a transformação para o operador de aniquilação dada como

$$c_{i,\alpha,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} c_{\vec{k},\alpha,\sigma} , \quad (3.39)$$

sendo N o número de sítios na rede, bem como a seguinte relação

$$\delta_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{R}_i} , \quad (3.40)$$

o Hamiltoniano $\mathcal{H}_{TB}$, Eq.(3.22), pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{TB} = \sum_{\vec{k}} [(\epsilon_s + 2t_{as} \cos(k_x a) + 2t_{bs} \cos(k_y b)) (c_{\vec{k},s,+}^\dagger c_{\vec{k},s,+} + c_{\vec{k},s,-}^\dagger c_{\vec{k},s,-}) \\
+ (\epsilon_p + 2t_{ap} \cos(k_x a) + 2t_{bp} \cos(k_y b)) (c_{\vec{k},p^+,+}^\dagger c_{\vec{k},p^+,+} + c_{\vec{k},p^-,+}^\dagger c_{\vec{k},p^-,+}) \\
+ (2it_{asp_x} \sin(k_x a) - 2t_{bsp_y} \sin(k_y b)) c_{\vec{k},s,+}^\dagger c_{\vec{k},p^+,+} \\
+ (2it_{asp_x} \sin(k_x a) + 2t_{bsp_y} \sin(k_y b)) c_{\vec{k},s,-}^\dagger c_{\vec{k},p^-,+} \\
+ (2it_{ap_x s} \sin(k_x a) + 2t_{bp_y s} \sin(k_y b)) c_{\vec{k},p^+,+}^\dagger c_{\vec{k},s,+} \\
+ (2it_{ap_x s} \sin(k_x a) - 2t_{bp_y s} \sin(k_y b)) c_{\vec{k},p^-,+}^\dagger c_{\vec{k},s,-}] , \quad (3.41)
\end{aligned}$$

utilizando as seguintes relações

$$c_{\vec{k},+} = (c_{\vec{k},s,+}, c_{\vec{k},p^+,+})^T, \quad (3.42)$$

$$c_{\vec{k},-} = (c_{\vec{k},s,-}, c_{\vec{k},p^-, -})^T, \quad (3.43)$$

podemos reescrever a Eq.(3.41) na forma matricial como

$$\mathcal{H}_{TB} = \sum_{\vec{k}} (c_{\vec{k},+}^\dagger \ c_{\vec{k},-}^\dagger) \begin{pmatrix} h(\vec{k}) & 0 \\ 0 & h^*(-\vec{k}) \end{pmatrix} (c_{\vec{k},+} \ c_{\vec{k},-})^T, \quad (3.44)$$

sendo T a transposta da respectiva matriz e $h(\vec{k})$ dado por

$$h(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon_s + 2(t_{as} \cos(k_x a) + t_{bs} \cos(k_y b)) & 2(it_{asp_x} \sin(k_x a) - t_{bsp_y} \sin(k_y b)) \\ 2(it_{ap_x s} \sin(k_x a) + t_{bp_y s} \sin(k_y b)) & \epsilon_p + 2(t_{ap} \cos(k_x a) + t_{bp} \cos(k_y b)) \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

Note que, por meio das Eqs.(3.29) e (3.30), podemos mostrar que $t_{asp_x} = -t_{ap_x s}$, e com as Eqs.(3.33) e (3.35) temos $t_{bsp_y} = -t_{bp_y s}$. Utilizando estas relações e considerando o fato de que estamos interessados na região em torno do ponto Γ , tanto para o modelo $\vec{k} \cdot \vec{p}$ (por meio do qual foi obtido o BHZ) quanto o TB, então podemos considerar o limite $\vec{k} \rightarrow \vec{0}$ na Eq.(3.45) o que resulta em

$$h(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon_s + 2(t_{as} + t_{bs}) - t_{as} k_x^2 a^2 - t_{bs} k_y^2 b^2 & 2(it_{asp_x} k_x a - t_{bsp_y} k_y b) \\ 2(-it_{ap_x s} k_x a - t_{bp_y s} k_y b) & \epsilon_p + 2(t_{ap} + t_{bp}) - t_{ap} k_x^2 a^2 - t_{bp} k_y^2 b^2 \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

e restringindo a uma rede quadrada $a = b$, tal que $t_{as} = t_{bs}$, $t_{ap} = t_{bp}$ e $t_{asp_x} = t_{bsp_y}$, podemos realizar a mudança $k_x \rightarrow k_y$ na Eq.(3.45) e compará-la ao modelo contínuo dado por

$$H_{BHZ} = \begin{pmatrix} h_{BHZ}(\vec{k}) & 0 \\ 0 & h_{BHZ}^*(-\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.47)$$

$$h_{BHZ}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} M - (D + B)(k_x^2 + k_y^2) & A(k_x - ik_y) \\ A(k_x + ik_y) & -M - (D - B)(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix}, \quad (3.48)$$

obtemos assim o seguinte mapeamento: $\epsilon_s = M - 4t_{as}, \epsilon_p = -M - 4t_{ap}$, $A = -2at_{asp_x}$, $(D - B) = a^2t_{ap}$ e $(D + B) = a^2t_{as}$. Podemos então reescrever a Eq.(3.38) como

$$\begin{aligned}
\sum_{i,i+\delta,\alpha,\alpha',\sigma,\sigma'} t_{\alpha\alpha'}^{ii+\delta} c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i+\delta,\alpha',\sigma} &= \sum_i \left[\frac{(D+B)}{a^2} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,s,-}) \right. \\
&+ \frac{(D+B)}{b^2} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,s,-}) \\
&+ \frac{(D-B)}{a^2} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm a,p^-, -}) \\
&+ \frac{(D-B)}{b^2} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,p^+,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -}) \\
&\mp \frac{A}{2b} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,p^+,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -}) \\
&\mp i \frac{A}{2a} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} \pm c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,p^-, -}) \\
&\pm \frac{A}{2b} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm b,s,-}) \\
&\left. \mp i \frac{A}{2a} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} \pm c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm a,s,-}) \right], \tag{3.49}
\end{aligned}$$

e, portanto, o nosso Hamiltoniano TB final, $H_{TB} \equiv H_{TI}$ pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{TI} &= \sum_i \left[(M - 4 \frac{(D+B)}{a^2}) (c_{i,s,+}^\dagger c_{i,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i,s,-}) \right. \\
&+ (-M - 4 \frac{(D-B)}{a^2}) (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i,p^+,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i,p^-, -}) \\
&+ \sum_i \left\{ \frac{(D+B)}{a^2} [(c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,s,-}) + (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,s,-})] \right. \\
&+ \frac{(D-B)}{a^2} [(c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -}) + (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm a,p^-, -})] \\
&\mp \frac{A}{2b} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,p^+,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -}) \mp i \frac{A}{2a} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} \pm c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,p^-, -}) \\
&\left. \pm \frac{A}{2b} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm b,s,-}) \pm i \frac{A}{2a} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} \mp c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm a,s,-}) \right\}. \tag{3.50}
\end{aligned}$$

3.3 Modelo mínimo - fita (2D)

Na seção anterior, utilizamos uma base mínima junto do método *tight binding* para deduzirmos o Hamiltoniano $\mathcal{H}_{TI}$, Eq.(3.50), afim de descrevermos um Isolante Topológico 2D (2D - TI). Para realizarmos nossa dedução consideramos um sistema 2D infinito, todavia, queremos analisar os estados que surgem em uma dada borda do material na qual há uma mudança de sinal do *gap* do material, como discutido no Cap.(1). Portanto, vamos considerar nesta seção uma fita na qual temos em x e em y , respectivamente, condições de contorno fechadas e abertas, Fig.(22), como na seção (2.3).

Figura 22 – Isolante Topológico 2D (2D-TI) em uma geometria de fita, sendo L a largura da fita. Temos ao longo de x condições de contorno periódicas e em y iremos considerar tanto as condições de contorno abertas como as periódicas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como k_x é um bom número quântico para essa geometria, conseguimos realizar uma transformada de Fourier parcial de $\mathcal{H}_{TI}$ para o eixo x . Assim, para o operador de aniquilação temos

$$c_{j,\alpha,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k_x,j} e^{ik_x x_j} c_{j,k_x,\alpha,\sigma}, \quad (3.51)$$

onde j denota os sítios ao longo do eixo y , $\alpha = s, p^\sigma$ e $\sigma = +, -$ (como discutido na seção anterior). Então, o Hamiltoniano da Eq.(3.50) torna-se

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{TI} = & \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \left[\left(M - 4 \frac{(D+B)}{a^2} \right) c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,s,\sigma} + \left(-M - 4 \frac{(D-B)}{a^2} \right) c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma} \right] \\ & + \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} 2 \cos(k_x a) \left[\frac{(D+B)}{a^2} c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,s,\sigma} + \frac{(D-B)}{a^2} c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma} \right] \\ & + \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \frac{A}{a} \sigma \sin(k_x a) \left[c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma} + c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,s,\sigma} \right] \\ & + \sum_{k_x} \sum_j \frac{A}{2a} \left[\mp c_{j,k_x,s,+}^\dagger c_{j\pm a,k_x,p^+,+} \mp c_{j,k_x,s,-}^\dagger c_{j\pm a,k_x,p^-,+} \right. \\ & \left. \pm c_{j,k_x,p^+,+}^\dagger c_{j\pm a,k_x,s,+} \pm c_{j,k_x,p^-,+}^\dagger c_{j\pm a,k_x,s,-} \right] \\ & + \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \left[\frac{(D+B)}{a^2} c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j\pm a,k_x,s,\sigma} + \frac{(D-B)}{a^2} c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j\pm a,k_x,p^\sigma,\sigma} \right]. \quad (3.52) \end{aligned}$$

3.3.1 Estrutura de bandas

Resolvemos numericamente o Hamiltoniano acima considerando os parâmetros da Tab.3 e, como na seção 2.3, consideramos para a direção y tanto condições de contorno periódicas $\Psi(y=0) = \Psi(L=0)$ como de *hard-wall* $\Psi(y=0) = \Psi(L=0) = 0$ (em que $M \rightarrow \infty$ para $y=0$ e $y=L$), como segue na Fig.(23).

Figura 23 – Estrutura de bandas para o modelo TB com condições de contorno periódica $\Psi(y=0) = \Psi(y=L)$ em a) e *hard-wall* $\Psi(y=0) = \Psi(y=L) = 0$ em b). Somente em b) as bandas dos estados de borda ocorrem, pois para $y=0$ e $y=L$ há uma mudança de M na fronteira (i.e., $M = -10.0 \text{ meV} \rightarrow M = \infty$) e, assim, uma mudança na topologia das bandas.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como na seção 2.3, a partir da Fig.(23a) notamos que com as condições de contorno periódicas obtemos um isolante comum, onde o *gap* é igual a $E_g = 2|M|$ e com cada banda duplamente degenerada em spin (como mostrado pela cor vermelha).

Com as condições de contorno abertas em y , Fig.(23b), há o aparecimento de duas bandas cruzando em $k_x = 0.0$ (cada uma também duplamente degenerada), mudando assim o material de um isolante para um condutor. O aparecimento destas bandas condutoras está associado aos estados que surgem nas bordas do sistema (em $y=0$ e em $y=400\text{nm}$), uma vez que nestes locais o *gap* do sistema muda de sinal de $M < 0.0$ para $M \rightarrow \infty$.

Por fim, podemos comparar a estrutura de bandas obtido (através do método das diferenças finitas) do modelo contínuo com este do TB, como segue na Fig.(24).

Figura 24 – Temos em a) e b), respectivamente, condições de contorno periódica $\Psi(y=0) = \Psi(y=L)$ e *hard-wall* $\Psi(y=0) = \Psi(y=L) = 0$. Os pontos em laranja e em preto são referentes, respectivamente, ao modelo TB e discretizado.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Analisando a Fig.(24) temos uma concordância entre, os resultados obtidos do modelo TB com aquele do discretizado, discutido no Cap.(2). Entretanto, devemos notar que esse acordo ocorre devido ao fato de que para $k_x \approx 0$ temos $\sin(k_x) \sim k_x$ e $\cos(k_x) \sim k_x^2$, de maneira que se aumentarmos a faixa para k_x na qual estamos analisando a estrutura de bandas (i.e., para $|k_x| > 0.4$) começamos a ter uma discrepância entre os dois modelos.

3.3.2 Estados de borda e *bulk*

Para analisarmos os estados deste sistema, devemos notar que ao diagonalizar o Hamiltoniano - Eq.(3.52) para um dado k_x encontramos um conjunto de n auto-energias e para uma dada energia $E(k_x)$ temos g auto-estados, com $g = 1$ ou $g = 2$ sendo, respectivamente, quando não há e há degenerescência. Cada auto-estado é dado por $\Psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_j)^T$ (com T sendo a transposta da matriz) para o j -ésimo sítio temos ψ_j dado por

$$\psi_j = (s_{j+}, p_j^+, s_{j-}, p_j^-) , \quad (3.53)$$

de modo que, $s_j \pm$ e $p_j^\pm$ representam os coeficientes numéricos obtido da diagonalização organizados na base de interesse aqui.

Além da amplitude de probabilidade $|\psi_j|^2$, para analisarmos os estados do sistema utilizamos a textura de spin dado por $\langle \hat{S} \rangle_j = \frac{\hbar}{2} (\langle \hat{\sigma}_x \rangle_j, \langle \hat{\sigma}_y \rangle_j, \langle \hat{\sigma}_z \rangle_j)$ em função do sítio j (note que aqui tomamos $\hbar = 1.0$). Para isso, devemos realizar a projeção do operador $\hat{\sigma}_i$ (com $i = x, y, z$) em nossa base mínima $\{|s_{j+}\rangle, |p_j^+\rangle, |s_{j-}\rangle, |p_j^-\rangle\}$, ou seja, para cada componente i de $\vec{S}$ temos

$$\hat{\sigma}_i = \sum_{a,b} \langle b | \sigma_i | a \rangle |b\rangle \langle a| \quad (3.54)$$

com $\{|a\rangle\}$ ou $\{|b\rangle\}$ sendo o conjunto de elementos da nossa base, tal que, obtemos as seguintes matrizes

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

e as quais são diferentes daquelas obtidas para o modelo contínuo, Eqs.(2.103) - (2.105), por não possuir as correções relacionadas as integrais das funções envelopes.

Afim de analisarmos os estados presentes no sistema, como feito no Cap.(2), consideremos primeiro os estados de *bulk* referentes aos pontos em amarelo e verde da Fig.(25).

Figura 25 – Estrutura de bandas para o caso em que temos condições *hard - wall* para as bordas da fita, i.e., $\Psi(y=0) = \Psi(y=L) = 0$. Os pontos em amarelo e verde referem-se aos estados presentes na Fig.(26).

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig.(26a) exibe um comportamento semelhante para aquele encontrado na seção (2.3), i.e., conforme consideramos pontos do *bulk* próximo as bandas associadas aos estados de borda, mais estas funções apresentam uma maior amplitude nas boras.

Figura 26 – Funções de onda ao quadrado em a) e componentes z , x e y da textura de spin, respectivamente, em b), c) e d) para os pontos em verde e amarelo da estrutura de bandas Fig.(25). Cada uma das curvas em a) são duplamente degeneradas, pois para cada k_x temos dois spins opostos, como visto em b).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Além disso, temos nas Figs.(26b), (26c) e (26d), respectivamente, as componentes z , x e y da textura de spin para cada um destes pontos. Do mesmo modo que discutido no Cap.(2), vemos através da componente z que para cada ponto temos dois estados com spins opostos, obedecendo tanto a simetria de reversão temporal quanto a de inversão espacial. Já as componentes x e y são nulas, pois não há termos que acoplem os blocos up (+) e $down$ (-) no Hamiltoniano Eq.3.52.

Na Fig.(27), comparamos as funções de onda e a componente z da textura de spin, obtidas do TB (em preto) com aquelas do modelo discretizado (em verde). Vemos que os resultados obtidos do modelo TB e do modelo discretizado concordam entre si. Vemos que

Figura 27 – Comparação entre o modelo TB (curvas em preto) e a discretização (curvas em verde) para as funções de onda ao quadrado em a) e a componente z da textura de spin em b).

Fonte: Elaborada pelo autor.

a correção proveniente do *light hole* discutido no Cap.(2) é imperceptível, o que justifica o fato de considerarmos o bloco + e - do modelo contínuo como de up e $down$.

Além disso, devemos notar que as funções de onda tanto na Fig.(26), como na Fig.(27), não são simétricas entorno de $y = 200$ nm (ao contrário do que é visto para o resultado obtido da discretização em verde na Fig.(27), como visto na Fig.(27) e na seção (2.3)). Isto se deve ao fato de que, ao diagonalizarmos o modelo TB, encontramos auto-estados para uma dada energia que não são linearmente independentes, ou seja, o produto interno entre dois estados de mesma energia não é exatamente zero devido à um erro numérico.

Consideremos agora os pontos em verde e amarelo da Fig.(28).

Figura 28 – Estrutura de bandas para o regime topológico utilizando o modelo TB. Os pontos em amarelo e verde são analisados nas Figs.(29).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Dos pontos em verde e amarelo destacados na Fig.(28), temos a Fig.(29).

Figura 29 – Temos em a) as funções de onda referentes aos pontos em amarelo e em verde da estrutura de bandas presente - Fig.(28), com as curvas tracejada e contínua correspondente, respectivamente, ao spin *up* e *down*, como mostrado em b) através da componente *z* da textura de spin.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Ao contrário dos estados analisados na Fig.(25), notamos a partir da Fig.(29) que os estados referentes aos pontos em verde e amarelo da Fig.(28) localizam-se nas bordas da fita. Vemos ainda, a partir da Fig.(29b), que para cada um destes pontos temos dois spins opostos, o que nos mostra a relação com as simetrias de reversão temporal e inversão espacial, discutido no Cap.(2). Notemos que foi omitido aqui as componentes *x* e *y* da textura de spin devido ao fato destas serem zero, pois não temos acoplamentos entre os blocos *up* e *down* em nosso modelo, como já comentado anteriormente.

Por fim, comparamos estes resultados com o modelo discretizado, Fig.(30).

Figura 30 – Tanto em a) onde temos as funções de onda ao quadrado, com cada curva (preta ou verde) duplamente degenerada, quanto em b) onde vemos a componente z da textura de spin, notamos que o resultado do modelo TB (em preto) está em acordo com o obtido através da discretização (em verde).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Da Fig.(30), temos que as curvas em preto e verde referem-se aos resultados obtidos, respectivamente, do modelo TB e discretizado. Notamos, tanto do modulo quadrado da função de onda na Fig.(30a), quanto da componente z da textura de spin na Fig.(30b) que ambos os modelos concordam entre si.

Além disso, notamos da Fig.(30b), que a componente z da textura de spin para o modelo TB e para a discretização são equivalentes na escala aqui mostrada. Entretanto, ao contrario do modelo discretizado, em que a base é completa e por consequência do termo de *light hole* temos

$$\int \langle \sigma_z \rangle dy \approx 0.92, \quad (3.56)$$

com o modelo TB, em que a base é mínima (i.e., não temos o termo de *light hoke*) o valor médio de spin é dado por

$$\int \langle \sigma_z \rangle dy = 1.0, \quad (3.57)$$

ou seja, no modelo TB os blocos $+$ e $-$ de $\mathcal{H}_{TI}$ representa de fato os spins *up* e *down*, respectivamente.

4 DIFERENTES JUNÇÕES PARA 2D - TI

Neste capítulo iremos nas seções (4.1) e (4.2), respectivamente, utilizar o método das diferenças finitas e o *tight binding* para descrever uma junção entre um Isolante Topológico bidimensional (2D - TI) e um segundo material (2D - X), como apresentado na Fig.(31). Na seção (4.3) vamos comparar os Hamiltonianos obtidos a partir de ambos os métodos acima. Nas seções (4.4) e (4.5) vamos, respectivamente, considerar que este material 2D - X seja um isolante normal (chamado NI, i.e., um isolante topológico na fase trivial) e um Ferromagneto metálico (FM).

Em cada seção (4.4) e (4.5), explorarmos a estrutura de bandas para o sistema, bem como os estados de *bulk* e de borda utilizando a amplitude da função de onda e da textura de spin ao longo do eixo y .

Figura 31 – Junção entre uma camada de isolante topológico e outra camada X, com L_{TI} e L_X sendo a largura para cada camada. Temos condições de contorno periódicas em x e *hard-wall* em $y = 0$ e em $y = L_{TI} + L_X$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como já discutido no Cap.(2), a camada de Isolante Topológico (TI) na Fig.(31) é descrita pelo modelo contínuo (BHZ), Eq.(2.59), derivado a partir do modelo de Kane 8x8 para uma heteroestrutura do tipo HgTe/CdTe. Entretanto, em outros trabalhos^{21–63} vemos que é possível obter Hamiltonianos efetivos que podem ser mapeados com aquele do modelo BHZ. Desta forma, assumiremos que o segundo material - Fig.(31), seja modelado por um Hamiltoniano efetivo onde tal mapeamento seja válido. Em outras palavras, vamos assumir que o Hamiltoniano para este segundo material seja

$$H_0 = \begin{pmatrix} \epsilon_0(\vec{k}_{||}) + M_0(\vec{k}_{||}) & A_0 k_+ & 0 & 0 \\ A_0 k_- & \epsilon_0(\vec{k}_{||}) - M_0(\vec{k}_{||}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_0(\vec{k}_{||}) + M_0(\vec{k}_{||}) & -A_0 k_- \\ 0 & 0 & -A_0 k_+ & \epsilon_0(\vec{k}_{||}) - M_0(\vec{k}_{||}) \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

onde $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, $\epsilon_0(\vec{k}_{||}) = C_0 - D_0 (k_x^2 + k_y^2)$, $M_0(\vec{k}_{||}) = M_0 - B_0 (k_x^2 + k_y^2)$ e com A_0, B_0, C_0, D_0 e M_0 sendo parâmetros deste modelo efetivo.

4.1 Junção a partir das Diferenças Finitas

Para descrevermos o sistema na Fig.(4.1) através do método das diferenças finitas, consideremos que o Hamiltoniano do sistema seja dado por

$$H_{sis} = \begin{cases} H_{TI} & , y \in [0, L_{TI}] \\ H_0 & , y \in [L_{TI}, L_X] \end{cases} \quad (4.2)$$

onde L_{TI} e L_X são, respectivamente, as larguras da camada TI e da camada X , cada um descrito por seus respectivos Hamiltonianos; H_{TI} pela Eq.(2.59) e H_0 pela Eq.(4.1).

Queremos resolver a equação de Schrödinger $H_{sis}\Psi = E\Psi$ discretizando-a, com Ψ sendo um vetor 4×1 dado por $\Psi = (\psi_+, \psi_-)^T$ e $\psi_{\pm}$ um vetor 2×1 dado por $\psi_{\pm} = (\psi^{E\pm}, \psi^{H\pm})^T$. Para isso assumimos condições de contorno periódicas em x e, em y , condições *hard-wall* dadas por $\Psi(y=0) = \Psi(y=L) = 0$ com $L = L_{TI} + L_X$. Em outras palavras, definimos o vácuo como um potencial $V(y)$, tal que, $V(y) \rightarrow \infty$ em $y \in]-\infty, 0[$ e em $y \in]L, +\infty[$, já no intervalo que compreende a largura da junção $y \in [0, L]$ este potencial é nulo, i.e., $V(y) = 0$. Deste modo, k_x é um bom número quântico em H_{sis} enquanto k_y deve ser substituído pelo operador derivada $-i\partial_y$.

Estaremos interessados em utilizar as fórmulas de dois e três pontos para os termos de H_{sis} que envolvem as derivadas $-i\partial_y$, assim vamos reescrever H_{TI} e H_0 como

$$H_{TI}(k_x, -i\partial_y) = H_{TI}(k_x, 0) + H_{TI}(0, -i\partial_y) , \quad (4.3)$$

$$H_0(k_x, -i\partial_y) = H_0(k_x, 0) + H_0(0, -i\partial_y) , \quad (4.4)$$

onde $H_{TI}(k_x, 0)$ e $H_{TI}(0, -i\partial_y)$ são dados por

$$H_{TI}(0, -i\partial_y) = \begin{pmatrix} B_+ \partial_y^2 & A \partial_y & 0 & 0 \\ -A \partial_y & B_- \partial_y^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_+ \partial_y^2 & A \partial_y \\ 0 & 0 & -A \partial_y & B_- \partial_y^2 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

$$H_{TI}(k_x, 0) = \begin{pmatrix} M_+ - B_+ k_x^2 & A k_x & 0 & 0 \\ A k_x & M_- - B_- k_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_+ - B_+ k_x^2 & -A k_x \\ 0 & 0 & -A k_x & M_- - B_- k_x^2 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

com $B_{\pm} = (D \pm B)$ e $M_{\pm} = C \pm M$. Enquanto que para $H_0(k_x, 0)$ e $H_0(0, -i\partial_y)$ temos

$$H_0(0, -i\partial_y) = \begin{pmatrix} B_{0+} \partial_y^2 & A_0 \partial_y & 0 & 0 \\ -A_0 \partial_y & B_{0-} \partial_y^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_{0+} \partial_y^2 & A_0 \partial_y \\ 0 & 0 & -A_0 \partial_y & B_{0-} \partial_y^2 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

$$H_0(k_x, 0) = \begin{pmatrix} \textcolor{red}{M_{0+} - B_+ k_x^2} & \textcolor{red}{A_0 k_x} & 0 & 0 \\ \textcolor{red}{A_0 k_x} & \textcolor{red}{M_{0-} - B_0 k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \textcolor{blue}{M_{0+} - B_{0+} k_x^2} & \textcolor{blue}{-A_0 k_x} \\ 0 & 0 & \textcolor{blue}{-A_0 k_x} & \textcolor{blue}{M_{0-} - B_0 k_x^2} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

onde $B_{0\pm} = (D_0 \pm B_0)$ e $M_{0\pm} = C_0 \pm M_0$. Nas Eqs.(4.5)-(4.8) as cores em vermelho e azul representam, respectivamente, os blocos + e - referentes à ordem em nossa base $\{|E_1 + \rangle, |H_1 + \rangle, |E_1 - \rangle, |H_1 - \rangle\}$.

A presença de interface entre dois materiais neste sistema, faz com que os parâmetros dependam da posição y como

$$B(y) = \begin{cases} B_{\pm} & , y \in [0, L_{TI}] \\ B_{0\pm} & , y \in [L_{TI}, L_X] \end{cases}, \quad A(y) = \begin{cases} A & , y \in [0, L_{TI}] \\ A_0 & , y \in [L_{TI}, L_X] \end{cases}. \quad (4.9)$$

precisamos então simetrizar⁵⁴ os termos envolvendo os operadores derivadas

$$B(y) \partial_y^2 \Psi \rightarrow \partial_y [B(y) \partial_y \Psi], \quad (4.10)$$

$$A(y) \partial_y \Psi \rightarrow \frac{1}{2} [A(y) \partial_y \Psi + \partial_y (A(y) \Psi)], \quad (4.11)$$

de maneira que H_{sis} seja hermitiano.

Notemos que, tanto em $H_{TI}(0, -i\partial_y)$ como em $H_0(0, -i\partial_y)$, os blocos + e - são equivalentes e desacoplados. Portanto, na equação $H_{sis}\Psi = E\Psi$, considerar somente o bloco + com o qual obtemos

$$\frac{\partial}{\partial y} [B(y) \frac{\partial}{\partial y} \psi^{E+}] + \frac{1}{2} [A(y) \frac{\partial}{\partial y} \psi^{H+} + \frac{\partial}{\partial y} (A(y) \psi^{H+})] = E \psi^{E+}, \quad (4.12)$$

$$-\frac{1}{2} [A(y) \frac{\partial}{\partial y} \psi^{E+} + \frac{\partial}{\partial y} (A(y) \psi^{E+})] + \frac{\partial}{\partial y} [B(y) \frac{\partial}{\partial y} \psi^{H+}] = E \psi^{H+}. \quad (4.13)$$

Considerando a mudança $+ \rightarrow -$, nas Eqs.(4.12) e (4.13), obtemos relações semelhantes para o bloco - de H_{sis} . Por fim, discretizamos o eixo y em N_y intervalos com o passo dado por $h_y = \frac{L}{N_y - 1}$, ou seja,

$$y_i = (i - 1)h_y \quad (4.14)$$

com $L = L_{TI} + L_X$, $i = 1, 2, \dots, N_y$. Utilizando as relações de dois e três pontos para as derivadas de primeira e segunda ordem, respectivamente, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} [B(y) \frac{\partial \psi}{\partial y}] &\approx \frac{[B(y_{i+1}) + B(y_i)]}{2h_y^2} \psi(y_{i+1}) \\ &- \frac{[B(y_{i+1}) + 2B(y_i) + B(y_{i-1})]}{2h_y^2} \psi(y_i) + \frac{[B(y_i) + B(y_{i-1})]}{2h_y^2} \psi(y_{i-1}), \end{aligned} \quad (4.15)$$

e

$$\frac{1}{2} \left[A(y) \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} (A(y) \psi) \right] \approx \frac{[A(y_{i+1}) + A(y_i)]}{4h_y} \psi(y_{i+1}) - \frac{[A(y_i) + A(y_{i-1})]}{4h_y} \psi(y_{i-1}) \quad . \quad (4.16)$$

Assim, substituindo as Eqs.(4.15) e (4.16) nas Eqs.(4.12) e (4.13) e denotando por i_{TI} o último intervalo discretizado que pertence ao TI e por i_0 o primeiro para o material 2D-X temos

para $i < i_{TI}$:

$$\frac{B_+}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{E+} - 2\psi_i^{E+} + \psi_{i-1}^{E+}] + \frac{A}{2h_y} [\psi_{i+1}^{H+} - \psi_{i-1}^{H+}] = E\psi_i^{E+} \quad , \quad (4.17)$$

$$-\frac{A}{2h_y} [\psi_{i+1}^{E+} - \psi_{i-1}^{E+}] + \frac{B_-}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{H+} - 2\psi_i^{H+} + \psi_{i-1}^{H+}] = E\psi_i^{H+} \quad , \quad (4.18)$$

para $i = i_{TI}$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h_y^2} \frac{[B_{0+} + B_+]}{2} \psi_{i_{TI}+1}^{E+} - \frac{1}{h_y^2} \frac{[B_{0+} + 3B_+]}{2} \psi_{i_{TI}}^{E+} + \\ & + \frac{B_+}{h_y^2} \psi_{i_{TI}-1}^{E+} + \frac{A}{4h_y} [\psi_{i_{TI}+1}^{H+} - 2\psi_{i_{TI}-1}^{E+}] = E\psi_{i_{TI}}^{E+} \quad , \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{A}{4h_y} [\psi_{i_{TI}+1}^{E+} - 2\psi_{i_{TI}-1}^{E+}] + \frac{1}{h_y^2} \frac{[B_{0-} + B_-]}{2} \psi_{i_{TI}+1}^{H+} - \\ & - \frac{1}{h_y^2} \frac{[B_{0-} + 3B_-]}{2} \psi_{i_{TI}}^{H+} + \frac{B_-}{h_y^2} \psi_{i_{TI}-1}^{H+} = E\psi_{i_{TI}}^{H+} \quad , \end{aligned} \quad (4.20)$$

para $i = i_0 = i_{TI} + 1$:

$$\frac{B_{0+}}{h_y^2} \psi_{i_0+1}^{E+} - \frac{1}{h_y^2} \frac{[3B_{0+} + B_+]}{2} \psi_{i_0}^{E+} + \frac{1}{h_y^2} \frac{[B_{0+} + B_+]}{2} \psi_{i_0-1}^{E+} - \frac{A}{4h_y} \psi_{i_0-1}^{H+} = E\psi_{i_0}^{E+} \quad , \quad (4.21)$$

$$\frac{A}{4h_y} \psi_{i_0-1}^{E+} + \frac{B_{0-}}{h_y^2} \psi_{i_0+1}^{H+} - \frac{1}{h_y^2} \frac{[3B_{0-} + B_-]}{2} \psi_{i_0}^{H+} + \frac{1}{h_y^2} \frac{[B_{0-} + B_-]}{2} \psi_{i_0-1}^{H+} = E\psi_{i_0}^{H+} \quad , \quad (4.22)$$

para $i > i_0 + 1$:

$$\frac{B_{0+}}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{E+} - 2\psi_i^{E+} + \psi_{i-1}^{E+}] + \frac{A_0}{2h_y} [\psi_{i+1}^{H+} - \psi_{i-1}^{H+}] = E\psi_i^{E+} \quad , \quad (4.23)$$

$$-\frac{A_0}{2h_y} [\psi_{i+1}^{E+} - \psi_{i-1}^{E+}] + \frac{B_{0-}}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{H+} - 2\psi_i^{H+} + \psi_{i-1}^{H+}] = E\psi_i^{H+} \quad . \quad (4.24)$$

A discretização de $H_{TI}(k_x, 0)$ e $H_0(k_x, 0)$, nos fornece

para $i < i_0$:

$$\begin{cases} (M_+ - B_+ k_x^2) \psi_i^{E+} + A k_x \psi_i^{H+} &= E \psi_i^{E+} \\ A k_x \psi_i^{E+} + (M_- - B_- k_x^2) \psi_i^{H+} &= E \psi_i^{H+} \\ (M_+ - B_+ k_x^2) \psi_i^{E-} - A k_x \psi_i^{H-} &= E \psi_i^{E-} \\ -A k_x \psi_i^{E-} + (M_- - B_- k_x^2) \psi_i^{H-} &= E \psi_i^{H-} \end{cases}, \quad (4.25)$$

para $i \geq i_0$:

$$\begin{cases} (M_{0+} - B_{0+} k_x^2) \psi_i^{E+} + A_0 k_x \psi_i^{H+} &= E \psi_i^{E+} \\ A_0 k_x \psi_i^{E+} + (M_{0-} - B_{0-} k_x^2) \psi_i^{H+} &= E \psi_i^{H+} \\ (M_{0+} - B_{0+} k_x^2) \psi_i^{E-} - A_0 k_x \psi_i^{H-} &= E \psi_i^{E-} \\ -A_0 k_x \psi_i^{E-} + (M_{0-} - B_{0-} k_x^2) \psi_i^{H-} &= E \psi_i^{H-} \end{cases}. \quad (4.26)$$

As Eqs.(4.17) - (4.26) denotam a versão discretizada da equação $H_{sis}\Psi = E\Psi$. Então, utilizando a base dada por $\{|i, E+\rangle, |i, H+\rangle, |i, E-\rangle, |i, H-\rangle\}$ com $i = 1, 2, \dots, N_y$ sendo o índice da discretização ao longo do eixo y , é possível representar a matriz H_{sis} na forma do operador

$$\hat{H}_{sis}(k_x) = \sum_{i\delta} \sum_{\eta, \eta'} H_{ii+\delta, k_x}^{\eta, \sigma, \eta', \sigma'} |i, \eta', \sigma'\rangle \langle i + \delta, \eta, \sigma| \quad (4.27)$$

com $H_{ii+\delta, k_x}^{\eta, \sigma, \eta', \sigma'} = \langle \eta, \sigma, i | H_{sis} | i + \delta, \eta', \sigma' \rangle$, $\sigma = \pm$, $\delta = -1, 0, 1$ e $\eta = E, H$. Note que, ao discretizarmos H_{sis} obtemos uma matriz $N_y \times N_y$ com k_x sendo um parâmetro presente nos termos referentes à $\delta \neq \pm 1$ na Eq.(4.27). Em outras palavras, com i_{TI} denotando o último intervalo discretizado pertencente ao TI e i_0 o primeiro para o material 2D-X, podemos escrever explicitamente os termos diferentes de zero em $H_{ii+\delta, k_x}^{\eta, \sigma, \eta', \sigma'}$, i.e.,

para $i < i_{TI}$ e $\delta = 0$:

$$H_{ii, k_x}^{\eta, \sigma, \eta', \sigma'} = \begin{cases} M_+ - B_+ k_x^2 - \frac{2B_+}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ M_- - B_- k_x^2 - \frac{2B_-}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ A k_x & , \sigma = \sigma' = + , \eta = E \text{ e } \eta' = H \\ -A k_x & , \sigma = \sigma' = - , \eta = E \text{ e } \eta' = H \end{cases} \quad (4.28)$$

para $i < i_{TI}$ com $\delta = \pm 1$:

$$H_{ii\pm 1}^{\eta, \sigma, \eta', \sigma'} = \begin{cases} \frac{B_+}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ \frac{B_-}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ \mp \frac{A}{2h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = H \text{ e } \eta = E \\ \pm \frac{A}{2h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = E \text{ e } \eta = H \end{cases} \quad (4.29)$$

para $i = i_{TI}$ com $\delta = -1$:

$$H_{ii-1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} \frac{B_+}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ \frac{B_-}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ -\frac{A}{2h_y} & , \sigma = \sigma' \text{ , } \eta' = E \text{ e } \eta = H \\ \frac{A}{2h_y} & , \sigma = \sigma' \text{ , } \eta' = H \text{ e } \eta = E \end{cases} \quad (4.30)$$

para $i = i_{TI}$ com $\delta = 0$:

$$H_{ii,k_x}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} M_+ - B_+ k_x^2 - \frac{(B_{0+}+3B_+)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ M_- - B_- k_x^2 - \frac{(B_{0-}+3B_-)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ A k_x & , \sigma = \sigma' = + \text{ , } \eta = E \text{ e } \eta' = H \\ -A k_x & , \sigma = \sigma' = - \text{ , } \eta = H \text{ e } \eta' = E \end{cases} \quad (4.31)$$

para $i = i_{TI}$ com $\delta = 1$:

$$H_{ii+1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} \frac{(B_{0+}+B_+)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ \frac{(B_{0-}+B_-)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ \frac{(A+A_0)}{4h_y} & , \sigma = \sigma' \text{ , } \eta' = E \text{ e } \eta = H \\ -\frac{(A+A_0)}{4h_y} & , \sigma = \sigma' \text{ , } \eta' = H \text{ e } \eta = E \end{cases} \quad (4.32)$$

para $i = i_0$ com $\delta = -1$:

$$H_{ii-1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} \frac{(B_{0+}+B_+)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ \frac{(B_{0-}+B_-)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ -\frac{(A_0+A)}{4h_y} & , \sigma = \sigma' \text{ , } \eta' = E \text{ e } \eta = H \\ \frac{(A_0+A)}{4h_y} & , \sigma = \sigma' \text{ , } \eta' = H \text{ e } \eta = E \end{cases} \quad (4.33)$$

para $i = i_0$ com $\delta = 0$:

$$H_{ii,k_x}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} M_{0+} - B_{0+} k_x^2 - \frac{(3B_{0+}+B_+)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ M_{0-} - B_{0-} k_x^2 - \frac{(3B_{0-}+B_-)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ A_0 k_x & , \sigma = \sigma' = + \text{ , } \eta = E \text{ e } \eta' = H \\ -A_0 k_x & , \sigma = \sigma' = - \text{ , } \eta = E \text{ e } \eta' = H \end{cases} \quad (4.34)$$

para $i > i_0$ com $\delta = 0$:

$$H_{ii,k_x}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} M_{0+} - B_{0+} k_x^2 - \frac{2B_{0+}}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ M_{0-} - B_{0-} k_x^2 - \frac{2B_{0-}}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ A_0 k_x & , \sigma = \sigma' = + \text{ , } \eta = E \text{ e } \eta' = H \\ -A_0 k_x & , \sigma = \sigma' = - \text{ , } \eta = E \text{ e } \eta' = H \end{cases} \quad (4.35)$$

para $i = i_0$ com $\delta = 1$:

$$H_{ii+1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} \frac{B_{0+}}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ \frac{B_{0-}}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ \frac{A_0}{2h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = E \text{ e } \eta = H \\ -\frac{A_0}{2h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = H \text{ e } \eta = E \end{cases} \quad (4.36)$$

para $i > i_0$ com $\delta = \pm 1$:

$$H_{ii\pm 1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} \frac{B_{0+}}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ \frac{B_{0-}}{h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ \mp \frac{A_0}{2h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = H \text{ e } \eta = E \\ \pm \frac{A_0}{2h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = E \text{ e } \eta = H \end{cases} \quad (4.37)$$

Tendo o Hamiltoniano H_{sis} , iremos explorar nas seções (4.4) e (4.5) os casos em que a segunda camada do nosso sistema Fig.(4.1) é, respectivamente, um isolante comum e um ferromagneto condutor.

4.2 Junção a partir do método Tight Biding

Para obtermos um Hamiltoniano *tight binding* para o sistema da Fig.(31), consideremos inicialmente apenas a segunda camada. Como descrito no Cap.(3), o Hamiltoniano *tight binding* que descreve um isolante topológico 2D em uma rede quadrada $\mathcal{H}_{TI}$, Eq. (3.50), foi derivado utilizando o procedimento de segunda quantização considerando o Hamiltoniano de uma partícula com a base mínima dada por $\{|s_i+\rangle, |p_i^++\rangle, |s_i-\rangle, |p_i^--\rangle\}$ e parâmetros *tight binding* mapeados naqueles do modelo BHZ. Portanto, utilizando a mesma base, para descrevermos esta segunda camada utilizamos o Hamiltoniano de partícula única dado por

$$H' = H'_{ato} + \Delta U' \quad (4.38)$$

onde H'_{ato} e $\Delta U'$ são, respectivamente, o Hamiltoniano atômico e a correção vinda da rede, para a segunda camada. Note que, de maneira semelhante ao H_{ato} presente em H na Eq.(3.18), um possível termo de interação spin-órbita já estaria incluso em H'_{ato} . Deste modo, aplicamos o procedimento de segunda quantização

$$\mathcal{H}' = \int d^3\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}) H' \psi(\vec{r}) \quad (4.39)$$

com $\psi(\vec{r})$ dado por

$$\psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_{i,\sigma,\alpha} \Phi_{\alpha\sigma}^\dagger(\vec{r} - \vec{R}_i) c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger . \quad (4.40)$$

A partir das Eqs.(4.39) e (4.40), podemos analisar as integrais de *hopping* como feito no Cap.(3), Figs.(20) e (21), e assim obtemos

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}' = & \sum_{i \in X} \left[\epsilon'_s (c_{i,s,+}^\dagger c_{i,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i,s,-}) + \epsilon'_p (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i,p^+,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i,p^-, -}) \right] \\
& + \sum_i \left\{ t'_{bs} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,s,-}) + t'_{as} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,s,-}) \right. \\
& + t'_{bp} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -}) + t'_{ap} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm a,p^-, -}) \\
& \pm t'_{bsp_y} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm b,p^+,+} + c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm b,p^-, -}) \pm it'_{asp_x} (c_{i,s,+}^\dagger c_{i\pm a,p^+,+}) \mp it_{asp_x} (c_{i,s,-}^\dagger c_{i\pm a,p^-, -}) \\
& \mp t'_{bsp_y} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm b,s,+} + c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm b,s,-}) \mp it'_{asp_x} (c_{i,p^+,+}^\dagger c_{i\pm a,s,+}) \pm it_{asp_x} (c_{i,p^-, -}^\dagger c_{i\pm a,s,-}) \left. \right\} \quad (4.41)
\end{aligned}$$

onde os parâmetros de *hopping* e energias *on-site* acima, são definidos de maneira equivalente ao mostrados nas Eqs.(3.28) - (3.37) e Eqs.(3.25) - (3.26) considerando $H_{ato} \rightarrow H'_{ato}$ e $\Delta U \rightarrow \Delta U'$. Assim, mapeando os parâmetros acima aos do modelo contínuo H_0 , Eq.(4.1), obtemos: $\epsilon'_s = M_{0+} - 2(t'_{as} + t'_{bs})$, $\epsilon'_p = M_{0-} - 2(t'_{ap} + t'_{bp})$, $A_0 = -2bt'_{bsp_y}$, $A_0 = -2at'_{asp_x}$, $B_{0-} = a^2 t'_{ap}$, $B_{0-} = b^2 t'_{bp}$, $B_{0+} = a^2 t'_{as}$ e $B_{0+} = b^2 t'_{bs}$.

Tendo descrito a segunda camada, o passo seguinte agora é analisar o sistema na geometria da junção na Fig.(31). Para isso, vamos voltar ao Hamiltoniano que descreve somente o TI, dado por $\mathcal{H}_{TB}$ na Eq.(3.52), e o reescrevamos em termos dos *hoppings* como

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{TI} = & \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \left[M_+ - 2(t_{as} + t_{bs}) + 2t_{as} \cos(k_x a) \right] c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,s,\sigma} \\
& + \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \left[M_- - 2(t_{ap} + t_{bp}) + 2t_{ap} \cos(k_x a) \right] c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma} \\
& - \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} 2t_{asp_x} \sigma \sin(k_x a) \left[c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma} + c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,s,\sigma} \right] \\
& + \sum_{k_x} \sum_j t_{bsp_y} \left[\pm c_{j,k_x,s,+}^\dagger c_{j\pm b,k_x,p^+,+} \pm c_{j,k_x,s,-}^\dagger c_{j\pm b,k_x,p^-, -} + h.c \right] \\
& + \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \left[t_{bs} c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j\pm b,k_x,s,\sigma} + t_{bp} c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j\pm b,k_x,p^\sigma,\sigma} \right]. \quad (4.42)
\end{aligned}$$

Observe que, de maneira semelhante, encontramos para a segunda camada o seguinte Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}' = & \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \left[M_{0+} - 2(t'_{as} + t'_{bs}) + 2t'_{as} \cos(k_x a) \right] c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,s,\sigma} \\
& + \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \left[M_{0-} - 2(t'_{ap} + t'_{bp}) + 2t'_{ap} \cos(k_x a) \right] c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma} \\
& - \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} 2t'_{asp_x} \sigma \sin(k_x a) \left[c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma} + c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,s,\sigma} \right] \\
& + \sum_{k_x} \sum_j t'_{bsp_y} \left[\pm c_{j,k_x,s,+}^\dagger c_{j\pm b,k_x,p^+,+} \pm c_{j,k_x,s,-}^\dagger c_{j\pm b,k_x,p^-, -} + h.c \right] \\
& + \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma} \left[t'_{bs} c_{j,k_x,s,\sigma}^\dagger c_{j\pm b,k_x,s,\sigma} + t'_{bp} c_{j,k_x,p^\sigma,\sigma}^\dagger c_{j\pm b,k_x,p^\sigma,\sigma} \right]. \quad (4.43)
\end{aligned}$$

Portanto, tendo os Hamiltonianos para cada camada devemos analisar agora como são os termos referentes a junção em y . A partir das Eqs.(4.42) e (4.43), vemos que os *hoppings* podem mudar na interface entre cada camada, i.e., $t_{b\alpha}$ e t_{bsp_y} para $i \in \text{TI}$ passa à ser $t'_{b\alpha}$ e t'_{bsp_y} para $i \in X$. Essa mudança faz com que na interface ocorra um acoplamento entre os orbitais do TI com aqueles da segunda camada. Dessa forma, consideramos que os *hoppings* da interface sejam $t''_{b\alpha}$ e t''_{bsp_y} , respectivamente, entre mesmos orbitais e entre orbitais diferentes. Assim, assumindo $i = i_{TI}$ como sendo a posição do último sítio do TI, reescrevemos o termo de acoplamento na interface como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ac} = & \sum_{k_x} \sum_{\alpha, \sigma} t''_{b\alpha} \left(c_{i_{TI}, k_x, \alpha, \sigma}^\dagger c_{i_{TI}+b, k_x, \alpha, \sigma} + c_{i_{TI}+b, k_x, \alpha, \sigma}^\dagger c_{i_{TI}, k_x, \alpha, \sigma} \right) \\ & + \sum_{k_x} t''_{bsp_y} \left[c_{i_{TI}, k_x, s, +}^\dagger c_{i_{TI}+b, k_x, p^+, +} + c_{i_{TI}+b, k_x, s, +}^\dagger c_{i_{TI}, k_x, p^+, +} \right. \\ & \left. + c_{i_{TI}, k_x, s, -}^\dagger c_{i_{TI}+b, k_x, p^-, -} + c_{i_{TI}+b, k_x, s, -}^\dagger c_{i_{TI}, k_x, p^-, -} + h.c \right] . \end{aligned} \quad (4.44)$$

Não obstante, devemos notar que ao mudarmos os termos de *hopping* ao longo da interface temos também uma mudança para os termos $M_\pm - 2(t_{a\alpha} + t_{b\alpha})$ e $M_{0\pm} - 2(t'_{a\alpha} + t'_{b\alpha})$ que se encontram, respectivamente, no último sítio do TI e no primeiro sítio do material X . Assim, podemos escrever o Hamiltoniano que descreve a interface como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{in} = & \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \left[M_+ - 2(t_{as} + t''_{bs}) + 2t_{as} \cos(k_x a) \right] c_{i_{TI}, k_x, s, \sigma}^\dagger c_{i_{TI}, k_x, s, \sigma} \\ & + \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \left[M_- - 2(t_{ap} + t''_{bp}) + 2t_{ap} \cos(k_x a) \right] c_{i_{TI}, k_x, p^\sigma, \sigma}^\dagger c_{i_{TI}, k_x, p^\sigma, \sigma} \\ & + \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \left[M_{0+} - 2(t'_{as} + t''_{bs}) + 2t'_{as} \cos(k_x a) \right] c_{i_{TI}+b, k_x, s, \sigma}^\dagger c_{i_{TI}+b, k_x, s, \sigma} \\ & + \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \left[M_{0-} - 2(t'_{ap} + t''_{bp}) + 2t'_{ap} \cos(k_x a) \right] c_{i_{TI}+b, k_x, p^\sigma, \sigma}^\dagger c_{i_{TI}+b, k_x, p^\sigma, \sigma} \\ & + \mathcal{H}_{ac} , \end{aligned} \quad (4.45)$$

dessa forma o Hamiltoniano descrevendo a junção Fig.(31) pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{TI} + \mathcal{H}_{in} + \mathcal{H}' . \quad (4.46)$$

4.3 Tight Binding e Diferenças Finitas

Podemos agora realizar um mapeamento entre os termos obtidos do Hamiltoniano discretizado Eqs.(4.28) - (4.37) com aqueles obtidos a partir do TB acima. Para isso, consideremos a seguinte identificação

$$\begin{aligned}
c_{i,\eta',\sigma'}^\dagger c_{i+\delta,\eta,\sigma} &= \sum_{j,\lambda,\zeta} |j, \lambda, \zeta\rangle \langle j, \lambda, \zeta| c_{i,\eta',\sigma'}^\dagger c_{i+\delta,\eta,\sigma} \sum_{j',\lambda',\zeta'} |j', \lambda', \zeta'\rangle \langle j', \lambda', \zeta'| \\
&= \sum_{j,\lambda,\zeta} \sum_{j',\lambda',\zeta'} |j, \lambda, \zeta\rangle \langle 0| c_{j,\lambda,\zeta} c_{i,\eta',\sigma'}^\dagger c_{i+\delta,\eta,\sigma} c_{j',\lambda',\zeta'}^\dagger |0\rangle \langle j', \lambda', \zeta'| \\
&= \sum_{j,\lambda,\zeta} \sum_{j',\lambda',\zeta'} \delta_{j,i} \delta_{\lambda,\eta'} \delta_{\zeta,\sigma'} \delta_{j',i+\delta} \delta_{\lambda',\eta} \delta_{\zeta',\sigma} |j, \lambda, \zeta\rangle \langle j', \lambda', \zeta'| \\
&= |i, \eta', \sigma'\rangle \langle i + \delta, \eta, \sigma| ,
\end{aligned} \tag{4.47}$$

onde utilizamos a completeza*

$$\sum_{j,\lambda,\zeta} |j, \lambda, \zeta\rangle \langle j, \lambda, \zeta| = \hat{1}, \tag{4.48}$$

a anti-comutação

$$\{c_{i,\lambda,\zeta}^\dagger, c_{j,\lambda',\zeta'}\} = \delta_{i,j} \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{\zeta,\zeta'}, \tag{4.49}$$

e as seguintes propriedades dos operadores de criação e destruição

$$c_{i,\lambda,\zeta}^\dagger |0\rangle = |i, \lambda, \zeta\rangle \quad ; \quad c_{i,\lambda,\zeta} |0\rangle = 0. \tag{4.50}$$

Através da Eq.(4.47) reescrevemos $\hat{H}_{sis}(k_x)$ como

$$\hat{H}_{sis}(k_x) = \sum_{i\delta} \sum_{\eta,\eta'} H_{ii+\delta,k_x}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} c_{i,\eta',\sigma'}^\dagger c_{i+\delta,\eta,\sigma}. \tag{4.51}$$

A Eq.(4.51) se assemelha aquela para o TB da Eq.(3.22), ou seja, $H_{ii+\delta,k_x}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'}$ passa a representar os termos relativos as energias *on-site* ϵ_η^i e de *hopping* $t_{\eta,\sigma;\eta',\sigma'}^{i,i+\delta}$.⁵⁵ Deste modo, assumindo que $h_y \rightarrow b$ e utilizando as Eqs.(4.28) - (4.29), é possível identificamos para $i < i_{TI}$

os termos de *hopping* :

$$t_{b,E} \equiv t_{E,\sigma;E,\sigma}^{i,i\pm b} = \frac{B_+}{b^2} \quad ; \quad t_{b,H} \equiv t_{H,\sigma;H,\sigma}^{i,i\pm 1} = \frac{B_-}{b^2}, \tag{4.52}$$

$$t_{b,EH} \equiv t_{E,\sigma;H,\sigma}^{i,i\pm b} = \pm \frac{A}{2b} \quad ; \quad t_{b,EH} \equiv t_{H,\sigma;E,\sigma}^{i,i\pm b} = \mp \frac{A}{2b}, \tag{4.53}$$

$$t_{EH} \equiv t_{E,+;H,+}^{i,i} = -t_{E,-;H,-}^{i,i} = A, \tag{4.54}$$

e os termos *on-site*:

$$\epsilon_E \equiv \epsilon_E^i = M_+ - t_{b,E} b^2 k_x^2 - 2t_{b,E}, \tag{4.55}$$

* Note que $c_{i,\eta',\sigma'}^\dagger c_{i+\delta,\eta,\sigma}$ faz com que a completeza, a qual envolve muitas partículas em segunda quantização, se reduza ao espaço de Fock de apenas uma partícula.^{58,64}

$$\epsilon_H \equiv \epsilon_H^i = M_- - t_{b,H} b^2 k_x^2 - 2t_{b,H} . \quad (4.56)$$

Utilizando as Eqs.(4.35) - (4.37) para a segunda camada ($i > i_0$), encontramos relações semelhante as acima, considerando as mudanças $\{A, B_{\pm}, M_{\pm}\} \rightarrow \{A_0, B_{0\pm}, M_{0\pm}\}$, ou seja,

$$\{\epsilon_E, \epsilon_H, t_{b,E}, t_{b,H}, t_{b,EH}, t_{b,HE}, t_{EH}\} \rightarrow \{\epsilon'_E, \epsilon'_H, t'_{b,E}, t'_{b,H}, t'_{b,EH}, t'_{b,HE}, t'_{EH}\} . \quad (4.57)$$

Por fim, na interface $i = i_{TI}$ (ou $i = i_0$) temos a partir das Eqs.(4.30), - (4.36)

$$t''_{b,E} \equiv t_{E,\sigma;E,\sigma}^{i_{TI},i_{TI}+b} = t_{E,\sigma;E,\sigma}^{i_0,i_0-b} = \frac{1}{b^2} \frac{(B_{0+} + B_+)}{2} , \quad (4.58)$$

$$t''_{b,H} \equiv t_{H,\sigma;H,\sigma}^{i_{TI},i_{TI}+b} = t_{H,\sigma;H,\sigma}^{i_0,i_0-b} = \frac{1}{b^2} \frac{(B_{0-} + B_-)}{2} , \quad (4.59)$$

$$t''_{b,EH} \equiv t_{E,\sigma;H,\sigma}^{i_{TI},i_{TI}+b} = -t_{E,\sigma;H,\sigma}^{i_0,i_0-b} = \frac{(A + A_0)}{4b} , \quad (4.60)$$

$$t''_{b,HE} \equiv t_{H,\sigma;E,\sigma}^{i_{TI},i_{TI}+b} = -t_{H,\sigma;E,\sigma}^{i_0,i_0-b} = -\frac{(A + A_0)}{4b} . \quad (4.61)$$

Apesar das semelhanças entre os dois métodos, devemos enfatizar que o TB é fundamentalmente diferente das diferenças finitas. O primeiro utiliza-se da descrição de orbitais e rede, enquanto que o segundo considera que o sistema seja contínuo sem rede nem orbitais. Assim, identificar i como um sítio aqui é definitivamente apenas uma analogia que nos possibilita obter de forma consistente os possíveis valores dos *hoppings* na interface para o modelo TB.

Portanto, podemos voltar ao modelo TB e descobrir os termos relativos à interface dados por $t''_{b\alpha}$ e t''_{bsp_y} , Eq.(4.44). Para isso, devemos compará-los com as Eqs.(4.58) - (4.61), tal que, obtemos

$$\begin{cases} t''_{bs} &= t''_{b,E} = \frac{(B_{0+} + B_+)}{2b^2} , \\ t''_{bp} &= t''_{b,H} = \frac{(B_{0-} + B_-)}{2b^2} , \\ t''_{bsp_y} &= t''_{b,EH} = \frac{(A + A_0)}{4b} , \end{cases} \quad (4.62)$$

dessa forma, a Eq.(4.44) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ac} = & \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \frac{(B_{0+} + B_+)}{2a^2} \left(c_{i_{TI},k_x,s,\sigma}^{\dagger} c_{i_{TI}+b,k_x,s,\sigma} + c_{i_{TI}+b,k_x,s,\sigma}^{\dagger} c_{i_{TI},k_x,s,\sigma} \right) \\ & + \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \frac{(B_{0-} + B_-)}{2a^2} \left(c_{i_{TI},k_x,p^{\sigma},\sigma}^{\dagger} c_{i_{TI}+b,k_x,p^{\sigma},\sigma} + c_{i_{TI}+b,k_x,p^{\sigma},\sigma}^{\dagger} c_{i_{TI},k_x,p^{\sigma},\sigma} \right) \\ & + \sum_{k_x} \frac{(A + A_0)}{4a} \left[c_{i_{TI},k_x,s,+}^{\dagger} c_{i_{TI}+b,k_x,p^+,+} - c_{i_{TI}+b,k_x,s,+}^{\dagger} c_{i_{TI},k_x,p^+,+} \right. \\ & \left. + c_{i_{TI},k_x,s,-}^{\dagger} c_{i_{TI}+b,k_x,p^-, -} - c_{i_{TI}+b,k_x,s,-}^{\dagger} c_{i_{TI},k_x,p^-, -} + h.c \right] . \end{aligned} \quad (4.63)$$

onde já consideramos que $a = b$, devido a simetria da rede. Podemos reescrever também a Eq.(4.45) considerando os mapeamentos realizados para $t_{a\alpha}$ e $t'_{a\alpha}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{in} = & \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \left[M_+ - \left(\frac{3B_+ + B_{0+}}{a^2} \right) + 2 \frac{B_+}{a^2} \cos(k_x a) \right] c_{i_{TI}, k_x, s, \sigma}^{\dagger} c_{i_{TI}, k_x, s, \sigma} \\
& + \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \left[M_- - \left(\frac{3B_- + B_{0-}}{a^2} \right) + 2 \frac{B_-}{a^2} \cos(k_x a) \right] c_{i_{TI}, k_x, p^{\sigma}, \sigma}^{\dagger} c_{i_{TI}, k_x, p^{\sigma}, \sigma} \\
& + \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \left[M_{0+} - \left(\frac{3B_{0+} + B_+}{a^2} \right) + 2 \frac{B_{0+}}{a^2} \cos(k_x a) \right] c_{i_{TI}+b, k_x, s, \sigma}^{\dagger} c_{i_{TI}+b, k_x, s, \sigma} \\
& + \sum_{k_x} \sum_{\sigma} \left[M_{0-} - \left(\frac{3B_{0-} + B_-}{a^2} \right) + 2 \frac{B_{0-}}{a^2} \cos(k_x a) \right] c_{i_{TI}+b, k_x, p^{\sigma}, \sigma}^{\dagger} c_{i_{TI}+b, k_x, p^{\sigma}, \sigma} \\
& + \mathcal{H}_{ac},
\end{aligned} \tag{4.64}$$

e, assim, o Hamiltoniano final TB, Eq.(4.46), para o sistema com junção TI/2D-X é dado por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{TI} + \mathcal{H}_{in} + \mathcal{H}' \tag{4.65}$$

com $\mathcal{H}_{TI}$, $\mathcal{H}_{in}$ e $\mathcal{H}'$ dados, respectivamente, pelas Eqs.(3.52), (4.43) e (4.64).

Nas próximas seções (4.4) e (4.5) iremos, respectivamente, explorar o caso de uma interface com um isolante normal (NI) e com um ferromagneto condutor (FM). Em cada caso, iremos investigar a estrutura de bandas, os estados de *bulk* e de borda. Para isso, utilizaremos tanto o Hamiltoniano obtido do método TB quanto aquele das diferenças finitas.

4.4 Interface - 1: TI/NI

Nesta seção iremos explorar o caso no qual a camada adjacente ao isolante topológico (TI) é um isolante comum (NI), i.e., $X \equiv \text{NI}$, como mostra a Fig.(32). Portanto temos para $y \in [0, L_{TI}]$ e $y \in [L_{TI}, L_{NI}]$ o modelo BHZ no limite topológico ($M < 0$) e no não topológico ($M_0 = M > 0$), respectivamente.

Figura 32 – Junção entre uma camada de isolante topológico (TI) e outra de isolante normal (NI) com cada uma contendo, respectivamente, uma largura L_{TI} e L_{NI} . Temos condições periódicas para x e condições *hard wall* em $y = 0$ e em $y = L_{TI} + L_{NI}$.

4.4.1 Estrutura de bandas

Utilizando os parâmetros da Tab.4, diagonalizamos o Hamiltoniano obtido via o método das diferenças finitas (com $h_y = 1.0$ nm), Eq.(4.27), e aquele obtido a partir do TB (com $= 1.0$ nm), Eq.(4.65), obtendo a Fig.(33).

Tabela 4 – Parâmetros das camadas TI e NI.

TI	NI	Unidade
$M = -10.0$	$M_0 = 10.0$	meV
$A = 375$	$A_0 = 375$	meV.nm
$B = -1120$	$B_0 = -1120$	meV.nm ²
$C = 0$	$C_0 = 0$	meV
$D = -730$	$D_0 = -730$	meV.nm ²
$L_{TI} = 400$	$L_{NI} = 400$	nm

Fonte: MICHETTI *et.al.*²⁷

Na Fig.(33) temos a estrutura de bandas para a junção 2D - TI/NI utilizando o método das diferenças finitas, Fig.(33a), e do TB, Fig.(33b). Pode-se observar que o resultados dos dois métodos concordam entre si e, portanto, adiante mostraremos somente os resultados advindos da discretização.

Figura 33 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/NI via diferenças finitas (a) e TB (b); o mapa de cores mostra a projeção do spin (com $\hbar = 1$) na direção z para cada estado da banda. Note que não há degenerescência em spin para cada k_x (com $k_x \neq 0$); as flechas em preto em b) indicam onde as bandas dos estados de borda estavam quando tínhamos a fita de TI (i.e., ao invés da camada NI).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos primeiro comparar os resultados para a junção, Fig.(33), com aqueles obtidos para a fita na Fig.(13b). Para a fita notamos que a simetria de inversão espacial estava presente, as bandas eram degeneradas e apenas um cruzamento para as bandas de borda aparecia em $k_x = 0$. Em outras palavras, as bandas dos estados de borda estavam sobrepostas, como indicado pelas flechas pretas na Fig.(33b).

Já na presença da camada NI, Fig.(33), a simetria de inversão espacial está quebrada (i.e., $E^\eta(k_x) \neq E^\eta(-k_x)$ com $\eta = \uparrow, \downarrow$) a degenerescência para cada k_x é levantada e aparecem dois pontos em $k_x = 0$ em que as bandas dos estados de borda se cruzam; um deles em $E \approx 7$ meV e o outro em $E \approx 0$ meV. Tanto para o caso em que tínhamos vácuo como para quando temos NI, a simetria de reversão temporal está presente (i.e., $E^\uparrow(k_x) = E^\downarrow(-k_x)$) e de partícula-buraco está quebrada (i.e., $E^\eta(k_x) \neq -E^\eta(-k_x)$).

Afim de compreendermos como a degenerescência seria levantada para cada k_x , exploramos a simetria de inversão espacial, a qual se apresenta como a diferença fundamental entre ter somente a fita de TI e ter a junção 2D - TI/NI. Variamos, assim, o valor de M_0 , Fig.(34), mantendo os outros parâmetros para TI e NI equivalente aos da Tab.4.

Figura 34 – Estruturas de bandas para a junção 2D - TI/NI com diferentes valores para M_0 . Em $M_0 = 10$ meV há duas energias em $k_x = 0$ em que as bandas dos estados de borda se cruzam, uma em $E \approx 7$ meV e $E \approx 0$ meV; aumentando M_0 , este último ponto se aproxima do primeiro.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig.(34) mostra o resultado da estrutura de bandas para a junção 2D-TI/NI quando variamos o valor M_0 , ou seja, mudamos o valor do *gap* para NI. Ao aumentarmos M_0 , notamos que o ponto de cruzamento que estava em $E(k_x = 0) \approx 0$ meV para $M_0 = 10$ meV passa à se encontrar em $E(k_x = 0) \approx 6$ meV para $M_0 = 1500$ meV, e paralelamente à isto, observamos que as bandas dos estados borda de spin *up* vão se aproximando daquelas de spin *down*. No limite em que $M_0 \rightarrow +\infty$, a estrutura de bandas volta à ser aquilo que

encontramos no caso em que NI era o vácuo, ou seja, com os níveis de energia degenerados em cada k_x , com somente um ponto de cruzamento em $k_x = 0$ para as bandas dos estados de borda e com a simetria de inversão espacial presente no sistema.

Poderíamos afirmar que a quebra da simetria de inversão espacial (que ocorre ao possuírmos a camada de NI, i.e., M_0 é finito) seria suficiente para que o levantamento da degenerescência em cada k_x ocorresse. Entretanto, veremos à seguir, que a simetria partícula-buraco possui também papel importante para a quebra desta degenerescência.

Para analisarmos a simetria partícula-buraco devemos mexer nos parâmetros C e D (referentes ao modelo BHZ), tanto para o TI quanto para NI. Consideremos primeiro o caso no qual variamos D (com $D = D_0$, i.e., o valor de D sendo o mesmo para TI e NI) e utilizamos os parâmetros para TI e NI da Tab.4, obtendo os resultados da Fig.(35).

Figura 35 – Estrutura de bandas para diferentes valores de D (com $D = D_0$) para a junção 2D - TI/NI. Os demais parâmetros (e.g., A , B e C) foram retirados da Tab.4. Para $D=0$ meV.nm², temos surpreendentemente a presença de degenerescência em spin para cada k_x , como mostra a cor vermelha na Fig.(35a).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.(35), apresentamos a estrutura de bandas para a junção 2D - TI/NI quando variamos $D = D_0$. Inesperadamente, observa-se através da Fig.(35a) que ao considerarmos $D=0$ (i.e., ao restaurarmos a simetria partícula-buraco no sistema) os níveis de energia se revelam degenerados em spin para cada k_x , apesar da simetria de inversão espacial estar quebrada (já que $M \neq M_0$). Ainda para a Fig.(35), notamos que ao diminuir de $D=0$

meV.nm^{-2} para $D=-800 \text{ meV.nm}^{-2}$ o ponto no qual as banda dos estados de borda se cruzam, em $E(k_x = 0) = 0 \text{ meV}$, se divide em dois; com um ponto assumindo valores de energia cada vez maiores e o outro permanecendo em $E(k_x = 0) \approx 0 \text{ meV}$, Fig.(36).

Na Fig.(36a) mostramos a diferença de energia $\Delta E_{k=0}$ entre os pontos em que as bandas dos estados de borda se cruzam; pontos estes indicados na Fig.(36b) pelas flechas pretas em $k_x = 0$. Com a Fig.(36a) notamos claramente que ao aumentar em

Figura 36 – Diferença de energia $\Delta E_{k=0}$ em função de $|D|$ em a), com $\Delta E_{k=0}$ sendo a diferença de energia entre os pontos indicados pelas flechas pretas em b). $\Delta E_{k=0} \approx 0$ para $|D|=0$ devido à hibridização dos estados de borda.

Fonte: Elaborada pelo autor.

módulo $D = D_0$ a diferença de energia $\Delta E_{k=0}$ aumenta de maneira linear. Observe ainda que $\Delta E_{k=0} \neq 0$ para $|D|=0$, pois os estados presentes na borda com o vácuo ($y = 0$) se hibridizam com aqueles presentes na junção entre o TI e o NI (i.e., $y = L_{TI}$), o que faz abrir um mini-gap.²⁷

A quebra da simetria partícula-buraco pode ser também verificada, e.g., ao variarmos somente D_0 ou D . Deste modo, na Fig.(37) é apresentado o caso em que variamos D_0 e fixamos $D = 0$, com $C = C_0 = 0$.

A Fig.(37) mostra que apesar do efeito na estrutura de bandas ser menor do que no caso em que variamos $D = D_0$, Fig.(35), a degenerescência também é perdida quando consideramos a quebra da simetria partícula-buraco para somente uma das camadas. Enfatizamos ainda, que mesmo para valores pequenos de D_0 (e.g., $D_0 \approx 1 \text{ meV.nm}^{-2}$) a degenerescência deixa de ocorrer. Neste caso, a diferença de energia entre dois níveis de energia para um mesmo k_x é da ordem de 10^{-6} meV . Quando há degenerescência, a diferença é menor do que 10^{-10} meV .

Outra maneira de analisarmos a quebra da simetria partícula-buraco, mantendo $D = D_0 = 0$, é considerarmos C (ou C_0) diferentes de zero, como na Fig.(38). A partir dela vemos que a degenerescência em spin para cada k_x é também levantada, corroborando com os resultados anteriores.

Figura 37 – Estrutura de bandas para a junção 2D-TI/NI com $D_0 = 0$ em a) e com $D_0 = -800$ meV.nm² em b); tanto em a) como em b) temos $D = 0$. O valor dos outros parâmetros foram retirados da Tab.4. Diminuindo D_0 a degenerescência também levanta, mas esta é menor do que ao mudar $D = D_0$, Fig.(35).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 38 – Estrutura de bandas para a junção 2D-TI/NI com $C_0 = 0$ em a) e com $C_0 = 10$ meV.nm² em b); tanto em a) como em b) temos $C \neq C_0$, com C e os demais parâmetros ($A, A_0, B, B_0 \dots$) retirados da Tab.4.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Afim de relacionarmos a simetria partícula-buraco com a degenerescência encontrada acima, voltemos ao caso em que tínhamos uma fita de TI e exploremos a porcentagem que contribui os elétrons ($|E_1 \pm\rangle$) e os buracos ($|H_1 \pm\rangle$) para cada estado da banda, Fig.(39).

Na Fig.(39) observamos que no regime topológico, como discutido no Cap.(2), as bandas invertem. Em outras palavras, enquanto as bandas de valência possuem um caráter maior de elétrons ($|E_1 \pm\rangle$), em amarelo, as bandas de condução adquirem uma maior contribuição de buracos ($|H_1 \pm\rangle$), em preto. Esta inversão torna-se mais presente quanto mais próximo estivermos de $E(k_x = 0) = |M|$ meV.

Das Figs.(39a) e (39b) nota-se que ao diminuirmos D , as bandas relacionadas com os estados de borda deixam de ter uma contribuição equivalente (em vermelho) de elétrons e buracos para $D = 0$ meV.nm², e passam à adquirir um caráter maior de buraco (em

preto), para $D = -800 \text{ meV.nm}^2$. Além disso, o ponto de cruzamento em $k_x = 0$ se desloca de $E(k_x = 0) = 0 \text{ meV}$ para $E(k_x = 0) \approx 7 \text{ meV}$, i.e., em direção às bandas de valência.

Figura 39 – Estrutura de bandas para a fita de TI (i.e., $M < 2B$ no modelo BHZ) com $D=0 \text{ meV.nm}^2$ em a) e com $D=-800 \text{ meV.nm}^2$ em b). Os demais parâmetros ($A, B, C...$) são retirados da Tab.4. O mapa de cores indica a porcentagem da parte de elétrons $|E_1\pm\rangle$ (em amarelo) e buracos $|H_1\pm\rangle$ (em preto) para cada estado referente à um ponto da banda.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Analisemos agora a estrutura de bandas para a fita de NI, Fig.(40), para em seguida voltarmos à junção 2D - TI/NI.

Figura 40 – Estrutura de bandas para a fita de NI (i.e., $M > 2B$ no modelo BHZ) com $D=0 \text{ meV.nm}^2$ em a) e com $D=-800 \text{ meV.nm}^2$ em b). Os demais parâmetros ($A, B, C...$) são retirados da Tab.4. Neste caso não há inversão para as bandas, como visto em amarelo (banda de condução) e em preto (banda de valência), referentes à contribuição de elétrons ($|E_1\pm\rangle$) e buracos ($|H_1\pm\rangle$).

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig.(40) mostra a estrutura de bandas para a fita de NI, em outras palavras, quando TI se encontra no regime trivial ($M > 2B$). Como discutido no Cap.(2), não há a presença de estados de borda devido as bandas em *bulk* estarem ordenadas normalmente.

Comparando a estrutura de bandas da fita de TI com a de NI, respectivamente, Figs.(39) e (40), enfatizamos que a diferença principal entre os duas fitas é a inversão de bandas em *bulk*. Ao diminuir D para cada uma destas fitas, a maior consequência ocorre para TI, onde tanto as bandas dos estados de borda quanto o fundo da banda de condução adquirem um caráter de buraco (em preto).

Voltemos à junção 2D-TI/NI considerando sua estrutura de bandas Fig.(35a), mas com o mapa de cor dado pela contribuição de $|E_1\pm\rangle$ e $|H_1\pm\rangle$, como segue na Fig.(41).

Figura 41 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/NI com a contribuição de elétrons ($|E_1\pm\rangle$) e buracos ($|H_1\pm\rangle$) para cada estado do sistema em a) e um *zoom* em b) do quadrado vermelho em a). As flechas em b) indicam os anti-cruzamentos entre as bandas de caráter eletrônico do TI (em amarelo) com aquelas de caráter de buraco do NI (em preto).

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig.(41) mostra a estrutura de bandas utilizando os mesmos parâmetros usados para a Fig.(35a), na qual a degenerescência para cada k_x ocorre mesmo com a simetria de inversão espacial estando quebrada. Ao realizarmos a junção 2D-TI/NI as duas camadas se acoplam misturando elétrons e buracos tanto na região da banda de valência como na de condução, o que por sua vez faz surgir anti-cruzamentos nas bandas de *bulk*, Fig.(41b).

No caso em que a simetria partícula-buraco esta presente, Fig.(41a), os estados de *bulk* se acoplam de maneira que a mistura de elétrons e buracos para os estados de borda se tornam iguais (em vermelho). Este efeito, ocasiona a degenerescência em energia para cada k_x vista nas Figs.(35a), (37a) e (38a). Por outro lado, ao quebrarmos a simetria partícula-buraco aumentando o valor para $D = D_0$, Fig.(42), há uma mudança nesta contribuição de elétrons e buracos para as bandas.

Ao compararmos os resultados para os casos em que $D = D_0 = 0 \text{ meV.nm}^2$, $D = D_0 = -400 \text{ meV.nm}^2$ e $D = D_0 = -800 \text{ meV.nm}^2$, nota-se que o único cruzamento em $k_x = 0$ que ocorria para as bandas dos estados de borda no primeiro caso, Fig.(41a), divide-se em dois para as Figs. (42a) e (42b), com um cruzamento permanecendo em $E \approx 0$ e o outro se deslocando em direção à banda de valência. Ao mesmo tempo em que este cruzamento se

Figura 42 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/NI para $D = D_0 = -400 \text{ meV.nm}^2$ em a) e $D = D_0 = -800 \text{ meV.nm}^2$ em b); tanto em a) como em b) o mapa de cores representa a contribuição de elétrons ($|E_1\pm\rangle$) e buracos ($|H_1\pm\rangle$) em cada estado. Diminuindo D , duas bandas dos estados de borda passam à ter um caráter maior de buraco.

Fonte: Elaborada pelo autor.

move há uma mudança no fundo da banda de condução (próximo de $k_x = 0$), pois para $D = D_0 = 0$ há uma distinção clara das primeiras bandas de condução do TI (em preto) e do NI (em amarelo), Fig.(41a), entretanto em $D = D_0 = -800 \text{ meV.nm}^2$ há uma mistura destas bandas (em vermelho) próximo à $E(k_x = 0) = 10 \text{ meV}$, Fig.(42b).

As duas bandas dos estados de borda que formam o cruzamento que se desloca, também passam à adquirir um maior caráter de buraco conforme diminuimos de $D = D_0 = -400 \text{ meV.nm}^2$ em lilás, Fig.(42a), para $D = D_0 = -800 \text{ meV.nm}^2$ em preto, Fig.(42b). Por outro lado, as outras duas bandas que formam o cruzamento em $E \approx 0 \text{ meV}$ permanecem com uma contribuição equivalente de $|E_1\pm\rangle$ e $|H_1\pm\rangle$, como visto em vermelho.

Portanto, com a quebra das simetrias partícula-buraco e de inversão espacial (i.e., neste caso $M \neq M_0$), a degenerescência das bandas para cada $k_x \neq 0$ é levantada de maneira à preservar a simetria de reversão temporal $E^\eta(k_x) = E^{-\eta}(-k_x)$ e, assim, é obtido os resultados das Figs.(35a) - (35d).

A seguir investigamos o perfil das autofunções ($|\Psi(y)|^2$) para estados de *bulk* e borda. Mostramos que, de fato, as funções de onda para os casos em que há degenerescência no sistema (i.e., a simetria partícula-buraco não esta quebrada) não apresentam a simetria de inversão espacial.

4.4.2 Estados de borda e texturas de spin

Considere primeiro os pontos destacados na Fig.(43), esta referente à Fig.(35d).

Figura 43 – Região da banda de valência da Fig.(35d) com os pontos destacados em amarelo, verde e preto para $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b), referentes aos estados explorados nas Figs.(44), (45) e (46). Note a quebra de degenerescência em cada k_x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Com os pontos destacados na Fig.(43), obtemos as funções de onda ao quadrado e a componente z das texturas de spins nas Figs.(44) e (45), respectivamente.

Figura 44 – Funções de onda ao quadrado em função da largura do sistema 2D - TI/Ni para os pontos amarelo, verde e preto da Fig.(43) para $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b). Há apenas um estado para cada energia E e as funções de onda decaem na interface, como indicado pela flecha vermelha em $y = 400 \text{ nm}$ (veja *insets*).

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig.(44) comprova que para cada um dos pontos destacados em amarelo, verde e preto, da Fig.(43), há somente um estado. Cada um destes estados é referente à uma energia presente na banda de valência, e portanto cada um possui uma amplitude de probabilidade maior no interior das camadas; em particular, para os pontos em preto e

verde os estados se encontram mais no TI, enquanto que para o ponto amarelo o estado está predominantemente na camada NI. Na interface (veja os *insets*) as funções de onda decaem, pois estes estados veem a mudança de *gap* entre cada material como uma barreira de potencial.

Para os estados da Fig.(44), calculamos as componentes da textura de spin, mostrados nas Figs.(45b) e (45).

Figura 45 – Componente z da textura de spin em função da largura do sistema 2D - TI/NI para os estados da Fig.(44) referentes à $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e à $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b). Os spins em a) são relacionadas com os de mesma cor de b) pela simetria de reversão temporal.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 46 – Componentes x em a) e y em b) da textura de spin em função da largura do sistema 2D - TI/NI para os estados referentes à $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ da Fig.(44a). Estas componentes também são zero para os estados da Fig.(44b) referentes à $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Com a componente z da textura de spin, Fig.(45), constatamos os estados presentes nas Figs.(44a) e (44b) relacionam-se entre si através da simetria de reversão temporal. É possível notar isto, e.g., comparando a curva verde tracejada na Fig.(45a) com a de mesma cor contínua na Fig.(45b), tal que, se para uma energia E temos $\langle \sigma_z \rangle =$

$\langle \Psi_{k_x}^E(y) | \sigma_z | \Psi_{k_x}^E(y) \rangle$, então comparando $\langle \sigma_z \rangle$ para estas curvas obtemos

$$\langle \Psi_{-k_x}^E(y) | \sigma_z | \Psi_{-k_x}^E(y) \rangle = -\langle \Psi_{k_x}^E(y) | \sigma_z | \Psi_{k_x}^E(y) \rangle, \quad (4.66)$$

a qual também é válida para as curvas em preto e amarelo. Portanto, os estados da Fig.(44a) formam pares de Krammer com os da Fig.(44b), pois possuem energia $E^\downarrow(k_x) = E^\uparrow(-k_x)$ e se relacionam pela Eq.(4.66). Por fim, obtemos na Fig.(46) que as componentes x e y da textura de spin são zero. Isto deve-se ao fato do Hamiltoniano, Eq.(4.27), não conter termos que acoplam o bloco $+$ e $-$.

Para investigarmos os estados de borda, considere os pontos em azul, verde, amarelo e laranja destacados na Fig.(47), a qual é equivalente às Figs.(42b) e (35d).

Figura 47 – Estrutura de bandas da Fig.(42b) com os pontos azul, verde, amarelo e laranja (em destaque) analisados na Fig.(48). Como visto na Fig.(35d), não há degenerescência neste caso em cada k_x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Dos pontos destacados na Fig.(47), seguem as análises para os estados de borda na Fig.(48) e as respectivas componentes z de spin na Fig.(49).

A partir da Fig.(48), nota-se que enquanto os estados em verde e amarelo localizam-se na interface das duas camadas ($y = 400$ nm), aqueles em azul e laranja estão localizados na interface entre o TI e o vácuo ($y = 0$). Este comportamento é resultado do domínio de massa que há ao longo de y , i.e., tanto em $y = 0$ como em $y = L$ temos $M \rightarrow +\infty$, já em $y \in]0, L_{TI}]$ e em $y \in [L_{TI}, L[$ temos, respectivamente, $M < 0$ e $M > 0$.

Comparando as Figs.(49a) e (49b) constatamos, (utilizando a Eq.(4.66)) que a componente z da textura de spin para o estado azul (verde) é equivalente à componente z da textura de spin do estado laranja (amarelo) e, portanto, os estados em verde e amarelo (ou azul e laranja), formam pares de Krammer. Não obstante, as componentes x e y para a textura de spin foram aqui omitidas por serem zero, como no caso para os estados de *bulk*.

Analisando a Fig.(48) e a estrutura de bandas da Fig.(47), pode-se observar que as funções de onda localizadas na interface TI/NI (em verde e amarelo) provêm de bandas em

Figura 48 – Funções de onda ao quadrado para $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b); as cores em azul, verde, laranja e amarelo referem-se aos pontos da Fig.(47). As funções de onda se localizam tanto na interface TI/NI (curvas verde e amarelo) quanto na interface entre TI e o vácuo (curvas azul e laranja).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 49 – Componentes z da textura de spin para as funções de onda da Fig.(47) para $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b); as cores em azul, verde, laranja e amarelo referem-se aos pontos da Fig.(47). Não há degenerescência, pois em cada $E(k_x)$ há somente um spin.

Fonte: Elaborada pelo autor.

vermelho, i.e., a contribuição entre elétrons e buracos para estes estados são equivalentes. Por outro lado, as funções de onda localizadas na interface TI/vácuo (em azul e laranja) procede de bandas em preto, em que a contribuição é predominantemente de buracos.

Com os resultados das Figs.(44), (45) e (48), verificamos que ao quebrarmos tanto a simetria partícula-buraco quanto a inversão espacial, levantamos a degenerescência para cada $E(k_x)$ da estrutura de bandas, como discutido na seção (4.4.1). Isto, por sua vez, ocorre de maneira com que a simetria de reversão temporal se mantenha no sistema.

Consideremos agora o caso em que simetria partícula-buraco no sistema é restaurada. Deste modo, investigaremos primeiro os estados referentes aos pontos em preto, verde e laranja presentes na Fig.(50).

Figura 50 – Região da banda de valência da Fig.(41a) com os pontos em preto, verde e laranja analisados nas Fig.(51). Aqui há degenerescência em cada k_x e a simetria partícula-buraco está presente.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 51 – Funções de onda ao quadrado em função da largura do sistema 2D - TI/Ni para os pontos azul, verde e laranja da Fig.(50) para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e para $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b), com as respectivas componentes z de spin em c) e d). Observa-se que há dois estados para cada energia E . Como mostrado pelos *insets* as funções de onda decaem na interface TI/Ni.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Ao contrário do que foi visto na Fig.(44), quando passamos à preservar a simetria partícula-buraco (pois $C = C_0 = D = D_0 = 0$) para a junção 2D - TI/NI, cada ponto em destaque da Fig.(50) é degenerado; como mostra as duas curvas em azul, em laranja e em verde associados, respectivamente, com as energias $E = -12.48$ meV, $E = -14.23$ meV e $E = -16.67$ meV tanto para $k_x = -0.019$ nm⁻¹ como para $k_x = 0.019$ nm⁻¹ nas Figs.(51a) e (51b). Observa-se também, através dos *insets*, que cada uma das funções de onda acima decaem na interface entre as camadas TI e NI, de modo semelhante a Fig.(44).

Com a componente z da textura de spin, Figs.(51c) e (51d), é fácil observar que os estados degenerados para um dado k_x possuem spins opostos ao longo da largura da junção 2D - TI/NI. Além disso, utilizando a Eq.(4.66), verificamos que as curvas contínuas da Fig.(51c) são pares de Krammer daquelas tracejas de mesma cor da Fig.(51d), o que mostra que o sistema possui reversão temporal.

Ainda para as Figs.(51c) e (51d), é possível confirmar que não há simetria de inversão espacial no sistema. Para isso, considere a Eq.(2.134) reescrita a baixo

$$\langle \sigma_z \rangle \equiv \sigma_z^{k_x}(y), \quad (4.67)$$

e, e.g., $\sigma_z^{k_x}(y)$ para a curva azul contínua da Fig.(51d). Se considerarmos $\sigma_z^{-k_x}(y)$ referente à curva azul contínua da Fig.(51c) concluímos que

$$\sigma_z^{k_x}\left(\frac{y}{2} + 400\right) \neq \sigma_z^{-k_x}\left(-\frac{y}{2} + 400\right), \quad (4.68)$$

para qualquer $y \in [0, L]$ e com $L = L_{TI} + L_{NI} = 800$ nm. Deste modo, a simetria de inversão espacial não leva o spin *up* da Fig.(51c) ao spin *up* da Fig.(51d).

Para explorarmos esta degenerescência para os estados de borda, consideramos os pontos azul e verde em destaque na Fig.(52), analisando-os nas Figs.(52) e (53).

Figura 52 – Estrutura de bandas da Fig.(41a) com os pontos em preto e verde analisados nas Fig.(53). As bandas dos estados de borda (em vermelho) possuem contribuição equivalente de elétrons $|E_1 \pm\rangle$ e buracos $|H_1 \pm\rangle$.

Os resultados expostos na Fig.(53) corroboram com aqueles obtidos para o *bulk*, Figs.((51b)) e (51a), pois não deixam dúvidas que ao restaurarmos a simetria partícula-buraco no sistema encontramos que para cada k_x e energia E há dois estados, ou seja, os pontos da banda são degenerados. Em contraste, quando tal simetria é quebrada, encontramos somente um estado para cada ponto da banda, Figs.(44) e (48).

Figura 53 – Funções de onda ao quadrado para $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ em a) e para $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$ em b), e as respectivas componentes z da textura de spin em c) e em d); as cores em azul e verde referem-se aos pontos da Fig.(52). Para energia E e k_x há dois estados, um localizado na interface TI/Ni em $y = 400 \text{ nm}$ (indicado pela flecha vermelha), e o outro localizado na interface TI/vácuo em $y = 0 \text{ nm}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Além disso, comparando as Figs.(53c) e (53d), como feito para a Fig.(51), é fácil verificar que a curva azul tracejada (contínua) em $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ é o par de Krammer da curva de mesma cor contínua (tracejada) em $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$. Não obstante, também nota-se que não há simetria de inversão espacial, pois o spin *up* (*down*) em $k_x = -0.019 \text{ nm}^{-1}$ não se relaciona, através da Eq.(4.68), com o spin *up* (*down*) de $k_x = 0.019 \text{ nm}^{-1}$.

Quando tínhamos a fita de TI, vimos na seção (2.3.2) que a degenerescência para cada k_x ocorria mesmo sem a simetria partícula-buraco, pois havia no sistema reversão temporal e a inversão espacial. No caso da junção 2D - TI/Ni, encontramos que a degenerescência no sistema volta à ocorrer ao recuperar a simetria partícula-buraco. Assim, somente ao quebrarmos tanto a simetria partícula-buraco como a inversão espacial,

a degenerescência para cada k_x é levantada. Porém, a reversão temporal ainda é mantida no sistema, pois $E^\eta(k_x) = E^{-\eta}(-k_x)$, isto deixa de ser verdade na junção 2D-TI/FM à seguir.

4.5 Interface - 2: TI/FM

Nesta seção, ao invés do isolante trivial estudado na seção (4.4), consideramos uma camada de ferromagneto condutor (FM) ao lado do isolante topológico (TI), Fig.(54), tendo como referência o trabalho desenvolvido por Zegarra, *et.al.*, ref.²⁸ Para estudarmos a junção 2D-TI/FM, tanto o modelo TB derivado na seção (4.2) como o seu análogo obtido das diferenças finitas, seção (4.1), foram adaptados levando em conta as características (e.g., ser um condutor e ter magnetização) do FM presente no modelo ref.²⁸

Figura 54 – Junção bidimensional entre uma camada de isolante topológico (TI) com largura L_{TI} e um ferromagneto condutor (FM) com largura L_{FM} , com sendo $\vec{m}$ sua magnetização uma largura. Temos condições de contorno periódicas em x e *hard-wall* para $y = 0$ e em $y = L_{TI} + L_{FM}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para a junção 2D - TI/FM, analisamos a estrutura de bandas, o perfil das funções de onda $|\Psi(y)|^2$ e as respectivas texturas de spin para diferentes faixas de parâmetros. Comparamos o modelo TB com aquele obtido a partir da discretização, tendo em vista o impacto das correções advindas ao termos a base completa do BHZ e não uma base mínima. Além disso, discutimos a quebra da simetria de reversão temporal e sua consequência para a existência dos estados de borda.

Afim de descrevermos o FM utilizamos um modelo TB adaptado da Eq.(4.41), i.e., tendo como referência o Hamiltoniano do FM utilizado na ref.,²⁸ acrescentamos um termo $\vec{m} \cdot \vec{S}$ relativo à magnetização ao Hamiltoniano de partícula única H' , Eq.(4.38),

$$H_{FM} = H' + \vec{m} \cdot \vec{\sigma} , \quad (4.69)$$

onde $\vec{m} \cdot \vec{\sigma}$ representa um termo do tipo Zemman, com $\vec{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ sendo o operador de spin e $\vec{m} = (m_x, m_y, m_z)$ a magnetização do FM. O termo $\vec{m} \cdot \vec{\sigma}$ seria como um resultado efetivo após considerarmos a interação elétron-elétron e tomarmos a aproximação de campo médio.

Deste modo, como realizado na seção (4.2), ao aplicar o procedimento de segunda quantização para a Eq.(4.69) como

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\mathcal{FM}} &= \int d^3\vec{r} \psi^\dagger(\vec{r}) H_{FM} \psi(\vec{r}) \\ &= \mathcal{H}' + \mathcal{H}_Z,\end{aligned}\quad (4.70)$$

obtemos $\mathcal{H}'$, Eq.(4.41), e $\mathcal{H}_Z$ dado por

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_Z &= \sum_{i',\sigma',\alpha'} \sum_{i,\sigma,\alpha} \int \Phi_{\alpha'}^*(\vec{r} - \vec{R}_{i'}) \Phi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}_i) d^3\vec{r} \vec{m} \cdot \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle c_{i',\alpha',\sigma'}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma} \\ &= \sum_{i',\alpha',\sigma'} \sum_{i,\alpha,\sigma} \delta_{i',i} \delta_{\alpha,\alpha'} \vec{m} \cdot \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle c_{i',\alpha',\sigma'}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma} \\ &= \sum_{i,\alpha,\sigma,\sigma'} \vec{m} \cdot \langle \sigma' | \vec{\sigma} | \sigma \rangle c_{i,\alpha,\sigma'}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma} \\ &= \sum_{i,\sigma} \sigma m_z (c_{i,s,\sigma}^\dagger c_{i,s,\sigma} + c_{i,p,\sigma}^\dagger c_{i,p,\sigma}) + \sum_{i,\sigma} [(m_x - im_y) c_{i,s,+}^\dagger c_{i,s,-} + h.c.].\end{aligned}\quad (4.71)$$

Em seguida, mapeando os parâmetros de $\mathcal{H}_{\mathcal{FM}}$ com aqueles presentes em,²⁸ ou seja,

$$\begin{cases} t'_{bp} &= t'_{ap} = -t_F \\ t'_{bs} &= t'_{as} = -t_F \\ \epsilon'_s &= \epsilon'_p = -\mu_F \end{cases} \quad ; \quad \begin{cases} t'_{bsp_y} &= 0 \\ t'_{asp_x} &= 0 \end{cases}, \quad (4.72)$$

e reescrevendo em coordenadas esféricas a magnetização $\vec{m} = m (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ com $m = \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2}$, Fig.(55d), a Eq.(4.71) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\mathcal{FM}} &= -\mu_F \sum_{i,\alpha,\sigma} c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma} - t_F \sum_{i,\sigma,\alpha} (c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i\pm a,\alpha,\sigma} + c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i\pm b,\alpha,\sigma}) + \\ &\quad + \sum_{i,\sigma} [\sigma m \cos(\theta) (c_{i,s,\sigma}^\dagger c_{i,s,\sigma} + c_{i,p,\sigma}^\dagger c_{i,p,\sigma})] \\ &\quad + \sum_i [m \sin(\theta) e^{-i\phi} c_{i,s,+}^\dagger c_{i,s,-} + h.c.].\end{aligned}\quad (4.73)$$

O modelo da Eq.(4.73) descreve um FM bidimensional infinito, porém queremos analisar a junção 2D - TI/FM. Para isto, o caminho natural é assumirmos primeiro a geometria de uma fita ao longo de x para o FM, ou seja, x passa à ter condições periódicas enquanto que em $y = 0$ e em $y = L_{FM}$ temos condições *hard-wall*. Deste modo, podemos realizar uma transformada de Fourier parcial da Eq.(4.73) como feito para a Eq.(3.52) e, assim, encontramos que

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{FM} &= \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma,\alpha} [-\mu_F - 2 t_F \cos(k_x a) + \sigma m \cos \theta] c_{j,k_x,\alpha,\sigma}^\dagger c_{j,k_x,\alpha,\sigma} \\ &\quad - t_F \sum_{k_x} \sum_{j,\sigma,\alpha} c_{j,k_x,\alpha,\sigma}^\dagger c_{j\pm a,k_x,\alpha,\sigma} + \sum_{k_x,j} [m \sin(\theta) e^{-i\phi} c_{k_x,j,s,+}^\dagger c_{k_x,j,s,-} + h.c.].\end{aligned}\quad (4.74)$$

Tendo o modelo do FM para a geometria de uma fita, Eq.(4.74), vamos descrever a junção TI/FM considerando $\mathcal{H}$ da Eq.(4.46). Para isso, consideramos $\mathcal{H}' \equiv \mathcal{H}_{FM}$ e notamos que no modelo da ref.²⁸ os termos de *hopping* para a o Hamiltoniano da interface $\mathcal{H}_{in}$ leva em conta somente acoplamentos entre mesmos orbitais, ou seja,

$$t''_{b\alpha} = t_B \quad ; \quad t''_{bsp_y} = 0 \quad (4.75)$$

Também devido à ref.,²⁸ não levamos em conta que os termos *on-site* do último sítio do TI apresentaria alguma mudança devido à camada de FM, como visto na Eq.(4.45), onde notamos que $t_{b\alpha} \rightarrow t''_{b\alpha}$ ($t'_{b\alpha} \rightarrow t''_{b\alpha}$) para o último (primeiro) sítio do TI (FM). Portanto, o Hamiltoniano para a interface se resume à

$$\mathcal{H}_{in} = t_B \sum_{k_x} \sum_{\alpha, \sigma} \left(c_{i_{TI}, k_x, \alpha, \sigma}^\dagger c_{i_{TI}+b, k_x, \alpha, \sigma} + c_{i_{TI}+b, k_x, \alpha, \sigma}^\dagger c_{i_{TI}, k_x, \alpha, \sigma} \right). \quad (4.76)$$

Portanto, o Hamiltoniano TB para a junção TI/FM é dado por

$$\mathcal{H}_{TI/FM} = \mathcal{H}_{TI} + \mathcal{H}_{in} + \mathcal{H}_{FM} \quad (4.77)$$

com $\mathcal{H}_{TI}$, $\mathcal{H}_{in}$ e $\mathcal{H}_{FM}$ dados, respectivamente, pelas Eqs.(3.50), (4.5) e (4.74).

4.5.1 Estrutura de bandas

Antes de obtermos a estrutura de bandas para o Hamiltoniano envolvendo a interface FM/TI vamos diagonalizar a Eq.(4.74) para a parte FM. Para isso, consideramos os parâmetros FM presentes na Tab.5 e, assim, obtemos as estruturas de bandas da Fig.(55), relativas às diferentes direções para a magnetização.

Tabela 5 – Parâmetros para a junção 2D - TI/FM.

<i>FM</i>	<i>TI</i>
$L_{FM} = 9 \text{ \AA}$	$L_{TI} = 11 \text{ \AA}$
$a = 1 \text{ \AA}$	$a = 1 \text{ \AA}$
$\mu_F = 0.5 \text{ eV}$	$M = -1.0 \text{ eV}$
$t_F = -1.0 \text{ eV}$	$B = -1.0 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2$
$m = 0.1 \text{ eV}$	$D = 0.0 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2$
$t_B = 0.8 \text{ eV}$	$A = 2.0 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$
—	$C = 0 \text{ eV}$

Fonte: ZEGARRA *et.al.*²⁸.

Figura 55 – Estrutura de bandas para a fita de FM com a magnetização na direção x em a), na direção y em b) e na direção z em c) com os parâmetros da Tab.5; as direções são indicadas pelos ângulos θ e ϕ das coordenadas esféricas mostradas em d). Cada banda de a), b) e c), é degenerada em orbital (s e p), sendo que em a) e b) as bandas com projeção zero (em azul forte) são do orbital p degeneradas também em spin.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig.(55) mostra a estrutura de bandas para uma fita de FM com os parâmetros dados na Tab.5. Para os três casos, onde a magnetização está em x , Fig.(55a), em y , Fig.(55b), e em z , Fig.(55c), as bandas deixam de ter degenerescência em spin e mantêm a degenerescência em orbital s e p . Isto ocorre, pois tanto as energias *on-site* quanto os *hoppings*, Eq.(4.72), são iguais entre os orbitais.

Deve-se ainda, da Fig.(55), observar que somente quando a magnetização está na direção z é que o sistema adquire as projeções de $spin \uparrow$ e de $spin \downarrow$ (relativas ao eixo z) diferentes de zero. Para as magnetizações em x e em y são, respectivamente, as projeções em x e em y que são diferentes de zero (não mostrado pelo mapa de cor).

Analisaremos agora a estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM, para isso diagonalizamos o Hamiltoniano $\mathcal{H}_{TI/FM}$ utilizando os parâmetros da Tab.5 e diferentes direções da magnetização, obtendo os resultados da Fig.(56).

Ao realizarmos a junção 2D-TI/FM, notamos da Fig.(56) que duas bandas (indicadas pelas flechas azuis) dos estados de borda se misturam com o FM.

Figura 56 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM para quando a magnetização do FM está na direção x em a), y em c) e z em e). Em b), d) e f) é mostrado um *zoom* para a região quadriculada em preto, respectivamente, de a), c) e e). Diferente das bandas referentes às flechas vermelhas, as bandas indicadas pelas flechas azuis emergem para o *bulk* do FM e há uma abertura de um ante-cruzamento em $E(k_x = 0) \approx 0.21$ eV.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Quando a magnetização está no plano estas bandas mudam de cor ao encontrar as bandas do FM, Figs.(56a) e (56c), indicando que há uma mudança na orientação da projeção do spin quando os estados de borda vão do TI para o FM. Por outro lado, as bandas indicadas pelas flechas vermelhas referem-se aos estados presentes na interface TI/vácuo e, por isso, não se misturam com o FM.

Diferente da Fig.(56f), as Figs.(56b) e (56d), possuem um ante-cruzamento em $E(k_x = 0) \approx 0.21$ eV causado pelo cruzamento das bandas indicadas pelas flechas

azuis. Quando estas bandas cruzam com aquelas indicadas pelas flechas vermelhas, há o aparecimento de dois pequenos ante-cruzamentos para $k_x \neq 0$ devido à hibridização dos estados localizados na interface TI/FM com aqueles localizados em vácuo/TI.

O ante-cruzamento em $k_x = 0$ para as bandas indicadas pelas flechas azuis, Figs.(56b) e (56d), ocorrem devido à magnetização estar paralela ao plano da junção, o que faz com que os termos $\langle s_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| s_i^\mp \mp \rangle$ sejam diferentes de zero. Nestes casos, o Hamiltoniano $\mathcal{H}_{TI/FM}$ passa à ter termos que acoplam os blocos + e - (associados aos spins no modelo BHZ). Por outro lado, quando a magnetização está na direção z , Fig.(56f), o acoplamento dos blocos + e - não ocorre, nem o ante-cruzamento.

Além disso, quando os blocos + e - se acoplam a estrutura de bandas deixa de ter uma textura de spin trivial no espaço k_x , ou seja, o spin deixa de ter projeções somente em z . Para vermos isto, consideremos o valor médio de spin para cada k_x calculado como

$$\langle S_\eta(k_x) \rangle = \frac{1}{2} \sum_i \langle \psi_i(k_x) | \sigma_\eta | \psi_i(k_x) \rangle, \quad (4.78)$$

onde $|\psi_i(k_x)\rangle$ representa o i -ésimo componente (com i referente ao sítio) da função de onda obtida ao diagonalizarmos o Hamiltoniano, Eq.(4.77), e σ_η representa a matriz de spin dada pela Eq.(3.55) com $\eta = x, y, z$.

Portanto, para a região do ante-cruzamento das bandas indicadas pelas flechas azuis, Fig.(56b), obtemos a textura de bandas na Fig.(57b).

Figura 57 – Ante-cruzamento das bandas indicadas pelas flechas azuis para quando a magnetização está em x , referente à Fig.(56b), em a) e suas respectivas texturas de spin no espaço k_x em b). A região I e II possui texturas de spin opostas, conforme é considerado valores maiores para k_x .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Através da Fig.(57b), vemos que na região do ante-cruzamento para as bandas indicadas pelas flechas azuis da Fig.(56b), a textura de spin no espaço k_x muda devido à magnetização no eixo x . Em outras palavras, movendo de $k_x = -0.030 \text{ Å}^{-1}$ para $k_x = 0$

$\text{\AA}^{-1}$ na região I (II) da Fig.(57a) o spin deixa de ter uma componente na direção $+\hat{z}$ ($-\hat{z}$) e passa à ficar no plano com uma componente $+\hat{x}$ ($-\hat{x}$). Depois de $k_x = 0.0 \text{ \AA}^{-1}$, a região I (II) passa à ter componentes $-\hat{z}$ ($+\hat{z}$).

Em termos de simetrias, todos os resultados da Fig.(56) para junção 2D - TI/FM possuem a quebra da simetria de reversão temporal, de inversão espacial e de partícula-buraco. Fazendo ainda alusão as discussões para a junção 2D - TI/NI, o cruzamento em $k_x = 0$ das bandas indicadas pelas flechas vermelhas, ocorre em $E = 0$ pois os estados presentes nestas bandas estão localizados na interface com o vácuo e a camada de TI possui a simetria partícula-buraco (pois, $D = C = 0$).

Exploramos à seguir alguns pontos das estrutura de bandas e reproduzimos parcialmente os resultados presentes na ref.²⁸ Relatamos uma pequena correção para as matrizes de spin σ_x e σ_y . Por fim, analisamos a textura de spin para o espaço k_x .

4.5.2 Estados de borda e texturas de spin

Tanto na ref.²⁸ como no modelo TB desenvolvido aqui, a base utilizada é dada por $\mathcal{B} = \{|s_i+\rangle, |p_i^+\rangle, |s_i-\rangle, |p_i^-\rangle\}$. Devemos nos atentar com os termos $\{|p_i^\pm\rangle\}$, pois estes na notação do momento angular total representam os estados com $J = \frac{3}{2}$ e $m_J = \pm\frac{3}{2}$. Assim, ao realizarmos a expansão dos operadores de spin $\hat{\sigma}_x$ e $\hat{\sigma}_y$ na base $\mathcal{B}$ vemos que os termos $\langle p_i^\pm \pm |\hat{\sigma}_x|p_i^\mp \mp \rangle$ e $\langle p_i^\pm \pm |\hat{\sigma}_y|p_i^\mp \mp \rangle$ são zero, Eq.(3.55).

Por outro lado, na ref.²⁸ os termos $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}|p_i^\mp \mp \rangle$ são diferentes de zero, com $\langle p_i^\pm \pm |\hat{\sigma}_x|p_i^\mp \mp \rangle = 1$ e $\langle p_i^\pm \pm |\hat{\sigma}_y|p_i^\mp \mp \rangle = \mp j$ com $j^2 = -1$. Isto não é verdade, pois $\hat{\sigma}_x$ e $\hat{\sigma}_y$ não consegue mudar a projeção do momento angular total de $m_J = -3/2$ para $m_J = 3/2$.

Para compararmos os resultados aqui obtidos daqueles equivalentes presentes na ref.²⁸ comecemos as análises com a magnetização na direção z , Fig.(58).

Figura 58 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM com $\vec{m} = m \hat{z}$. Os pontos preto, amarelo e verde referem-se aos estados analisados na Fig.(59).

Figura 59 – Função de onda ao quadrado em a) e as componentes z , x e y da textura de spin em b), c) e d) em função da largura da junção 2D - TI/FM, quando a magnetização é $\vec{m} = m\hat{z}$. As cores referem-se aos pontos preto, amarelo e verde da Fig.(58).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Neste caso, não há correções quanto aos termos $\langle p_i^\pm \pm |\hat{\sigma}_x| p_i^\mp \mp \rangle$. Isto decorre do fato de, ao invés de $\hat{\sigma}_x$, termos aqui $\hat{\sigma}_z$ o qual é diagonal e, portanto, $\langle p_i^\pm \pm |\hat{\sigma}_z| p_i^\mp \mp \rangle = 0$.

Na Fig.(59) há somente a componente z da textura de spin é diferente de zero, uma vez que a magnetização ao estar em $\vec{m} = m\hat{z}$ não altera o valor de $\langle \sigma_x \rangle$ e $\langle \sigma_y \rangle$, i.e., continuam zero como visto já para a junção 2D - TI/NI. Além disso, conforme a banda do estados de borda, Fig.(58), muda sua curvatura o estado presente na interface (curva preta) TI/FM emerge para dentro da camada do FM (curva verde), Figs.(59a) e (59b).

Agora, consideremos a magnetização da camada FM na direção x , Fig.(60). Quando o termo $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle$ é zero (o caso correto), nota-se o aparecimento de um ante-cruzamento para quando as bandas dos estados de borda encontram com as bandas do FM (flechas pretas na Fig.(60a)). No caso errado, este ante-cruzamento não ocorre, veja as flechas pretas na Fig.(60b). O ante-cruzamento se deve ao fato de haver somente o termo $\langle s_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| s_i^\mp \mp \rangle$ passível de fazer girar o spin do estado de borda do eixo z para o eixo x na interface TI/FM, enquanto que a parte associada ao orbital p , (i.e., $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle$) não é acoplada na interface por ser zero.

Figura 60 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM com a magnetização do FM na direção x para o caso correto em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle = 0$ em a) e o caso errado em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle \neq 0$ em b). Os pontos preto, amarelo e verde referem-se aos estados analisados nas Figs.(61) e (62). As flechas em preto indicam o local de encontro das bandas de borda com aquelas do FM.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para os pontos em destaque da Fig.(60) foram obtidos as Figs.(61) e (62).

Figura 61 – Função de onda ao quadrado em a) e componente z da textura de spin em b) em função da largura da junção 2D - TI/FM para os pontos preto, amarelo e verde da Fig.(60). Note que o estado associado ao ponto preto (verde) está mais presente na interface TI/FM (na camada FM).

Fonte: Elaborada pelo autor.

As funções de onda em preto, amarelo e verde na Fig.(61a), mostram que os estados na interface TI/FM (em preto) penetram cada vez mais na camada FM conforme a banda do estado de borda muda sua curvatura (veja a flecha preta e os pontos destacados na Fig.(60)), tal que, no ponto verde, o estado passa à estar mais presente na camada FM do que na interface TI/FM. Esta penetração é também notado através das componentes z na Fig.(61b) e x na Fig.(62a) da textura de spin.

Figura 62 – Componentes x em a) e y em b) da textura de spin para os estados da Fig.(61a). Note no *inset* que a componente x adquire um valor negativo logo antes da interface e, depois, passa à ser positivo. Como na Fig.(61), as curvas tracejadas mostram que a correção $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle = 0$ muda pouco os resultados do caso não correto, em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle \neq 0$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Com as Figs.(61b) e (62a), nota-se que conforme a banda dos estados de borda mudam sua curvatura e os estados deixam de estar localizados na interface (compare as curvas preta e verde), a componente z da textura de spin (na interface TI/FM) vai diminuindo e a componente x vai aumentando na camada FM. Já a componente y da textura de spin, mantém-se igual à zero.

Consideremos a magnetização na direção y , Fig.(63).

Figura 63 – Estrutura de bandas para a junção 2D - TI/FM com a magnetização do FM na direção y para o caso correto em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle = 0$ em a) e o caso errado em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \mp \rangle \neq 0$ em b). Os pontos preto, amarelo e verde referem-se aos estados analisados nas Fig.(64). As flechas em preto indicam o local de encontro das bandas de borda com aquelas do FM.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 64 – Funções de onda ao quadrado em a) e as componentes z em b), x em c) e y em d) da textura de spin para quando a magnetização do FM está ao longo da direção y , i.e., $\theta = \phi = \frac{\pi}{2}$; em d) é visto através do *inset* que $\langle \sigma_y \rangle$ torna-se negativo na interface, antes de passar à ser positivo na camada FM. Cada cor refere-se aos pontos da Fig.(63). Neste caso a componente y da textura de spin que torna-se diferente de zero, enquanto que a x é zero.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Com os resultados da Fig.(64), nota-se resultados semelhantes aos daqueles vistos para quando a magnetização estava em x , Fig.(62), com a diferença de que a componente y da textura de spin é que deixa de ser zero, enquanto que a x passa agora à ser zero. Além disso, constatamos a partir dos resultados presentes nas Figs.(63) e (62), que a correção advinda do fato de termos $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \rangle = 0$ não muda substancialmente os resultados do caso em que $\langle p_i^\pm \pm |\vec{m} \cdot \vec{\sigma}| p_i^\mp \rangle \neq 0$.

Não obstante, ainda nas Figs.(62a) e (64d), é notado através dos seus *insets* que antes de tomar valores positivos na camada FM, $\langle \sigma_x \rangle$ e $\langle \sigma_y \rangle$ adquire valores negativos. Em outras palavras, a orientação do spin não segue especificamente o sinal em que está a magnetização $\vec{m}$, pois se seguisse, tanto $\langle \sigma_x \rangle$ (quando $\vec{m} = m\hat{x}$) como para $\langle \sigma_y \rangle$ (quando $\vec{m} = m\hat{y}$) obteriam somente valores positivos, os quais aumentariam conforme o estado emergisse para a camada FM.

Com o intuito de entender melhor este comportamento da obtenção de valores negativos para, e.g., $\langle \sigma_x \rangle$, voltamos para o caso em que $\vec{m} = m\hat{x}$ e analisamos as texturas de spin tanto para o espaço k_x , Fig.(65).

Figura 65 – Textura de spin no espaço k para a região das bandas na Fig.(60a) indicada pelas flechas pretas; as flechas pontilhadas indicam a mudança da textura de spin. Aqui, temos k_x paralelo à componente $\langle\sigma_x\rangle$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.(65) mostramos que a textura de spin no espaço k_x para os estados de borda, calculado a partir da Eq.(4.78), muda conforme a banda muda de curvatura. Em outras palavras, a magnetização em $\hat{x}$ faz com que os estados de borda, que possuíam somente a projeção $\pm\hat{z}$, passam à apresentar agora também a componente $\langle\sigma_x\rangle$ na textura de spin. Essa mudança na orientação do spin, ocorre de maneira progressiva, i.e., o spin adquire somente valores positivos para $\langle\sigma_x\rangle$.

4.6 TI/FM: Tight Binding e Diferenças Finitas

Podemos agora comparar como a textura de spins no espaço real, muda quando temos a base completa do modelo contínuo (i.e., com as correções do termo de *light hole* discutida na seção (2.3.2)) e não a base mínima do modelo TB (já considerando a correção da última seção). Para isso, assumimos um modelo contínuo para o FM, Eq.(4.79), que possui um formato semelhante ao do modelo BHZ, Eq.(4.1).

$$H_{FM}(k_x, k_y) = H_0(k_x, k_y) + H_Z \quad (4.79)$$

com $H_0(k_x, k_y)$ dado por

$$H_0(k_x, k_y) = \left(-M_0 - D_0(k_x^2 + k_y^2) \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.80)$$

e H_Z sendo o termo do tipo zeeman, dado por

$$H_Z = \begin{pmatrix} \gamma m \cos(\theta) & 0 & \beta m \sin(\theta) e^{-i\phi} & 0 \\ 0 & m \cos(\theta) & 0 & 0 \\ \beta m \sin(\theta) e^{i\phi} & 0 & -\gamma m \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m \cos(\theta) \end{pmatrix}. \quad (4.81)$$

Para partir da Eq.(4.1) e obter a Eq.(4.80), consideramos que M_0 possui o mesmo sinal tanto para $|E\pm\rangle$ como para $|H\pm\rangle$, e assumimos $B_0 = 0$ e $A_0 = 0$. Realizamos estas mudanças tendo em vista a obtenção, como será visto a seguir, de bandas condutoras semelhantes aquelas obtidas na Fig.(55). Observe ainda que, para o termo zeeman H_Z , consideramos os parâmetros γ e β advindos da correção dos termos *light hole*, seção (2.2.5).

Podemos então resolver o Hamiltoniano $H_{FM}(k_x, k_y)$ para uma fita de largura L_{FM} , como feito para o modelo BHZ na seção (2.3). Para isso discretizamos $H_{FM}\Psi = E\Psi$ e obtemos para $H_{FM}(0, -i\partial_y)$, como nas Eqs.(4.17) e (4.18), que

$$\frac{D_0}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{E\pm} - 2\psi_i^{E\pm} + \psi_{i-1}^{E\pm}] = E\psi_i^{E+}, \quad (4.82)$$

$$\frac{D_0}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{H+} - 2\psi_i^{H+} + \psi_{i-1}^{H+}] = E\psi_i^{H+}, \quad (4.83)$$

já para $H_{FM}(k_x, 0)$, os termos diagonais em $|E\pm\rangle$ e $|H\pm\rangle$ são

$$\begin{cases} (-M_0 - D_0 k_x^2) \psi_i^{E\pm} \pm \gamma m \cos(\theta) \psi_i^{E\pm} & = E\psi_i^{E\pm} \\ (-M_0 - D_0 k_x^2) \psi_i^{H\pm} \pm m \cos(\theta) \psi_i^{H\pm} & = E\psi_i^{H\pm} \end{cases}, \quad (4.84)$$

enquanto que, os termos que acoplam $|E+\rangle$ com $|E-\rangle$ são dados por

$$\begin{cases} \beta m \sin(\theta) e^{-i\phi} \psi_i^{E+} & = E\psi_i^{E-} \\ \beta m \sin(\theta) e^{i\phi} \psi_i^{E-} & = E\psi_i^{E+} \end{cases}. \quad (4.85)$$

Deste modo, as Eqs.(4.82) - (4.85) podem ser reescritas em uma forma matricial, de maneira semelhante ao realizado na seção (2.3), para que possamos resolvê-las numericamente para algum conjunto de parâmetros. Neste caso, consideremos os valores da coluna FM da Tab.(6) e, e.g., que a magnetização está na direção x .

Deste modo, obtemos a estrutura de bandas para fita de FM presentes na Fig.(66a).

Tabela 6 – Parâmetros para a junção 2D - TI/FM (modelo discreto).

FM	TI
$L_{FM} = 11 \text{ \AA}$	$L_{TI} = 9 \text{ \AA}$
$h_y = 1 \text{ \AA}$	$h_y = 1 \text{ \AA}$
$M_0 = 0.5 \text{ eV}$	$M = -1.0 \text{ eV}$
$D_0 = -1.0 \text{ eV}$	$B = -1.0 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2$
$m = 0.1 \text{ eV}$	$D = 0.0 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2$
$\beta = 0.9568$	$A = 2.0 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$
$\gamma = 0.9136$	$C = 0 \text{ eV}$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 66 – Estrutura de bandas para fita de FM sem a tensão externa em a) e com a tensão externa em b). Ao considerarmos um potencial químico externo μ_0 , as bandas em a) descem em energia como em b).

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Fig.(66a), mostra que ao diagonalizarmos o modelo proposto para o FM, a estrutura de bandas são deslocadas para cima de $E = 0$. Para que seja possível obter as bandas condutoras iguais aquelas presentes na Fig.(55), vamos considerar um potencial químico μ_0 dado por uma tensão externa, de maneira que as Eqs.(4.82)-(4.83) podem ser reescritas como

$$\frac{D_0}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{E\pm} - 2\psi_i^{E\pm} + \psi_{i-1}^{E\pm}] + \mu_0 \psi_i^{E\pm} = E \psi_i^{E\pm} \quad , \quad (4.86)$$

$$\frac{D_0}{h_y^2} [\psi_{i+1}^{H\pm} - 2\psi_i^{H\pm} + \psi_{i-1}^{H\pm}] + \mu_0 \psi_i^{H\pm} = E \psi_i^{H\pm} \quad , \quad (4.87)$$

então, escolhendo $\mu_0 = 4 \text{ eV}$, encontramos as bandas na Fig.(66b) que são equivalentes as bandas da Fig.(55a). Para a magnetização nas outras direções, como y e z , os resultados são equivalentes ao visto na Fig.(55).

Com o modelo para o FM, podemos agora considerar a junção 2D - TI/FM. Para isso, discretizamos o Hamiltoniano H_{sis} da Eq.(4.2), com $H_0 = H_{FM}$ e $X=FM$, como feito na seção (4.1). Ao discretizar, encontramos para a camada TI as Eqs.(4.17)-(4.18), para o

blocos $+$ e $-$, derivadas a partir dos termos que contém a derivada ∂_y , e as Eqs.(4.25), que contém os termos que dependem de k_x . Para a camada FM temos as Eqs.(4.86) - (4.87) relacionadas à derivada ∂_y e as Eqs.(4.84)-(4.85), advindas da parte de k_x .

Para os acoplamentos na interface podemos reescrever as Eqs.(4.32)-(4.33), tendo em vista que $A_0 = B_0 = 0$, como segue abaixo.

Para $i = i_{TI}$ com $\delta = 1$:

$$H_{ii+1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} \frac{(D_0+B_+)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ \frac{(D_0+B_-)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ \frac{A}{4h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = E \text{ e } \eta = H \\ -\frac{A}{4h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = H \text{ e } \eta = E \end{cases} \quad (4.88)$$

Para $i = i_0$, com $\delta = -1$:

$$H_{ii-1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} \frac{(D_0+B_+)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ \frac{(D_0+B_-)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ -\frac{A}{4h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = E \text{ e } \eta = H \\ \frac{A}{4h_y} & , \sigma = \sigma' , \eta' = H \text{ e } \eta = E \end{cases} \quad (4.89)$$

Lembremos que para o modelo TB, como discutido na pág.114, foi assumido que o acoplamento ocorria somente entre orbitais de mesmo tipo (e.g., entre s e s) e tinha uma valor $t_B = 0.8$ eV. Por outro lado, as Eqs.(4.88) e (4.89), mostram que o modelo discretizado naturalmente possui termos de acoplamento tanto entre E e E , como com E e H .

Portanto, para comparar o modelo TB desenvolvido na seção anterior com o discretizado aqui desenvolvido, precisamos que os dois modelos possuam o mesmo tipo de acoplamento na interface. Assim, tendo em vista o mapeamento da Eq.(4.62) e a Eq.(4.75), reescrevemos as Eqs.(4.88) e (4.89) abaixo.

$$H_{ii+1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} t_B & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ t_B & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ 0 & , \sigma = \sigma' , \eta' = E \text{ e } \eta = H \\ 0 & , \sigma = \sigma' , \eta' = H \text{ e } \eta = E \end{cases} , \quad (4.90)$$

$$H_{ii-1}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} t_B & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ t_B & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ 0 & , \sigma = \sigma' , \eta' = E \text{ e } \eta = H \\ 0 & , \sigma = \sigma' , \eta' = H \text{ e } \eta = E \end{cases} . \quad (4.91)$$

Além disso, também devemos nos atentar com os termos *on-site* referentes as Eqs.(4.31) e (4.34), reescritas abaixo.

Para $i = i_{TI}$ com $\delta = 0$:

$$H_{ii,k_x}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} M_+ - B_+ k_x^2 - \frac{B_+}{h_y^2} - \frac{(D_0+B_+)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = E \\ M_- - B_- k_x^2 - \frac{B_-}{h_y^2} - \frac{(D_0+B_-)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' \text{ e } \eta = \eta' = H \\ A k_x & , \sigma = \sigma' = + , \eta = E \text{ e } \eta' = H \\ -A k_x & , \sigma = \sigma' = - , \eta = H \text{ e } \eta' = E \end{cases} \quad (4.92)$$

Para $i = i_0$ com $\delta = 0$:

$$H_{ii,k_x}^{\eta,\sigma,\eta',\sigma'} = \begin{cases} -M_0 - D_0 k_x^2 + \mu_0 \pm \gamma m \cos(\theta) - \frac{D_0}{h_y^2} - \frac{(D_0+B_+)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' = \pm , \eta = \eta' = E \\ -M_0 - D_0 k_x^2 + \mu_0 \pm m \cos(\theta) - \frac{D_0}{h_y^2} - \frac{(D_0+B_-)}{2h_y^2} & , \sigma = \sigma' = \pm , \eta = \eta' = H \\ \beta m \sin(\theta) e^{-i\phi} & , \sigma = -, \sigma' = + , \eta \neq \eta' \\ \beta m \sin(\theta) e^{i\phi} & , \sigma = + , \sigma' = - , \eta \neq \eta' \end{cases} \quad (4.93)$$

Os parâmetros em vermelho, são análogos aos termos *on-site* mostrados na Eq.(4.64). Estes termos, como também discutido na pág.114, não ocorrem no modelo TB desenvolvido para o TI/FM por se tratar de um modelo diferente do modelo discretizado. Portanto, para os dois modelos coincidirem, zeramos estes termos vermelhos.

Com os termos referentes de cada camada (TI e FM) e com os acoplamentos na interface, como discutido acima, podemos escrever a Eq.(4.51) em forma matricial e diagonalizá-la. Deste modo, comparamos a seguir os resultados do TB com o modelo discreto tendo em vista a correção advinda de considerarmos a base completa do modelo, i.e., os termos γ e β associados aos *light holes*.

4.6.1 Estados de borda e estrutura de bandas

Utilizando a Tab.(6), iremos agora comparar os resultados obtidos aqui a partir do modelo discretizado, com os resultados do modelo TB (corrigido). Primeiro, consideramos a magnetização na direção $\vec{m} = m\hat{z}$ obtendo a estrutura de bandas da Fig.(67).

Comparando os resultados obtidos a partir do modelo TB, Fig.(67a), com o discretizado, Fig.(67b), vemos que ambos apresentam resultados equivalentes. Em outras palavras, as bandas dos estados de borda emergem para o *bulk* do FM e a degenerescência é levantada no sistema. Devemos observar que estes resultados coincidem, pois como comentado na seção (3.3.1), para $k_x \approx 0$ temos $\sin(k_x) \sim k_x$ e $\cos(k_x) \sim k_x^2$. Assim, ao considerarmos a correção dos termos γ e β referentes aos *light holes* não vemos mudanças substanciais para a estrutura de bandas.

Figura 67 – Estrutura de bandas obtida a partir do TB em a) e a partir do discretizado em b), com a magnetização em z . Os estados referentes aos pontos preto, amarelo e verde são explorados na Fig.(68).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 68 – Perfis das funções de onda em a) e componente z da textura de spin em b), para os pontos em preto, amarelo e verde da Fig.(67). As curvas tracejadas e contínuas referem-se, respectivamente, aos resultados obtidos a partir do TB e do modelo discreto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.(68) vemos que tanto as funções de onda ao quadrado em a) como a componente z da textura de spin em b), também não apresentam mudanças significativas, quando consideramos a base completa do modelo contínuo. Quanto as componentes x e y da textura de spin, como já visto no modelo TB, são nulas.

Por fim, consideremos a magnetização em x . Assim como para a magnetização em z , ao compararmos os resultados do modelo TB com aqueles obtidos do modelo discretizado para quando $\vec{m} = m \hat{x}$, vemos que os resultados são equivalentes tanto para a estrutura de bandas, Fig.(69), como para as funções de onda e a componente z da textura de spin na Fig.(70).

A mesma equivalência entre os resultados do modelo TB com o modelo discretizado, é visto para as componentes x e y da textura de spin na Fig.(71).

Figura 69 – Estrutura de bandas obtida a partir do TB em a) e a partir do discretizado em b), com a magnetização em x . Os estados referentes aos pontos preto, amarelo e verde são explorados na Fig.(70).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 70 – Funções de onda ao quadrado em a) e componentes z da textura de spin em b), referentes aos pontos em preto, amarelo e verde da Fig.(69). As linhas contínuas e tracejadas referem-se, respectivamente, aos resultados obtidos do modelo TB e discretizado.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 71 – Componentes x em a) e y em b) da textura de spin para os pontos destacados em preto, amarelo e verde na Fig.(69). As linhas contínuas e tracejadas, referem-se também aqui, aos resultados obtidos do modelo TB e do discretizado.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Quando a magnetização está em y temos a mesma concordância entre os dois modelos, relatada acima. Deste modo, a correção advinda dos termos de *light hole* e presentes nas matrizes σ_η através dos parâmetros γ e β , Eq.(2.103) - (2.105), não resultam em grandes mudanças para os resultados obtidos no modelo TB.

Por fim, conseguimos reproduzir o modelo TB para a junção TI/FM através do método das diferenças finitas, realizando o devido mapeamento dos parâmetros na interface. Além disso, nos atentamos em mostrar que estes acoplamentos entre as duas camadas no modelo TB possuem valores arbitrários, enquanto que no modelo discretizado eles são obtidos naturalmente do modelo contínuo.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho investigamos duas junções bidimensionais, isolante topológico/ isolante normal (2D - TI/NI) e isolante topológico/ ferromagneto metálico (2D - TI/FM), afim de obtermos e analisarmos os estados metálicos que surgem na interface de cada uma destas junções. Para isso, derivamos dois modelos distintos: o discretizado, obtido a partir do uso das diferenças finitas aplicado do modelo BHZ, e o modelo *tight binding* obtido a partir de uma base mínima e com seus parâmetros mapeados ao modelo BHZ.

Com estes dois modelos, vimos que para o modelo *tight binding*, o acoplamento entre duas camadas adjacentes ocorre através de *hoppings* que possuem valores dados de maneira arbitrária afim de acoplar as duas camadas. Por outro lado, ao derivarmos o modelo discreto, notamos que o acoplamento que ocorre entre as camadas é dado por termos que são combinações de parâmetros já conhecidos, advindos do modelo contínuo no qual foi aplicado o método das diferenças finitas. Deste modo, apesar dos dois modelos serem intrinsecamente diferentes, mostramos em detalhes como realizar o mapeamento do modelo *tight binding* com o discreto, para que seja possível saber qual seria o valor de fato dos *hoppings* que acoplam as duas interfaces.

Em seguida, para junção 2D - TI/NI, obtemos a estrutura de bandas do sistema e analisamos tanto estados de *bulk* como aqueles presentes nas bordas do sistema. Para isso, calculamos o perfil das funções de onda e as texturas de spin ao longo da largura da junção. Inesperadamente, ao analisar essas grandezas para diferentes parâmetros, notamos que ao restaurarmos a simetria partícula-buraco no sistema surpreendentemente a degenerescência em spin para cada ponto da estrutura de bandas do sistema é mantida, ou seja, somente quando ambas simetrias estão quebradas.

Já na junção 2D - TI/FM, analisamos em detalhes como a magnetização (i.e., a quebra da simetria de reversão temporal) faz surgir ante-cruzamentos nas bandas dos estados de borda. Vimos também, como isso afeta os estados presentes na interface, comparando qualitativamente estes resultados com aqueles presentes para a junção 2D - TI/NI. Além disso, analisamos de maneira minuciosa a textura de spin para os estados presentes na interface 2D - TI/FM, tanto no espaço real (ao longo da largura da junção) bem como para o espaço k .

Por fim, como proposta de extensão deste projeto, seria calcular outras grandezas como, correntes elétricas e de spin. Além disso, outras junções poderiam ser realizadas, como com supercondutores ou isolantes ferromagnéticos.

REFERÊNCIAS

- 1 KLITZING, K. v.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 45, n. 6, p. 494–497, Aug. 1980.
- 2 QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Topological insulators and superconductors. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 83, n. 4, p. 1057–1110, Oct. 2011.
- 3 HASAN, M. Z.; KANE, C. L. Colloquium: Topological insulators. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 82, n. 4, p. 3045–3067, Nov. 2010.
- 4 QI, X.-L. *et al.* Time-reversal-invariant topological superconductors and superfluids in two and three dimensions. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 102, n. 4, p. 187001, May 2009.
- 5 DANIEL *et al.* Experimental review of graphene. **ISRN Condensed Matter Physics**, v. 2012, n. 501686, p. 56, Apr. 2011.
- 6 PRANGE, R. E. Quantized hall resistance and the measurement of the fine-structure constant. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 23, n. 9, p. 4802–4805, May 1981.
- 7 LAUGHLIN, R. B. Quantized hall conductivity in two dimensions. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 23, n. 10, p. 5632–5633, May 1981.
- 8 HALPERIN, B. I. Quantized hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 25, n. 4, p. 2185–2190, Feb. 1982.
- 9 THOULESS, D. J. *et al.* Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 49, n. 6, p. 405–408, Aug. 1982.
- 10 KOHMOTO, M. Topological invariant and the quantization of the hall conductance. **Annals of Physics**, v. 160, n. 2, p. 343–354, 1985. ISSN 0003-4916.
- 11 MURAKAMI, S.; NAGAOSA, N.; ZHANG, S.-C. Dissipationless quantum spin current at room temperature. **Science**, v. 301, n. 5638, p. 1348–1351, 2003.
- 12 ZHANG, S.-C.; HU, J. A four-dimensional generalization of the quantum hall effect. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 294, n. 5543, p. 823–828, 2001.
- 13 SINOVA, J. *et al.* Universal intrinsic spin hall effect. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 92, n. 4, p. 126603, Mar. 2004.
- 14 KANE, C. L.; MELE, E. J. Quantum spin hall effect in graphene. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 95, n. 4, p. 226801, Nov. 2005.
- 15 KANE, C. L.; MELE, E. J. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 95, n. 4, p. 146802, Sept. 2005.

- 16 FU, L.; KANE, C. L. Topological insulators with inversion symmetry. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 76, n. 17, p. 045302, July 2007.
- 17 BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 314, n. 5806, p. 1757–1761, 2006. ISSN 0036-8075.
- 18 KÖNIG, M. *et al.* Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 318, n. 5851, p. 766–770, 2007.
- 19 CHIU, C.-K. *et al.* Classification of topological quantum matter with symmetries. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 88, n. 63, p. 035005, Aug. 2016.
- 20 ZHANG, D. *et al.* Interface-induced topological insulator transition in GaAs/Ge/GaAs quantum wells. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 111, n. 5, p. 156402, Oct. 2013.
- 21 ERLINGSSON, S. I.; EGUES, J. C. All-electron topological insulator in inas double wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 91, n. 8, p. 035312, Jan. 2015.
- 22 BERNEVIG, B. A. **Topological insulators and topological superconductors**. United Kingdom: Princeton University Press, 2013.
- 23 HE, Q. L. *et al.* Chiral majorana fermion modes in a quantum anomalous hall insulator–superconductor structure. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 357, n. 6348, p. 294–299, 2017.
- 24 WEITHOFER, L.; RECHER, P. Chiral majorana edge states in HgTe quantum wells. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 15, n. 8, p. 085008, Aug. 2013.
- 25 MANCHON, A. *et al.* Current-induced spin-orbit torques in ferromagnetic and antiferromagnetic systems. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 91, n. 80, p. 035004, Sept. 2019.
- 26 SINOVA, J. *et al.* Spin hall effects. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 87, n. 47, p. 1213–1260, Oct. 2015.
- 27 MICHETTI, P. *et al.* Helical edge states in multiple topological mass domains. **Semiconductor Science and Technology**, IOP Publishing, v. 27, n. 12, p. 124007, 2012.
- 28 ZEGARRA, A.; EGUES, J. C.; CHEN, W. Persistent currents and spin torque caused by percolated quantum spin hall state. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 101, n. 10, p. 224438, June 2020.
- 29 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *et al.* **Solid state physics**. New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- 30 ROTHE, D. G. *et al.* Fingerprint of different spin–orbit terms for spin transport in HgTe quantum wells. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 12, n. 6, p. 065012, June 2010.

- 31 CANDIDO, D. R. **Blurring the boundaries between topological and non-topological physical phenomena in dots**. 2018. 33 f. Tese (Doutorado em Física Básica) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2018. Disponível em: <https://teses.usp.br/teses/disponiveis/76/76131/tde-24092018-150734/pt-br.php>. Acesso em: 21 jun. 2021.
- 32 DATTA, S. **Quantum phenomena**. New York: Addison Wesley Publishing Company, 1989. (Modular Series on Solid State Devices v.8).
- 33 CANDIDO, D. R. **Relaxação de spin via D'yakonov-Perel' em poços quânticos com acoplamento spin-órbita intersub-banda**. 2013. Dissertação (Mestrado em Física Básica) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013. Disponível em: <https://teses.usp.br/teses/disponiveis/76/76131/tde-25092013-161711/pt-br.php>. Acesso em: 21 jun. 2021.
- 34 WINKLER, R. **Spin-Orbit coupling in two-dimensional electron and hole systems**. Berlin: Springer-Verlag, 2003.
- 35 WILLATZEN, M.; VOON, L. C. L. Y. **The kp method: electronic properties of semiconductors**. Berlin: Springer-Verlag, 2009.
- 36 CALSAVERINI, R. S. *et al.* Intersubband-induced spin-orbit interaction in quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 78, n. 16, p. 155313, Oct. 2008.
- 37 KAXIRAS, E. **Atomic and electronic structure of solids**. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
- 38 ENDERLEIN, R.; HORING, N. J. **Fundamentals of semiconductor physics and devices**. Singapore: World Scientific, 1997.
- 39 CHADI, D. J. *et al.* Reflectivities and electronic band structures of cdte and hgte. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 5, n. 8, p. 3058–3064, Apr. 1972.
- 40 DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S.; SAITO, R. **Physical properties of carbon nanotubes**. Cambridge: Imperial College Press, 1998.
- 41 LöWDIN, P. A note on the quantum-mechanical perturbation theory. **The Journal of Chemical Physics**, v. 19, n. 11, p. 1396–1401, 1951.
- 42 KANE, E. Energy band structure in p-type germanium and silicon. **Journal of Physics and Chemistry of Solids**, v. 1, n. 1, p. 82–99, 1956. ISSN 0022-3697.
- 43 NOVIK, E. G. *et al.* Band structure of semimagnetic $\text{Hg}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Te}$ quantum wells. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 72, n. 12, p. 035321, July 2005.
- 44 BRÜNE, C. **HgTe based topological insulators**. 2014. 13 f. Tese (Naturwissenschaftlichen Doktorgrades) — Würzburg: Universität Würzburg, 2014. Disponível em: https://opus.bibliothek.uni-wuerzburg.de/opus4-wuerzburg/frontdoor/deliver/index/docId/10512/file/Dissertation_Bruene_Christoph.pdf. Acesso em: 06 ago. 2021.
- 45 BELLAICHE, L.; VANDERBILT, D. Virtual crystal approximation revisited: application to dielectric and piezoelectric properties of perovskites. **Physical Review B**, American Physical Society (APS), v. 61, n. 12, p. 7877–7882, Mar. 2000. ISSN 1095-3795.

- 46 BASTARD, G. **Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures**. Les Ulis: les éditions de physique, 1988.
- 47 SAKURAI, J.; NAPOLITANO, J. **Modern quantum mechanics**: 2nd.ed. San Francisco: Pearson, 2014.
- 48 CHIU, C.-K. *et al.* Classification of topological quantum matter with symmetries. **Reviews of Modern Physics**, American Physical Society, v. 88, n. 63, p. 035005, Aug. 2016.
- 49 DOMINGUEZ, F.; SCHARF, B.; HANKIEWICZ, E. M. **Crystalline weyl semimetal phase in quantum spin hall systems under magnetic fields**. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1905.10552>. Acesso em: 23.09.21.
- 50 ASMAR, M. M.; GUPTA, G.; TSE, W.-K. **Particle-hole asymmetry and quantum confinement effects on the magneto-optical response of topological insulator thin-films**. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2105.12275>. Acesso em: 23.09.21.
- 51 ANDO, Y. Topological insulator materials. **Journal of the Physical Society of Japan**, The Physical Society of Japan, v. 82, n. 10, p. 102001, 2013.
- 52 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum mechanics**. Weinheim: Wiley, 1986. v. 2. 626 p.
- 53 ZHOU, B. *et al.* Finite size effects on helical edge states in a quantum spin-hall system. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 101, n. 4, p. 246807, Dec. 2008.
- 54 CHUANG, S. L.; CHANG, C. S. A band-structure model of strained quantum-well wurtzite semiconductors. **Semiconductor Science and Technology**, IOP Publishing, v. 12, n. 3, p. 252–263, Mar. 1997.
- 55 DATTA, S. **Electronic transport in mesoscopic systems**. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- 56 ALTLAND, A.; SIMONS, B. D. **Condensed matter field theory**. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- 57 SÓLYOM, J. **Fundamentals of the physics of solids: electronic properties**. Berlin: Springer-Verlag, 2008. v. 2.
- 58 TAYLOR, P. A. M. *et al.* **A quantum approach to condensed matter physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- 59 FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. **Quantum theory of many-particle systems**. New York: Dover Publications, 2012.
- 60 AUERBACH, A. **Interacting electrons and quantum magnetism**. Berlin: Springer-Verlag, 2012.
- 61 COLEMAN, P. **Introduction to many-body physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2015.

- 62 SLATER, J. C.; KOSTER, G. F. Simplified lcao method for the periodic potential problem. **Physical Review**, American Physical Society, v. 94, p. 1498–1524, June 1954.
- 63 ZHANG, D. *et al.* Interface-induced topological insulator transition in GaAs/Ge/GaAs quantum wells. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 111, n. 5, p. 156402, Oct. 2013.
- 64 HAUG, H.; JAUHO, A.-P. *et al.* **Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors**. Berlin: Springer-Verlag, 2008. v. 2.