



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA

EMÍLIA DE SOUSA UCHÔA

**ESTADOS ELETRÔNICOS DE NANOFITAS DE REDES DE LIEB, TRANSIÇÃO E
KAGOME**

FORTALEZA

2023

EMÍLIA DE SOUSA UCHÔA

ESTADOS ELETRÔNICOS DE NANOFITAS DE REDES DE LIEB, TRANSIÇÃO E
KAGOME

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da matéria condensada.

Orientador: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

Coorientadora: Prof. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena.

FORTALEZA

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- U19e Uchôa, Emília de Sousa.
Estados eletrônicos de nanofitas de redes de Lieb, transição e Kagome / Emília de Sousa Uchôa. – 2023.
98 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2023.
Orientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.
Coorientação: Profa. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena.
1. Lieb lattice. 2. Kagome lattice. 3. Nanoribbons. 4. Electronic properties. 5. Interconvertibility. I.
Título.

CDD 530

EMÍLIA DE SOUSA UCHÔA

ESTADOS ELETRÔNICOS DE NANOFITAS DE REDES DE LIEB, TRANSIÇÃO E
KAGOME

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da matéria condensada.

Aprovada em: 22/02/2023.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dra. Silvia Helena Roberto de
Sena (Coorientadora)
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira

Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior
(UFC)

Prof. Dr. Francisco Ronan Viana Araújo
(IFPI)

À minha mãe.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha mãe, Liduina de Sousa Uchôa, que nunca me deixou faltar o essencial e sempre fez de tudo para que eu pudesse me dedicar aos estudos, sem ela nada disso seria possível. A ela dedico todo este trabalho, agradeço por estar comigo sempre, me ajudando e encontrando soluções quando eu julgava não mais encontrá-las.

Agradeço a toda minha família, em especial, Maria Vitória, Lavínia, Alice, Ísis, Valkíria, Davi e Dom Diego, que são as luzes da minha vida. Assim como minhas primas, D'Ávila, Marina, Juliana e Nádia, que acompanharam minha caminhada de perto e sempre torceram por mim.

Em especial, agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa, que sempre esteve disposto a me ajudar a entender as belezas da Física, me dando todo o suporte e atenção. Obrigada por todos os ensinamentos, paciência, comprometimento e por confiar em mim. Agradeço também a Prof. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena, minha coorientadora. Obrigada por me incentivar a seguir carreira acadêmica, me inspirar e ajudar constantemente, a ela toda minha admiração e respeito.

Gratidão aos professores, Dr. João Milton Pereira Júnior e Dr. Francisco Ronan Viana Araújo, por aceitarem fazer parte da banca avaliadora, sou grata pela contribuição de ambos no desenvolvimento e aperfeiçoamento deste trabalho. Em especial, agradeço ao Prof. Ms. Wellisson Pires Lima por me ajudar sempre que precisei e pela paciência em me ensinar de forma simples e didática.

Sou grata ao Grupo da Teoria da Matéria Condensada (GTMC) por toda a experiência que o grupo me proporcionou.

Gratidão aos meus amigos: Alana Carolina, Lucas Santos, Edine Silva, Michelangelo Frost, Leandro Lessa, José Fernandes, Riany Duarte, Temerson Fernando e Yago Rikelme, por acreditarem em meu potencial e nunca me deixarem desistir no meio do caminho.

Por fim, agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro.

"I have looked into most philosophical systems
and I have seen that none will work without
God". (James Clerk Maxwell.)

RESUMO

Desde o isolamento do grafeno em 2004, a comunidade científica vem buscando novos materiais bidimensionais (2D) visando diferentes aplicações tecnológicas. Sabe-se que os componentes químicos envolvidos, o tipo de hibridização e a geometria formada são fatores-chave para a estrutura de banda eletrônica resultante. Isso levou a uma investigação teórica sobre possíveis cristais projetados com geometrias desejadas e propriedades físicas interessantes. Exemplos da engenharia de materiais 2D são as redes de Lieb e Kagome, cujas estruturas de banda são formadas pela coexistência de uma banda de energia cônica de Dirac e uma banda plana (não dispersiva). Tais configurações têm motivado pesquisas sobre reticulados eletrônicos, guias de onda em sistemas fotônicos, e até mesmo estruturas orgânicas com a periodicidade dessas redes. Motivado pelo crescente interesse nessas redes e inspirados por estudos que exploram os efeitos de tamanho finito no espectro eletrônico do grafeno, investigamos sistematicamente as propriedades eletrônicas de nanofitas de monocamadas de Lieb, transição e Kagome, por meio do modelo *tight-binding*, com um Hamiltoniano geral que descreve ambas as redes. São discutidos resultados para o espectro de energia, densidade de estados e funções de onda para nanofitas com três tipos de terminações: retas, barbadas e assimétricas. Efeitos da quebra de simetria de subrede induzidos de nove diferentes formas são investigados para as estruturas de folha infinita dessas redes e para as diferentes configurações das nanofitas. Também exploramos a degenerescência dos estados quase-planos em relação à largura da nanofita e devido a inclusão do efeito de segundos-vizinhos no modelo *tight-binding*.

Palavras-chave: Rede de Lieb. Rede de Kagome. Nanofitas. Propriedades eletrônicas. Interconvertibilidade.

ABSTRACT

Since the isolation of graphene in 2004, the scientific community has been looking for new two-dimensional (2D) materials aiming at different technological applications. It is known that the chemical components involved, the type of hybridization and the geometry formed are key factors for the resulting electronic band structure. This led to a theoretical investigation into possible designed crystals with desired geometries and interesting physical properties. Examples of 2D materials engineering are the Lieb and Kagome lattices, in which their band structures are formed by the coexistence of a conical Dirac energy band and a flat (non-dispersive) band. Such configurations have motivated research on electronic lattices, waveguides-based photonic systems, and even organic structures with these lattices' periodicity. Motivated by the growing interest in these lattices and inspired by studies that explore the finite size effects on the electronic spectrum of graphene, we systematically investigate the electronic properties of nanoribbons of monolayer Lieb, transition, and Kagome, using the tight-binding model with a general Hamiltonian that describes both lattices. Results for the energy spectrum, the density of states, and wave functions are discussed for nanoribbons with three types of edges: straight, bearded and asymmetrical. Effects of sublattice symmetry breaking induced in nine different ways are investigated for the infinite-sheet structures of these lattices and for the different configurations of the nanoribbons. We also explore the degeneracy of the quasi-flat states with respect to the nanoribbon width and due to the inclusion of the second-neighbor effect in the tight-binding model.

Keywords: Lieb lattice; Kagome lattice; Nanoribbons; Electronic properties; Interconvertibility.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – (À esquerda) Estrutura da rede, (ao meio) espectro de energia e (à direita) densidade de estados das redes do grafeno, $\alpha - T_3$, Lieb e Kagome, respectivamente. Figura adaptada das Refs.: (a)-(c) (NETO *et al.*, 2009), (d)-(f) (BISWAS; GHOSH, 2016) (g)-(i)(JIANG *et al.*, 2019b) e (j)-(l) (ZONG *et al.*, 2016). 20
- Figura 2 – Ilustração da estrutura de rede do grafeno e das células unitárias para se definir nanofitas com diferentes terminações. Os vetores de rede primitivos são denotados por **a** e **b**. As bordas superiores e inferiores (à esquerda e à direita) possuem terminações do tipo *zigzag* (*armchair*), com retângulo vertical (horizontal) representando a respectiva célula unitária na construção da nanofita com tal borda. O comprimento das nanofitas L em termos do número de átomos N na célula unitária para o caso *zigzag* (*armchair*) é $L = Na_0/4$ ($L = N\sqrt{3}a_0/4$). Figura adaptada da Ref. (BREY; FERTIG, 2006). 24
- Figura 3 – Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e densidade de estados $D(E)$ de nanofitas *armchair* com diferentes larguras tomando (a) $N = 4$, (b) $N = 5$ e (c) $N = 30$ número de linhas de átomos de carbono. Figura adaptada da Ref. (WAKABAYASHI *et al.*, 2009). 24
- Figura 4 – Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e densidade de estados $D(E)$ de nanofitas *zigzag* com diferentes larguras tomando (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, e (c) $N = 30$ número de linhas de átomos de carbono. Figura adaptada da Ref. (WAKABAYASHI *et al.*, 2009) 25
- Figura 5 – Ilustração da distribuição eletrônica por sítio do estado de borda para (a) $k = \pi$ e (b) $k = 7\pi/9$. Quanto maior a intensidade do módulo quadrado da função de onda maior é o raio do círculo no sítio atômico em cinza. (c) Módulo quadrado da função de onda pseudospinoral para cada subrede A ($|\phi_A|^2$ - símbolos vermelhos) e B ($|\phi_B|^2$ - símbolos pretos) tomando $k = -2\pi/3a_0$ (painel de cima) e $k = -2\pi/3a_0(1 - 0.02)$ (painel de baixo) com relação ao centro da zona de Brillouin, obtida via modelo contínuo. Figuras adaptadas da (a, b) Ref. (WAKABAYASHI *et al.*, 2009) e (c) Ref. (BREY; FERTIG, 2006). 25

Figura 6	– As funções de onda de 6-ZGNR e 19-ZGNR. Símbolos vermelhos(azuis) denotam as funções de onda na sub-rede B(A). O modelo analítico (quadrados) é comparado com os resultados numéricos (círculos). Figura adaptada da Ref. (MORADINASAB <i>et al.</i> , 2012)	27
Figura 7	– Módulo quadrado da função das funções de onda para estados com energias próximas a zero para nanofitas com bordas <i>armchair</i> assumindo diferentes larguras: (a) $n = 50$, (b) $n = 51$, e (c) $n = 52$. Figura adaptada da Ref. (ZHENG <i>et al.</i> , 2007).	28
Figura 8	– Representação de nanofita da rede $\alpha - T_3$ com bordas do tipo (a) <i>armchair</i> e (b) <i>zigzag</i> . A célula unitária é definida pela linha tracejada em cor laranja. A largura da nanofita é definida com a escolha do número de linhas atômicas N . Figura adaptada da Ref. (CHEN <i>et al.</i> , 2019).	28
Figura 9	– Estruturas de banda das nanofitas da rede $\alpha - T_3$ com bordas do tipo (a) <i>armchair</i> e (b) <i>zigzag</i> com terminações $B - B$. Dispersões para diferentes valores do parâmetro α são apresentados: (coluna à esquerda) $\alpha = 0$, (coluna ao meio) $\alpha = 0,5$, e (coluna à direita) $\alpha = 1$. Figura adaptada da Ref. (CHEN <i>et al.</i> , 2019).	29
Figura 10	– Nanofitas de Lieb com diferentes tipos de bordas: (a) reta, (b) barbada, e (c) assimétrica. Os símbolos vermelhos representam os sítios do tipo A, os verdes do tipo B e os azuis do tipo C. Figura adaptada da Ref. (CHEN; ZHOU, 2016).	31
Figura 11	– Espectro de energia das nanofitas de Lieb para bordas do tipo (a) reta com $N = 15$, (b) barbada com $N = 15$, e (c) assimétrica com $N = 10$. Figura adaptada da Ref. (CHEN; ZHOU, 2016).	31
Figura 12	– Nanofitas de Kagome. (a) Um par de arestas em dente de serra ao longo da direção x . (b) Um par de arestas <i>zigzag</i> na direção y . Figura adaptada da Ref. (LIU, 2020).	32
Figura 13	– Relações de dispersão das nanofitas de Kagome com bordas do tipo (a) dente de serra e (b) <i>zigzag</i> . Figura adaptada da Ref. (LIU, 2020).	33
Figura 14	– Representação da transição (a) da estrutura cristalina com $\theta = 105^\circ$, (b) espectro de energia e estado da superfície de um sistema de 15 unidades, da rede de Lieb para Kagome. Figura adaptada da Ref. (JIANG <i>et al.</i> , 2019b). .	34

- Figura 15 – Representação (a) da rede genérica 2D infinita de apenas um parâmetro de controle θ usado para descrever as redes de Lieb, transição e Kagome. A área destacada em amarelo representa a célula unitária. As subredes não-equivalentes A, B e C são representadas por círculos em cores verdes, vermelhas, e azuis, respectivamente. Os vetores primitivos da rede real são também apresentados \vec{a}_1 e \vec{a}_2 . (b, c) Primeira zona de Brillouin da rede recíproca de Lieb-Kagome, evidenciando no painel (b) o caminho a ser considerado na representação gráfica da relação de dispersão, e no painel (c) os pontos de alta simetria [Γ em azul, X em laranja, K em verde e M em amarelo] com as respectivas distâncias e ângulos utilizados na sua derivação. 37
- Figura 16 – Representação da rede genérica de Lieb-Kagome esquematizada com o valor fixo do parâmetro morfológico θ para o caso de $\theta = 7\pi/12$, enfatizando a distância entre os primeiros vizinhos a_0 , as distâncias entre os sítios $B - A$ ($\overline{BA} = |\vec{a}_2|/2$), $B - C$ ($\overline{BC} = |\vec{a}_1|/2$), $A - C^-$ ($\overline{AC^-} = |\vec{a}_1 - \vec{a}_2|/2$) e $A - C^+$ ($\overline{AC^+} = |\vec{a}_1 + \vec{a}_2|/2$), e os respectivos *hoppings*: t_{BA} , t_{BC} , t_{AC}^- e t_{AC}^+ 43
- Figura 17 – Espectro eletrônico para rede de Lieb ($\theta = \pi/2$) infinita obtida por meio do cálculo *tight-binding* representado de forma (a) tridimensional e (b) bidimensional ao longo dos pontos de alta simetria. 48
- Figura 18 – Espectro eletrônico para rede de transição infinita obtida por meio do cálculo *tight-binding* representado de forma (a) tridimensional e (b) bidimensional ao longo dos pontos de alta simetria. Assumiu-se o valor de $\theta = 105^\circ$ 49
- Figura 19 – Espectro eletrônico para rede de Kagome ($\theta = 2\pi/3$) infinita obtida por meio do cálculo *tight-binding* representado de forma (a) tridimensional e (b) bidimensional ao longo dos pontos de alta simetria. 49
- Figura 20 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de Lieb ($\theta = 90^\circ$). (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b). 50
- Figura 21 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 95^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b). 51

- Figura 22 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 100^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b). 51
- Figura 23 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 105^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b). 51
- Figura 24 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 110^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b). 52
- Figura 25 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 115^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b). 52
- Figura 26 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de Kagome ($\theta = 120^\circ$). (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b). 52
- Figura 27 – Espectro de energia das redes infinita 2D de Lieb (à cima), transição (ao meio), e Kagome (à baixo) na presença de diferentes combinações de energias *on-site*. A primeira, a segunda, e a terceira linha de painéis correspondem às 9 configurações, com termos de energia *on-site* dados pelas Eqs. (2.55), (2.56), e (2.57), respectivamente. 56

Figura 28 – (a) Representação esquemática da rede genérica controlada pelo parâmetro θ , correspondente à rede de Lieb para $\theta = \pi/2$, rede de transição para $\pi/2 < \theta < 2\pi/3$ e rede de Kagome para $\theta = 2\pi/3$. \vec{a}_1 e \vec{a}_2 são os vetores primitivos com célula unitária denotada pela linha tracejada amarela contendo três sítios não equivalentes A (verde), B (vermelho) e C (azul). A distância entre os sítios vizinhos mais próximos é a_0 e os parâmetros de *hopping* não-nulos são representados por $t_{BA}, t_{BC}, t_{AC}^-, t_{AC}^+$. Para redes de Lieb e Kagome, o *hopping* do vizinho mais próximo é $t_{BA} = t_{BC} = t$ e $t_{AC}^- = t_{AC}^+ = t'$, respectivamente. Esboços de nanofitas genéricas com bordas (b) retas, (c) barbadas e (d) assimétricas, enfatizando suas células unitárias (linhas tracejadas cinzas), terminação das bordas e a contagem de linhas em cada caso. 59

Figura 29 – Estruturas de bandas e densidade de estados (DOS) para a rede de Lieb, com bordas (fila superior) reta, (fila do meio) barbada, e (linha inferior) assimétricas e números diferentes de linhas atômicas da nanofita. As curvas pretas, vermelhas e azuis nos painéis da DOS correspondem aos espectros de energia na primeira, segunda e terceira colunas. N corresponde ao número total de linhas que definem o tamanho da fita, sempre ímpar (par) no caso de bordas retas ou barbadas (assimétricas). NA, NB e NC são o número de linhas da nanofita com sites A, B e C, respectivamente. 66

- Figura 30 – Distribuição da função de onda de nanofitas de Lieb com (a) reta [$N = 31$], (b) barbuda [$N = 31$] e (c) arestas assimétricas [$N = 30$], para: (i) quase-bandas planas [destacadas por asteriscos vermelhos] enumeradas de baixo para cima em $k = 3\pi/2$, (ii) a banda tipo Dirac característica de arestas retas em $k = 3.261$ [destacada por um asterisco preto em a inserção de (a)], (iii) estado de massa em $k = \pi + 0.1$ [destacado por um asterisco preto na inserção de (b)] e (iv) o estado de borda em $k = \pi + 0.1$ [destacado pelo asterisco preto na inserção de (c)]. Para cada tipo de aresta, os painéis superiores mostram (i) a função de onda total [linhas sólidas pretas com círculos] e (ii) a função de onda na subrede A [linhas verdes pontilhadas com asteriscos], (iii) B [linhas tracejadas vermelhas com triângulos apontando para cima], e (iv) C [linhas pontilhadas azuis com triângulos apontando para baixo], tudo em função da largura da nanofita $W = (N - 1)a_0$. Nos painéis inferiores, o tamanho dos pontos e a escala de cores variando do azul ao vermelho representam a norma da função de onda variando de zero ao seu valor máximo ao longo da nanofita, respectivamente. p é o número de picos característicos do comportamento nodal das funções de onda das bandas quase planas. 68
- Figura 31 – O mesmo da Fig. 29, mas agora para a rede de transição. 70
- Figura 32 – O mesmo que a Fig. 30 para a rede de transição com $\theta = 105^\circ$. As bandas quase planas também foram enumeradas de baixo para cima em $k = 3\pi/2$, mas agora a banda tipo Dirac característica de arestas retas foi calculada para $k = 3.418$ [ver inserção de (a)] , e (iii) os estados de borda em $k = \pi + 0.1$ [ver inserções de (b) e (c)]. 72
- Figura 33 – O mesmo da Fig. 29, mas agora para a rede de Kagome. 74

Figura 34 – Distribuição da função de onda de nanofitas Kagome com $\theta = 120^\circ$. (a) Estados Dirac-like [1] e quase-flats [2,3,4] foram calculados para $k = 4.228$ e $k = 3\pi/2$, respectivamente. (b) Os estados de bordas [1] e [4-5] adotaram $k = \pi$, enquanto [2,3,4] assumiram $k = 4.312$, $k = 4.312$ e $k = \pi + \pi/5$, respectivamente. (c) O estado de borda [1] adotou $k = \pi$, e sua evolução [2-5] foi calculada para $k = 7\pi/6$, $k = 4\pi/3$, $k = 4,455$ e $k = 3\pi/2$. Os estados bulk [6,7] de anti-cruzamento com estados de borda são mostrados para $k = \pi + \pi/5$ e $k = \pi + \pi/3$, respectivamente. O outro estado de borda [8,9] foi mostrado para $k = \pi$ e $k = 3\pi/2$, respectivamente. As bandas quase planas [10-15] também admitiram $k = 3\pi/2$	75
Figura 35 – Comparação do espectro de energia obtido na aproximação <i>tight-binding</i> com NN-sites (curvas vermelhas tracejadas) e NNN-sites (curvas pretas sólidas) com mudança do parâmetro θ , para os casos de nanofitas de: Lieb ($\theta = 90^\circ$ - primeira coluna), transição ($\theta = 100^\circ$ - segunda coluna e $\theta = 110^\circ$ - terceira coluna) e Kagome ($\theta = 120^\circ$ - quarta coluna) para liso ($N = 13$ - primeira linha), barbudo ($N = 13$ - segunda linha) e assimétrico ($N = 12$ - terceiro linha) arestas. A evolução dos estados de borda presentes no modelo TB de NN-sites (curvas tracejadas verdes) e NNN-sites (curvas sólidas azuis) são mostradas. Os painéis inferiores correspondem às distribuições da função de onda pelo modelo de ligação rígida com NNN-sites, para os estados rotulados nos painéis para (f-1) estados de Lieb [4], estados de transição com $\theta = 100^\circ$ [1,5] e $\theta = 110^\circ$ [2,6], e (d,h,l) estados de Kagome [3,7].	79
Figura 36 – Funções de onda referente a banda plana para os espectros de Lieb ((a)-(c)) e Kagome ((d)-(f)) sem a inclusão de segundos vizinhos para os três tipos de bordas estudadas.	81
Figura 37 – Espectros de energia de nanofitas de Lieb com bordas retas(a-c), barbadas(d-f) e assimétricas(g-i), para $n = 4$ [Fig. 37(a,d,g)], $n = 6$ [Fig. 37(b,e,h)] e $n = 8$ [Fig. 37(c,f,i)]. Nota-se os efeitos dos diferentes valores de n na banda plana para a rede de Lieb.	82
Figura 38 – O mesmo da Fig. 37, mas agora para a rede de transição ($\theta = 105^\circ$).	82
Figura 39 – O mesmo da Fig. 37, mas agora para a rede de Kagome.	83

Figura 40 – Energias de gap entre as bandas inferior e média (Δ_{12}), e entre as bandas média e superior (Δ_{23}), em função da largura da nanofita, $W = (N - 1)a_0$, para: (a) Lieb, (b) transição e (c) nanofitas Kagome. Os resultados em ponto de dados (símbolo) e ajuste (curva) são apresentados para bordas assimétricas (A-sobrescrito) e barbeadas (B-sobrescrito). O gráfico inserido mostra versões grandes do gap destacadas em cinza.	84
Figura 41 – Nove diferentes tipos de configurações usadas na quebra de simetria de subrede para as bordas retas(linha de cima), barbeadas(linha do meio) e assimétrico(linha de baixo) para a nanofita de Lieb.	86
Figura 42 – O mesmo da Fig. 41, mas agora para nanofita de transição.	87
Figura 43 – O mesmo da Fig. 41, mas agora para nanofita de Kagome.	89
Figura 44 – (a) Superfície de Fermi na energia ϵ_f . (b) Densidade de estados de uma única partícula em função da energia para um gás de elétrons livres em três dimensões.	98
Figura 45 – Diagrama de um fio retangular quase unidimensional, juntamente com as relações de dispersão e a densidade de estados das sub-bandas unidimensionais.	99

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Materiais 2D: Do grafeno aos materiais com banda plana	18
1.2	Nanofitas de materiais 2D	22
1.2.1	<i>Nanofitas de grafeno</i>	23
1.2.2	<i>Nanofitas $\alpha - T_3$</i>	28
1.2.3	<i>Nanofitas de Lieb</i>	30
1.2.4	<i>Nanofitas de Kagome</i>	32
1.2.5	<i>Nanofitas da rede de transição</i>	33
1.3	Escopo do trabalho	35
2	MODELO <i>TIGHT-BINDING</i> PARA REDES DE LIEB, TRANSIÇÃO E KAGOME	36
2.1	Rede infinita	36
2.2	Modelo <i>tight-binding</i>	38
2.3	Hamiltoniano genérico	42
2.4	Espectros de energia para rede infinita	47
2.5	Interconvertibilidade das redes	50
2.6	Efeito da quebra de simetria de subrede	53
3	MODELO <i>TIGHT-BINDING</i> PARA NANOFITAS DE LIEB, TRANSIÇÃO E KAGOME	58
3.1	Nanofitas genéricas	58
3.2	Hamiltoniano <i>tight-binding</i> para nanofitas genéricas	60
3.3	Espectro de energia para nanofitas das redes genéricas	65
3.4	Quebra da degenerescência da banda plana	77
3.5	Leis de escala de energias de gaps de banda	83
3.6	Efeito da quebra de simetria de subrede com diferentes tipos de bordas	85
3.6.1	<i>Nanofita de Lieb</i>	85
3.6.2	<i>Nanofita de transição</i>	86
3.6.3	<i>Nanofita de Kagome</i>	87
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	90
	REFERÊNCIAS	93

APÊNDICE A –DENSIDADE DE ESTADOS	98
---	-----------

1 INTRODUÇÃO

1.1 Materiais 2D: Do grafeno aos materiais com banda plana

Os materiais bidimensionais (2D) vêm sendo alvo de pesquisas para seu investimento na indústria devido as suas propriedades físicas únicas que os diferem dos semicondutores padrões utilizados na indústria atual. Estes materiais são, em geral, formados por uma única camada de átomos, tendo assim a espessura mínima, o que era considerado experimentalmente impossível até a realização. A descrença na síntese de cristais 2D era sustentada pela ideia da instabilidade termodinâmica em condições ambientes, baseada na teoria física de Peierls, Landau, Lifshitz e Mermin (PEIERLS, 1935; LANDAU, 1937; LANDAU; LIFSHITZ, 2013) e fundamentada no teorema de Mermin-Wagner (MERMIN, 1968), que afirma que as flutuações térmicas existentes em qualquer temperatura finita deve fazer com que as redes cristalinas de baixa dimensão sofram deslocamentos atômicos comparáveis às distâncias interatômicas, de modo que essa rede entre em colapso. No entanto, em 2004, o grupo de pesquisa liderado por Andre Geim e Konstantin Novoselov isolaram o grafeno (NOVOSELOV *et al.*, 2004), uma estrutura do tipo favo de mel composta por átomos de carbono. Desde sua síntese este material vem chamando a atenção da comunidade acadêmica por ser um semicondutor de *gap* nulo e apresentar bandas de energia cônicas¹.

A geometria dos materiais é um fator-chave para a estrutura de banda eletrônica, pois algumas geometrias específicas dão origem a novas e exóticas bandas de energia. Essa dependência na forma estrutural dos materiais impulsionou a investigação teórica de possíveis cristais projetados com geometrias desejadas e propriedades físicas interessantes. As redes de bandas planas têm chamado a atenção pelo fato de que a ausência de dispersão produz confinamento estrito de partículas não interativas dentro da rede (LEYKAM *et al.*, 2018; KUNO, 2020). Neste trabalho destacamos algumas redes interessantes nas quais encontramos autoestados degenerados que geram uma banda de energia plana em meio a estados dispersivos.

Materiais que apresentam banda plana em seu espectro vem sendo estudados por décadas (NEWTON; WIGNER, 1949), esses apresentam estados localizados e com interferência destrutiva. Os estados localizados são comuns por serem vistos como estados sem interação, já os estados com interferência destrutivas não são tão triviais pois têm requisitos rigorosos

¹ Para mais discussões sobre a estabilidade de cristais 2D aplicada ao contexto do grafeno, consultar Refs. (KATSNELSON, 2007; THOMPSON-FLAGG *et al.*, 2009; GALASHEV; RAKHMANOVA, 2014).

de simetria e acoplamento (LIEB, 1989). Essas bandas *flat*, conforme definida pela teoria de bandas, referem-se a estados de velocidade de grupo próxima a zero no espaço dos momentos de elétrons perto do nível de Fermi (DENG *et al.*, 2003). Sistemas com banda plana foram propostos para realizar ferromagnetismo de alta temperatura, supercondutividade e estados topológicos (DEPENBROCK *et al.*, 2012; LIU *et al.*, 2014). Além disso, bandas planas, isto é, não-dispersivas, hospedam elétrons com uma massa infinita, diferentemente de bandas com dispersão linear que já abrigam elétrons sem massa (JIANG *et al.*, 2021). Em 2011, três grupos de pesquisa propuseram independentemente a ideia de introduzir uma topologia não trivial de bandas planas para alcançar estados topológicos fortemente correlacionados (TANG *et al.*, 2011; SUN *et al.*, 2011; NEUPERT *et al.*, 2011).

Dentro desse contexto de materiais com bandas planas, é relevante discutirmos as redes $\alpha - T_3$, Lieb e Kagome, pois essas estruturas possuem em seu espectro eletrônico: (i) duas bandas dispersivas com dependência linear em k , que compõem um cone de Dirac similarmente ao grafeno, e (ii) uma terceira banda plana que cruza o ponto de Dirac. Com o intuito de apresentarmos e discutirmos a estrutura cristalina de cada uma dessas redes, retomamos uma definição indispensável na descrição de qualquer sólido cristalino que é o conceito de rede de Bravais, que lida diretamente com a geometria da estrutura. Uma rede de Bravais é um arranjo infinito de pontos organizados e orientados de forma que esses pontos parecem os mesmos, independentemente de onde seja observada a estrutura (ASHCROFT; MERMIN, 1976). Matematicamente, temos que:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (1.1)$$

onde \vec{a}_1 , \vec{a}_2 e \vec{a}_3 são quaisquer vetores não coplanares, que são responsáveis por gerar ou cobrir a rede, chamados de vetores primitivos. Ressaltamos que n_i , com $i = 1, 2, 3$, são necessariamente inteiros. Evidentemente, uma vez que consideramos todos os pontos equidistantes, a rede de Bravais deve ser infinita em extensão, isso parece contradizer o real, já que os cristais são finitos por natureza. No entanto, ao analisarmos seu interior a maioria dos pontos estão distantes o suficiente da superfície, de forma que os efeitos de borda podem ser desconsiderados (KITTEL, 1967; SAITO *et al.*, 1998).

Na Fig. 1 apresentamos as estruturas cristalinas [1(a), 1(d), 1(g), 1(j)], relações de dispersão [1(b), 1(e), 1(h), 1(k)], e densidades de estados [1(c), 1(f), 1(i), 1(l)] para as redes do grafeno, $\alpha - T_3$, Lieb, e Kagome, respectivamente, onde pode-se notar como os sítios estão organizados, estando as subredes não-equivalentes representadas com cores distintas.

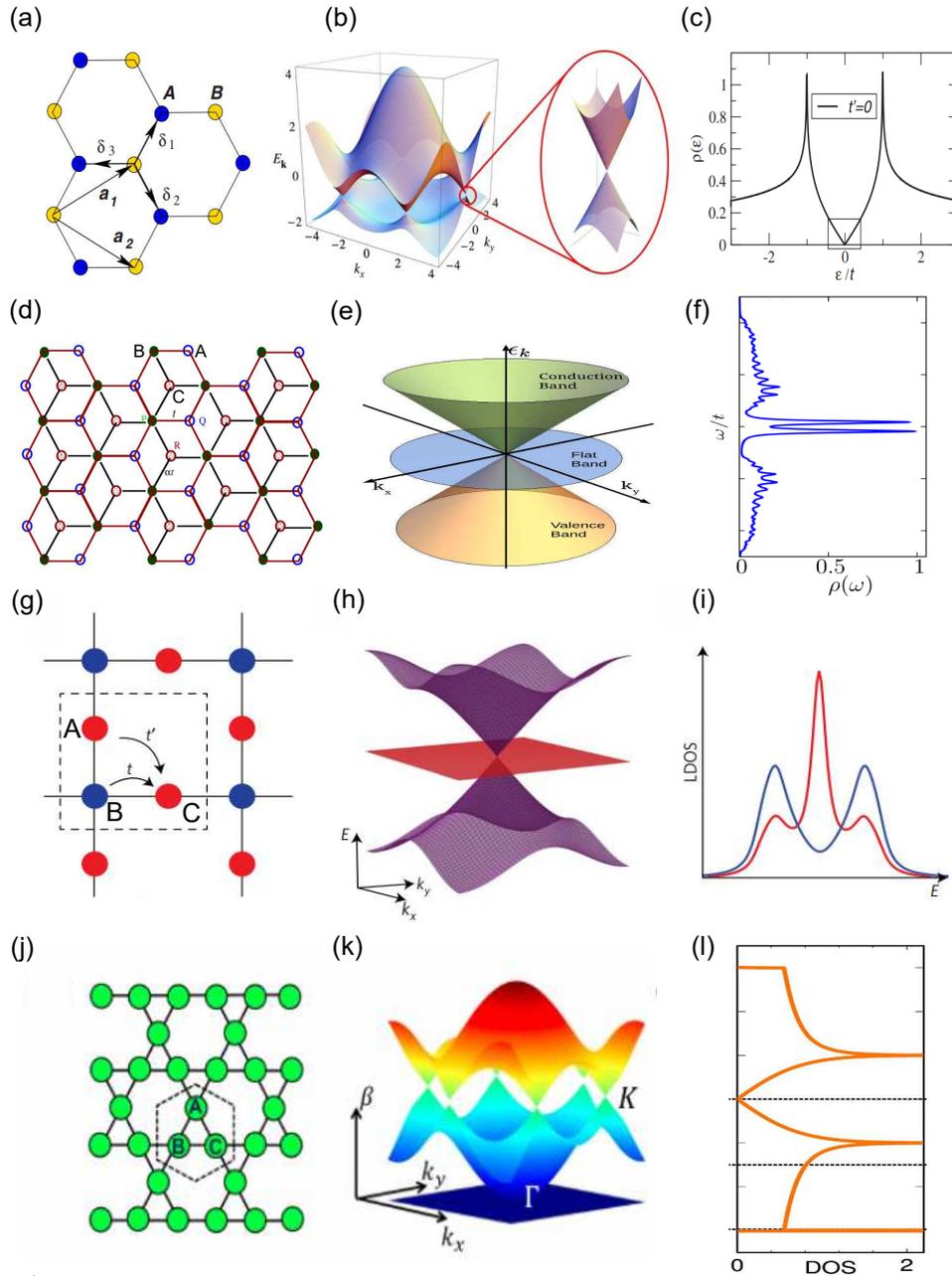


Figura 1 – (À esquerda) Estrutura da rede, (ao meio) espectro de energia e (à direita) densidade de estados das redes do grafeno, $\alpha - T_3$, Lieb e Kagome, respectivamente. Figura adaptada das Refs.: (a)-(c) (NETO *et al.*, 2009), (d)-(f) (BISWAS; GHOSH, 2016) (g)-(i) (JIANG *et al.*, 2019b) e (j)-(l) (ZONG *et al.*, 2016).

A estrutura cristalina da rede do grafeno, apresentada na Fig. 1(a), é caracterizada por dois átomos por célula unitária, formando uma rede com estrutura similar a um favo-de-mel que pode ser vista como a superposição de duas sub-redes triangulares (NETO *et al.*, 2009), A e B, que têm os seguintes vetores primitivos

$$\vec{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \vec{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right), \quad (1.2)$$

onde $a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$, de forma que os vetores da rede recíproca são dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1 \right). \quad (1.3)$$

Na Fig. 1(b) podemos observar no espectro eletrônico do grafeno uma dispersão linear em k , diferindo da maioria dos semicondutores padrões onde encontramos uma relação parabólica para a energia ($E \propto k^2$). Este material lamelar formado apenas por átomos de carbono é classificado como um semi-metal de *gap* nulo, tendo em vista que suas bandas de valência e condução se tocam no entorno dos pontos de Dirac, e em adição, elétrons na vizinha desses pontos com dispersão energética linear são vistos como quasipartículas de Dirac sem massa (NETO *et al.*, 2009). Pela Fig. 1(c), podemos destacar que a densidade de estados do grafeno apresenta dois picos simétricos associados a singularidade de Van Hove (HOVE, 1953; BHIMANAPATI *et al.*, 2015).

A estrutura cristalina da rede $\alpha - T_3$, conforme mostra a Fig. 1(d), segue o modelo favo-de-mel da rede do grafeno, diferenciando-se por ter um átomo no centro do hexágono, tendo como vetores primitivos os mesmos apresentados para o grafeno na Eq. (1.2). Observa-se pela Fig. 1(e) que o espectro eletrônico da rede $\alpha - T_3$ apresenta duas bandas dispersivas, formando um cone, e uma banda *flat* entre eles (BISWAS; GHOSH, 2016). Na Fig. 1(f) podemos observar dois picos de mais alta intensidades na densidade de estados no entorno do zero de energia associados a banda quase plana (VIGH *et al.*, 2013), ilustrada na Fig. 1(e).

A rede de Lieb, representada na Fig. 1(g), é uma estrutura 2D quadrada de borda centrada. Apesar de não existir em materiais conhecidos, foi recentemente realizada em sistemas de átomos frios e redes fotônicas (SHEN *et al.*, 2010; GUZMAN-SILVA *et al.*, 2014; MUKHERJEE *et al.*, 2015). É uma rede formada por três sítios de base não-equivalentes, rotulados aqui por A, B e C, com os seguintes vetores primitivos

$$\vec{a}_1 = a(1,0), \quad \vec{a}_2 = a(0,1), \quad (1.4)$$

de forma que os vetores da rede recíproca são dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1,0), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0,1). \quad (1.5)$$

O espectro de energia da rede de Lieb, dado na Fig. 1(h), assim como aquele para a rede $\alpha - T_3$, é formado por duas bandas dispersivas, que compõem um cone de Dirac e uma terceira banda plana que cruza o ponto de Dirac. Na Fig. 1(i) esboça-se a densidade local de estados por sítio. A curva em cor vermelha (azul) corresponde a densidade local de estados para

os átomos A e C (átomo B) da rede de Lieb. Isso implica dizer que a distribuição eletrônica do estado da banda plana está concentrada nos átomos A e C. (JIANG *et al.*, 2019b)

Por fim, apresentamos a estrutura da rede de Kagome na Fig. 1(j), que é uma rede triangular que pode ser vista como uma estrutura formada pelos vértices e arestas do favo-de-mel cúbico, preenchendo o espaço por tetraedros regulares e tetraedros truncados (ZONG *et al.*, 2016). Possui uma estrutura cristalina que também é composta por três sítios distintos, rotulados aqui por A, B e C, tendo como vetores primitivos

$$\vec{a}_1 = a(1, 0), \quad \vec{a}_2 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (1.6)$$

de forma que os vetores da rede recíproca são dados por

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, -\frac{\sqrt{3}}{3} \right), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2\sqrt{3}}{3} \right). \quad (1.7)$$

Por décadas em física da matéria condensada, os reticulados de Kagome têm sido objeto principalmente de estudos teóricos devido às suas propriedades intrigantes associadas à frustração de spin (MOULTON *et al.*, 2002). Mas, o avanço da tecnologia transformou-os de teoria em realidade, incluindo, por exemplo, a realização em nanoescala de redes de Kagome por átomos e moléculas de auto-montagem e redes metálicas de Kagome pelo novo *design* e fabricação de metamateriais (NAKATA *et al.*, 2012).

Mostramos na Fig. 1(k) o espectro de energia para a rede de Kagome. Esta rede exhibe uma estrutura de bandas formada por uma banda plana e duas outras bandas com dispersão análoga ao caso do grafeno. Como consequência da sua estrutura de bandas, sua densidade de estados [Fig. 1(l)] possui três picos bastante pronunciados: um deles associado a banda plana e os outros dois as singularidades de Van Hove, análogos aqueles para o caso do grafeno na Fig. 1(c) (HOVE, 1953).

1.2 Nanofitas de materiais 2D

O estudo sobre nanofitas de materiais 2D é motivado pelo fato de que propriedades da matéria dependem não só da sua composição química e estrutura, como também de seu tamanho e formato. Por nanofitas entendemos sistemas que preservam a geometria da rede e possuem dimensão infinita ao longo de uma direção e tamanho nanométrico ao longo da outra direção (NOVOSELOV *et al.*, 2004).

A dimensionalidade está intimamente ligada ao número de graus de liberdade. Por sua vez, o movimento dos portadores de carga em um sólido cristalino é limitado a uma região de dimensão da ordem do comprimento de onda de *de Broglie* (HARRISON; VALAVANIS, 2016). No caso das nanofitas, tem-se que estas são caracterizadas como estruturas unidimensionais (1D), estando os portadores de carga confinados em duas direções e livres em uma direção, sendo esta última a direção em que a nanofita possui simetria de translação. Outro sistema de baixa dimensionalidade com estruturas 1D são os fios quânticos. A diferença entre nanofita e fio quântico fabricados de materiais 2D é que o confinamento na nanofita é estrutural enquanto que no fio quântico é eletrostático (MATAGNE, 2001). Essas estruturas cristalinas 2D têm sido o foco de interesse devido às suas propriedades únicas, como alta densidade eletrônica de estados dependente do tipo de terminação, energia de ligação de éxciton aprimorada, *bandgap* dependente do diâmetro, dispersão de superfície aumentada para elétrons e fônons, e eletrônica dependente da quiralidade estrutural da banda (YAGMURCUKARDES *et al.*, 2016).

Nesse sentido, apresentamos algumas nanofitas com diferentes tipos de bordas, analisando sua estrutura e contagem de linhas, assim como seu espectro de energia e densidade de estados. Focamos nas nanofitas formadas por materiais 2D que possuem em sua estrutura eletrônica bandas cônicas e planas, tais como aqueles discutidos na Seção 1.1. São elas: nanofitas de grafeno (Seção 1.2.1) e $\alpha - T_3$ (Seção 1.2.2) com bordas do tipo *zigzag* e *armchair*, Lieb (Seção 1.2.3) com bordas do tipo retas, barbadadas e assimétricas, e Kagome (Seção 1.2.4) com bordas do tipo *zigzag* e dente de serra.

1.2.1 Nanofitas de grafeno

A geometria e tamanho de um sistema de carbono em escala nanométrica são fatores fundamentais ao se estudar propriedades eletrônicas das nanofitas de grafeno, que são determinadas pelos dois tipos mais comumente investigados de bordas: *armchair* e *zigzag*. A Fig. 2 apresenta a estrutura de rede de uma folha de grafeno e ilustrações de retângulos relativos às células unitárias para se definir essas duas formas distintas *zigzag* e *armchair* de confinamento. Tem-se pela Fig. 2 que ao confinarmos na direção vertical (horizontal), obtem-se um contorno do tipo *zigzag* (*armchair*).

A estrutura de bandas de energia das nanofitas com bordas do tipo *armchair* é mostrada nas Figs. 3(a)–3(c), para três larguras de nanofitas diferentes, juntamente com as respectivas densidades de estados. O topo da banda de valência e o fundo da banda de condução

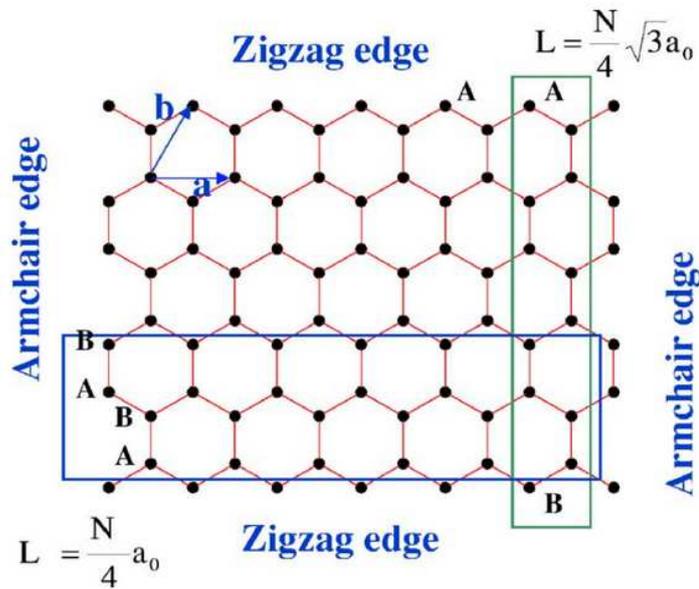


Figura 2 – Ilustração da estrutura de rede do grafeno e das células unitárias para se definir nanofitas com diferentes terminações. Os vetores de rede primitivos são denotados por **a** e **b**. As bordas superiores e inferiores (à esquerda e à direita) possuem terminações do tipo *zigzag* (*armchair*), com retângulo vertical (horizontal) representando a respectiva célula unitária na construção da nanofita com tal borda. O comprimento das nanofitas L em termos do número de átomos N na célula unitária para o caso *zigzag* (*armchair*) é $L = Na_0/4$ ($L = N\sqrt{3}a_0/4$). Figura adaptada da Ref. (BREY; FERTIG, 2006).

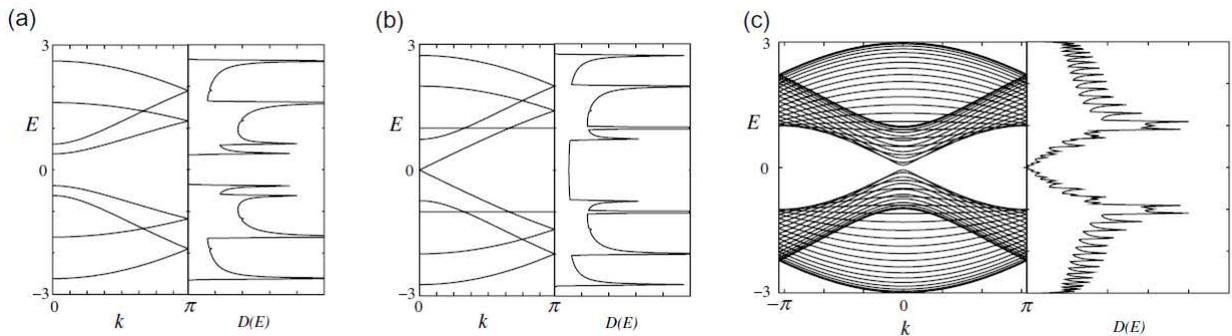


Figura 3 – Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e densidade de estados $D(E)$ de nanofitas *armchair* com diferentes larguras tomando (a) $N = 4$, (b) $N = 5$ e (c) $N = 30$ número de linhas de átomos de carbono. Figura adaptada da Ref. (WAKABAYASHI *et al.*, 2009).

estão localizados em $k = 0$. Podemos notar que a largura da nanofita dita se o sistema é metálico ou semicondutor (CHANG *et al.*, 2007), isto é, o sistema possui uma forte dependência com o número de linhas de átomos de carbono que compõe a célula unitária da nanofita. Como era de se esperar, para grandes larguras das nanofitas com bordas *armchair*, sua densidade de estados tende a se assemelhar aquela para o caso da folha infinita [Fig. 1], como se pode ver para $N = 30$ na Fig. 3(c).

Para o caso das nanofitas com bordas do tipo *zigzag* surge uma característica marcante na estrutura de banda de energia, que podemos observar nas Figs. 4(a)-4(c), a banda

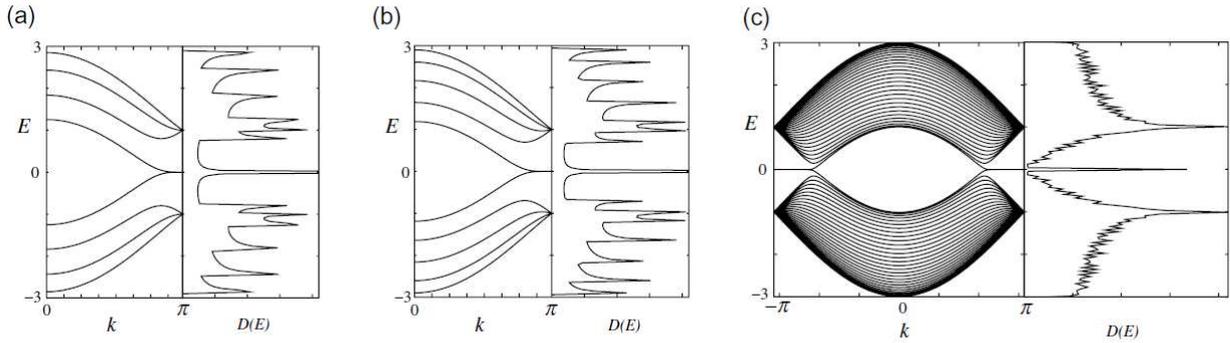


Figura 4 – Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e densidade de estados $D(E)$ de nanofitas *zigzag* com diferentes larguras tomando (a) $N = 4$, (b) $N = 5$, e (c) $N = 30$ número de linhas de átomos de carbono. Figura adaptada da Ref. (WAKABAYASHI *et al.*, 2009)

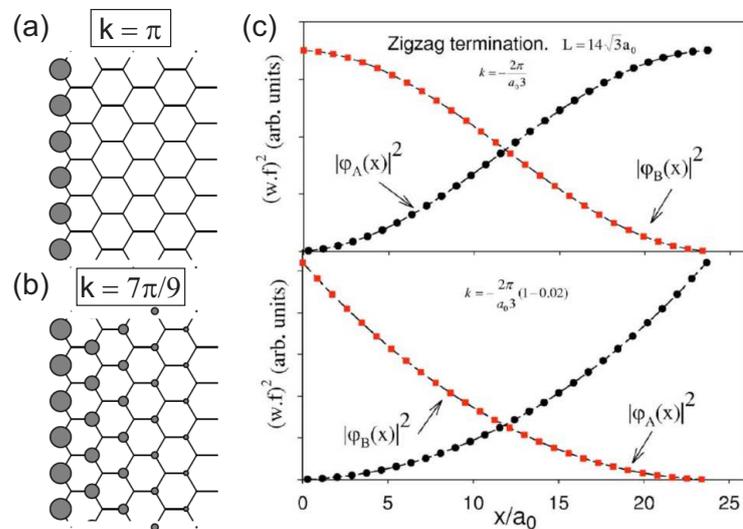


Figura 5 – Ilustração da distribuição eletrônica por sítio do estado de borda para (a) $k = \pi$ e (b) $k = 7\pi/9$. Quanto maior a intensidade do módulo quadrado da função de onda maior é o raio do círculo no sítio atômico em cinza. (c) Módulo quadrado da função de onda pseudospinorial para cada subrede A ($|\phi_A|^2$ - símbolos vermelhos) e B ($|\phi_B|^2$ - símbolos pretos) tomando $k = -2\pi/3a_0$ (painel de cima) e $k = -2\pi/3a_0(1 - 0.02)$ (painel de baixo) com relação ao centro da zona de Brillouin, obtida via modelo contínuo. Figuras adaptadas da (a, b) Ref. (WAKABAYASHI *et al.*, 2009) e (c) Ref. (BREY; FERTIG, 2006).

de valência mais alta e a banda de condução mais baixa são sempre degeneradas em $k = \pi$ e como consequência a densidade de estados apresenta um pico bastante pronunciado. Dessa maneira, nanofitas com bordas *zigzag* possuem características metálicas independentemente do número de linhas que compõe a célula unitária. Esse estado duplamente degenerado com pico na densidade de estado no entorno da energia $E = 0$ possui distribuição eletrônica espacial localizada preferencialmente nas bordas da nanofita *zigzag*. A presença de estados de bordas não ocorre em sistemas com bordas *armchair* (WAKABAYASHI *et al.*, 2009). Para ilustrar tal comportamento, apresentamos na Fig. 5 ilustrações das populações por sítio associadas aos estados de borda para dois valores de momentum: (a) $k = \pi$, exatamente na borda da zona de

Brillouin para a estrutura *zigzag* (ver painéis à esquerda nas estruturas de bandas da Fig. 4), e (b) $k = 7\pi/9$. Sabemos que propriedades nos espaços real e recíproco possuem características inversas via transformada de Fourier, assim no caso da localização das funções de onda, tem-se que quanto maior o valor de k mais restrita a uma pequena porção do espaço real deve-se estar a função de onda. Isto é visto comparando as Figs. 5(a) e 5(b). Nos painéis superior e inferior da Fig. 5(c) mostram-se os módulos quadrados das funções de onda do estado de borda, também para dois valores de momentum, e mais especificamente, enfatizando a distribuição por subrede. Em símbolos vermelhos (pretos) têm-se $|\phi_i|^2$ para a subrede $i = A(B)$. Nota-se pela Fig. 5, que a população é máxima nos átomos da borda, que são todos de uma mesma subrede, e que decaem quase que exponencialmente a medida que nos afastamos da borda. As funções de onda dos estados de borda apresentados na Fig. 5(c) foram obtidas via modelo contínuo com a utilização de condição de contorno apropriada que descreve bem a população per subrede para nanofitas *zigzag*. Como matematicamente descrito por Brey & Fertig em 2006 na Ref. (BREY; FERTIG, 2006), a condição de contorno apropriada para os estados de superfície das nanofitas *zigzag* é tal que a função de onda seja nula para um tipo de subrede em uma borda e nula para a outra subrede não-equivalente na outra borda diametralmente oposta.

Para ilustrar o comportamento das funções de onda para os estados chamados de *bulk* para o caso das nanofitas com bordas *zigzag*, apresentamos na Fig. 6 funções de onda para diferentes estados na banda de valência (rotulados com o índice n_v) e de condução (rotulados com o índice n_c) para nanofitas com $N = 6$ (painéis à esquerda) e $N = 19$ (painéis à direita) átomos de cada subrede, A (vermelhos) e B (azul), na célula unitária. Colunas de resultados à esquerda e à direita para cada N fixo correspondem as soluções numéricas e analíticas, respectivamente. Resultados foram reportados na Ref. (MORADINASAB *et al.*, 2012). Pela Fig. 6, vemos que os estados de *bulk* das bandas de condução e valência, para o caso das nanofitas com bordas *zigzag*, apresentam comportamento nodal com o número de picos e vales cada vez maior quanto mais energético for o estado. Esse comportamento nodal das funções de onda para os estados de *bulk* é análogo aos casos das funções de onda confinadas em poços de potenciais 1D bem discutidos nos livros de Mecânica Quântica e Física Moderna. Tal analogia é claramente entendida, notando-se que nanofitas correspondem estruturas de confinamento 1D e que um “corte” transversal à sua direção de simetria de translação se assemelha, de fato, a um poço quântico que por sua vez possui soluções com comportamento nodal do tipo senoidal.

Como aqui já mencionado, as relações de dispersão das nanofitas de grafeno com

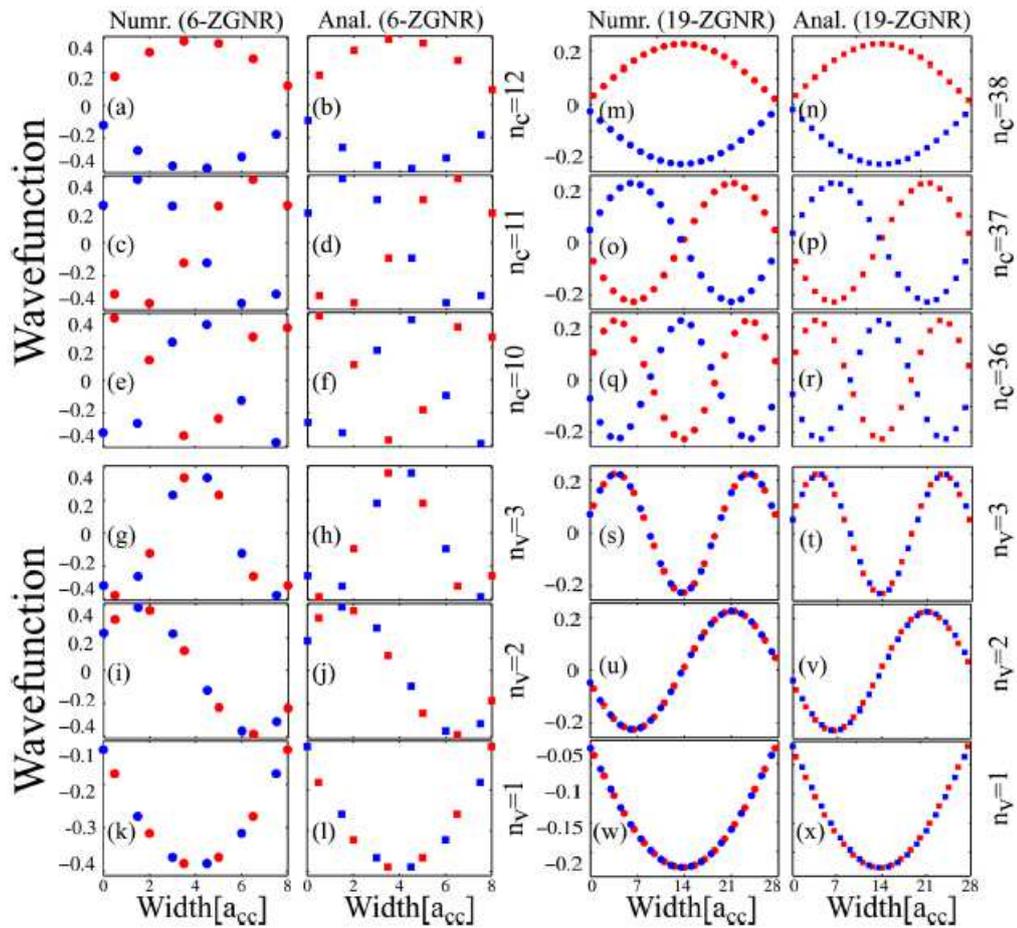


Figura 6 – As funções de onda de 6-ZGNR e 19-ZGNR. Símbolos vermelhos(azuis) denotam as funções de onda na sub-rede B(A). O modelo analítico (quadrados) é comparado com os resultados numéricos (círculos). Figura adaptada da Ref. (MORADINASAB *et al.*, 2012)

bordas *armchair* apresentam apenas estados de *bulk*. De forma análoga aos estados de *bulk* nas nanofitas com bordas *zigzag*, estes aqui também possuem comportamento nodal, como mostrado na Fig. 7. Como discutido por Brey & Fertig em 2006, (BREY; FERTIG, 2006) a condição de contorno dentro do modelo de Dirac para nanofitas com bordas *armchair* mistura estados dos vales K e K' , tal que a mistura de diferentes estados dos vales leva a uma função de onda que oscila com período $2\pi/\Delta k$, com $\Delta k = 4\pi/3a_0$. Tal condição de contorno leva a discretização dos valores de k , obtendo-se o valor $k_n = \frac{2\pi n}{2L+a_0} + \frac{2\pi}{3a_0}$, com o valor de L dado por $L = (3M + 1)a_0$ para o caso das nanofitas metálicas, com M pertencente aos inteiros, e para os outros casos de L tem-se nanofitas semicondutoras. Com essa regra de quantização de k_n apenas se tem funções de onda com comportamento nodal caso a mistura dos vales leve a um estado com oscilações “curtas” nas funções de onda tal que seja exatamente equivalente ao período esperado introduzido para atender às condições de contorno. Isto é visto na Fig. 7 para diferentes valores de n . Por exemplo, na Fig. 7(a) para $n = 50$ e $k_n = 0$, tem-se que a energia é zero, levando a nenhum efeito

de confinamento na forma da função de onda. Por outro lado, para $n = 51$ [Fig. 7(b)] e $n = 52$ [Fig. 7(c)] tem-se que $k_n \neq 0$ e vê-se uma oscilação de longo comprimento de onda cujo período está relacionado com o valor de k_n .

De forma geral, vimos nessa seção que as duas formas básicas de bordas na construção de nanoestruturas de confinamento 1D em grafeno determinam as propriedades eletrônicas das nanofitas. Veremos nas próximas subseções exemplos de nanofitas para outras redes de cristais 2D e o papel das bordas nas suas propriedades.

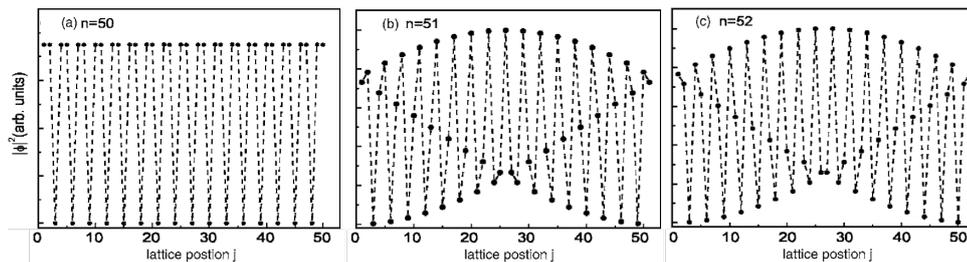


Figura 7 – Módulo quadrado da função das funções de onda para estados com energias próximas a zero para nanofitas com bordas *armchair* assumindo diferentes larguras: (a) $n = 50$, (b) $n = 51$, e (c) $n = 52$. Figura adaptada da Ref. (ZHENG *et al.*, 2007).

1.2.2 Nanofitas $\alpha - T_3$

A descoberta do grafeno impulsionou a busca de materiais 2D semelhantes a ele, em especial que compartilhasse de sua peculiar estrutura de bandas com dispersão da bandas linear em um regime energético baixo. Nesse sentido, apresentamos a rede $\alpha - T_3$, que é um material 2D semelhante ao grafeno com um átomo adicional no centro do hexágono.

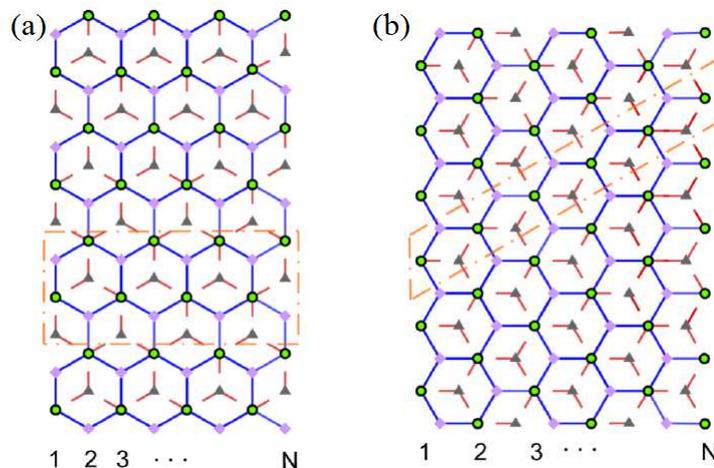


Figura 8 – Representação de nanofita da rede $\alpha - T_3$ com bordas do tipo (a) *armchair* e (b) *zigzag*. A célula unitária é definida pela linha tracejada em cor laranja. A largura da nanofita é definida com a escolha do número de linhas atômicas N . Figura adaptada da Ref. (CHEN *et al.*, 2019).

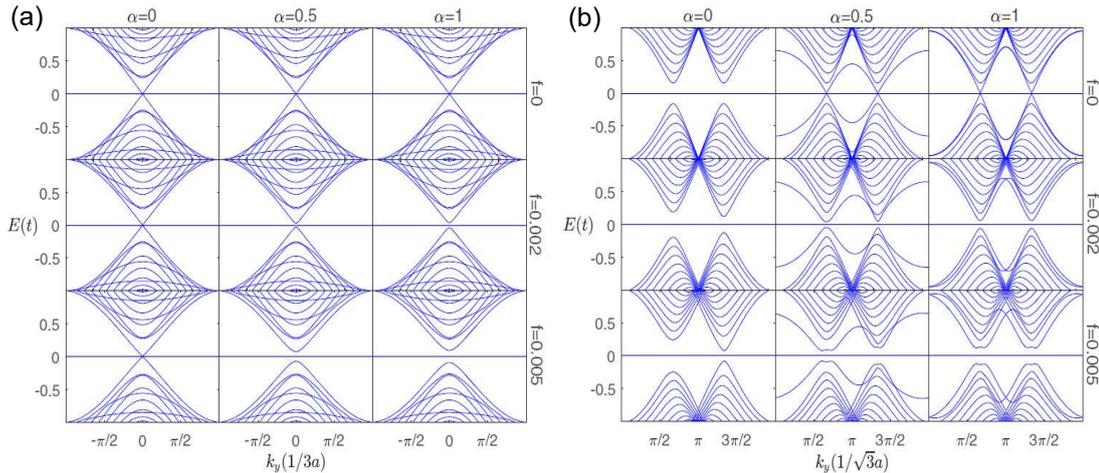


Figura 9 – Estruturas de banda das nanofitas da rede $\alpha - T_3$ com bordas do tipo (a) *armchair* e (b) *zigzag* com terminações $B - B$. Dispersões para diferentes valores do parâmetro α são apresentados: (coluna à esquerda) $\alpha = 0$, (coluna ao meio) $\alpha = 0,5$, e (coluna à direita) $\alpha = 1$. Figura adaptada da Ref. (CHEN *et al.*, 2019).

A rede $\alpha - T_3$ é composta por três subredes não-equivalentes, rotuladas aqui por A, B, e C. Os sítios A e B formam uma rede do tipo favo de mel e o sítio C está no centro dos hexágonos (CHENG *et al.*, 2021) [ver ilustração da rede $\alpha - T_3$ na Fig. 1(d)]. Uma característica proeminente do modelo $\alpha - T_3$ é a banda plana sem dispersão (WANG; LIU, 2021). Observa-se que essa característica pode exercer um enorme efeito sobre as propriedades do material e conseqüentemente nas suas possíveis aplicações (CHEN *et al.*, 2019). Este modelo $\alpha - T_3$ interpola entre a rede de favo-de-mel do grafeno e a rede de dados (do inglês, *dice*) através do parâmetro α (TAN *et al.*, 2020). Dentro da abordagem *tight-binding*, tem-se que a energia de ligação entre os sítios A e B é t_1 , entre os sítios B e C é t_2 , e entre os sítios A e C não é permitida. O parâmetro α é definido como $\alpha = t_2/t_1$, tal que os casos limites são para $\alpha = 0$ e $\alpha = 1$ correspondendo as situações cristalográficas da rede favo-de-mel e de dados, respectivamente.

De forma análoga ao grafeno, as nanofitas da rede $\alpha - T_3$ podem possuir terminações do tipo *armchair* e *zigzag*, como representadas nas Figs. 8(a) e 8(b), respectivamente. A evolução da estrutura de banda de uma nanofita $\alpha - T_3$ com borda *armchair* com vários parâmetros α é apresentada na Fig. 9(a). O número de linhas atômicas é de $N = 20$, que satisfaz a condição $N = 3n - 1$ para as nanofitas metálicas do tipo *armchair*, estando em concordância com o espectro obtido de uma situação metálica para $\alpha = 0$ (grafeno), isto é com *gap* nulo [ver coluna à esquerda para $\alpha = 0$ na Fig. 9(a)]. Temos que f corresponde ao fluxo magnético, assim, os resultados para $f \neq 0$ correspondem casos em que o campo magnético perpendicular é aplicado, e que não discutiremos aqui.

Para o caso *zigzag*, duas terminações possíveis compostas por subredes diferentes podem ser formadas: (i) com terminações dos dois lados da nanofita sendo de subrede B, chamada de nanofita *zigzag B – B*, e (ii) com terminações em uma lado do tipo C e do outro lado do tipo A, chamada de nanofita *zigzag C – A*. Na Fig. 9(b) apresentamos as estruturas de bandas para nanofitas da rede $\alpha - T_3$ de bordas *zigzag* com terminações *B – B* para vários valores α . A banda plana e as sub-bandas de estados de borda nas nanofitas *zigzag* são degeneradas em toda a zona de Brillouin e localizados em $E = 0$. No entanto, com α diferente de zero, duas sub-bandas de estados de borda para as nanofitas *zigzag* tornam-se sub-bandas linearmente dispersivas e se cruzam em dois pontos de Dirac.

Através dos resultados das dispersões eletrônicas das nanofitas da rede $\alpha - T_3$ para dois exemplos de terminações de bordas [Fig. 8], pode-se notar que os espectros de estruturas 1D da rede $\alpha - T_3$ compartilham semelhanças e certas diferenças com relação algumas características discutidas na subseção anterior para o caso de nanofitas de grafeno. De forma análoga, é bastante interessante investigar tais discrepâncias e semelhanças em nanofitas fabricadas de outras redes que possuam bandas planas e lineares, tais como a rede de Lieb e Kagome, como discutido a seguir.

1.2.3 Nanofitas de Lieb

Recentemente, estudos foram conduzidos sondando experimentalmente a resposta da rede de Lieb à campos externos de calibre e às características ferromagnéticas (GUZMAN-SILVA *et al.*, 2014; GUZMÁN-SILVA *et al.*, 2014), mostrando a relevância em sistemas do tipo Lieb. O interesse na rede de Lieb surge das propriedades específicas induzidas por sua topologia. Como discutido na Sec. 1.1, essa rede é caracterizada por uma célula unitária contendo três átomos [rotulando aqui os sítios do tipo A com símbolo vermelho, com verde os sítios do tipo B, e com azul os sítios do tipo C] e possui um espectro com simetria elétron-buraco formado por três bandas.

De forma natural, seguindo os passos dos estudos em nanofitas de grafeno, estudos de nanoestruturas 1D na rede de Lieb foram reportados nas Refs. (WEEKS; FRANZ, 2010; WANG; ZHANG, 2010; NIŃA *et al.*, 2013), investigando a influência de três diferentes geometrias das bordas nos seus espectros eletrônicos. A Fig. 10 ilustra as referidas três terminações: [Fig. 10(a)] retas, [Fig. 10(b)] barbadas e [Fig. 10(c)] assimétricas.

Com relação a construção das nanofitas de Lieb, tomando o eixo vertical (y) como

a direção de confinamento, temos que (CHEN; ZHOU, 2016): (i) nanofitas com bordas retas possuem suas bordas compostas por subredes de dois tipos, onde no esquema da Fig. 10(a) esses são os sítios do tipo B (verde) e C (azul); (ii) nanofitas com bordas barbadas possuem suas bordas compostas por apenas uma subrede, onde no esquema da Fig. 10(b) é o sítio do tipo A (vermelho); e (iii) nanofitas com bordas assimétricas são compostas por uma borda reta com subredes de dois tipos e uma borda barbada com a subrede do outro tipo. No esquema da Fig. 10(c) o lado com borda reta é formado pelos sítios B (verde) e C (azul) e o lado com borda barbada pelo sítio do tipo A (vermelho).

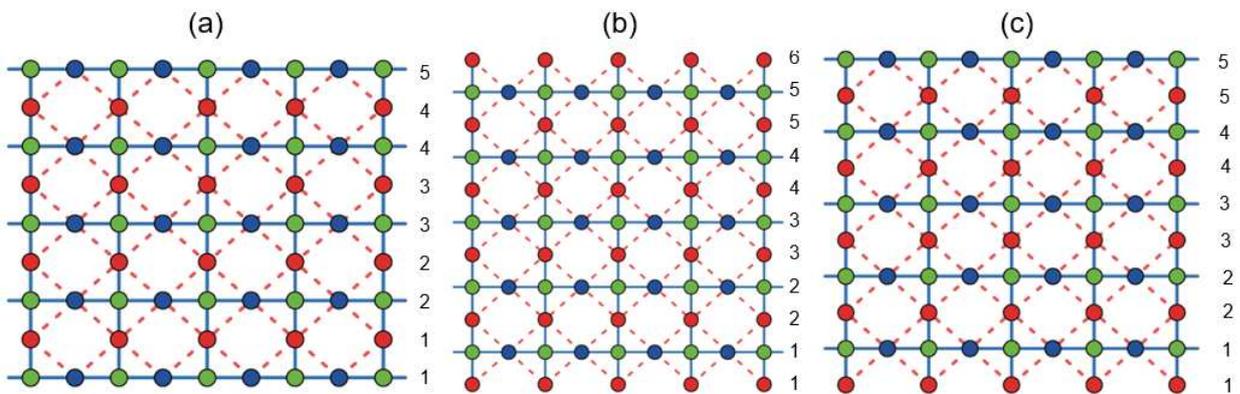


Figura 10 – Nanofitas de Lieb com diferentes tipos de bordas: (a) reta, (b) barbada, e (c) assimétrica. Os símbolos vermelhos representam os sítios do tipo A, os verdes do tipo B e os azuis do tipo C. Figura adaptada da Ref. (CHEN; ZHOU, 2016).

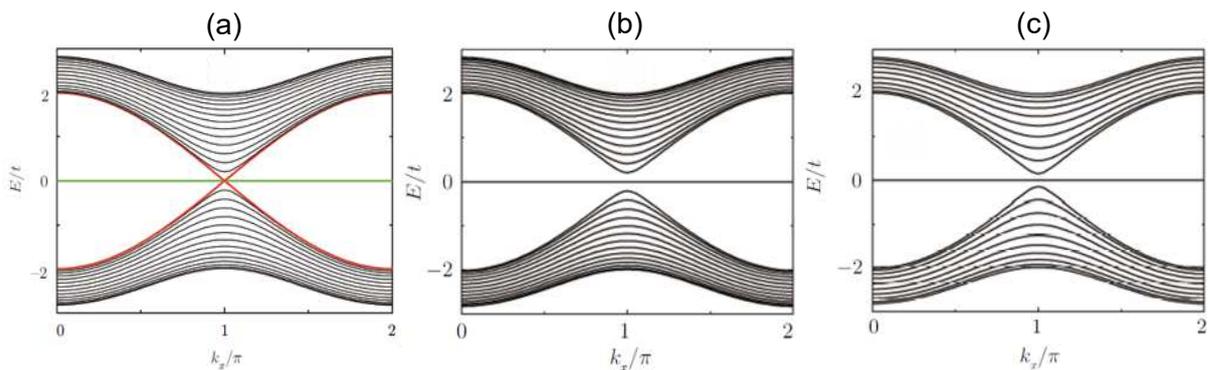


Figura 11 – Espectro de energia das nanofitas de Lieb para bordas do tipo (a) reta com $N = 15$, (b) barbada com $N = 15$, e (c) assimétrica com $N = 10$. Figura adaptada da Ref. (CHEN; ZHOU, 2016).

Na Fig. 11 apresentamos as relações de dispersão para as nanofitas de Lieb com bordas (a) retas, (b) barbadas, e (c) assimétricas. Nota-se a presença de *gap* para o caso das bordas barbadas e assimétricas. A diferença do tamanho do *gap* para os casos das bordas barbadas e assimétricas se deve as diferentes larguras das nanofitas: $N = 15$ para o caso barbado

e $N = 10$ para o caso assimétrico. Por sua vez, a banda plana permanece em todos os casos (XIA *et al.*, 2016). Discutiremos com mais detalhes os resultados para nanofitas de Lieb no Capítulo 3.

1.2.4 Nanofitas de Kagome

Como brevemente apresentado na Seção 1.1 e Fig. 1, uma rede de Kagome se caracteriza por ser uma rede hexagonal com três sítios de base (WANG; ZHANG, 2010; YOSHIDA *et al.*, 2021; WANG; ZHANG, 2008). Em contraste com a rede favo-de-mel, em Kagome não há simetria de inversão centrada no meio da ligações do vizinho mais próximo (BOLENS; NAGAOSA, 2019; LIU *et al.*, 2010). Restrições estruturais em uma das direções cristalográfica na rede de Kagome 2D gera nanofitas que podem possuir diferentes terminações. A Fig. 12 mostra dois exemplos. Ao se confinar na direção x , temos bordas do tipo dente de serra, em que cada célula unitária (entre as duas linhas tracejadas em *zigzag*) contém $2N = 50$ triângulos sombreados e um local c extra, c_0 , na borda inferior, como mostrada na Fig. 12 (a). Quando confinamos na direção y , temos bordas do tipo *zigzag*, onde cada célula unitária (entre as duas linhas tracejadas) contém $2N - 1 = 49$ triângulos sombreados (GUO; FRANZ, 2009). Na borda esquerda, há um sítio b extra, b_0 , e novamente um sítio c extra, c_0 . Na borda direita, há um sítio a extra, a_{2N} , e um sítio c extra, c_{2N} , como indica a Fig. 12(b).

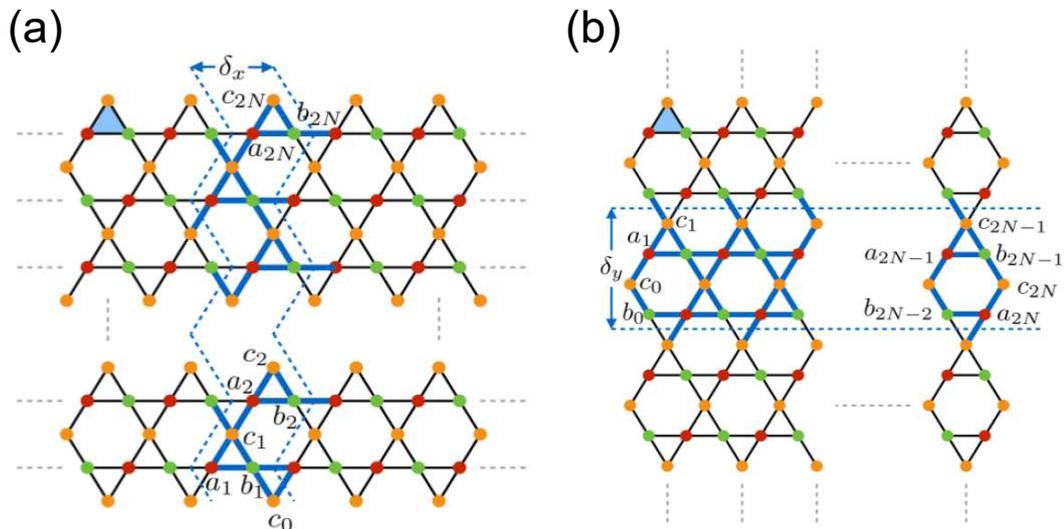


Figura 12 – Nanofitas de Kagome. (a) Um par de arestas em dente de serra ao longo da direção x . (b) Um par de arestas *zigzag* na direção y . Figura adaptada da Ref. (LIU, 2020).

As relações de dispersões para as nanofitas de Kagome com bordas do tipo dente de serra e *zigzag* são apresentados nas Figs. 13(a) e 13(b), respectivamente. Com relação a origem

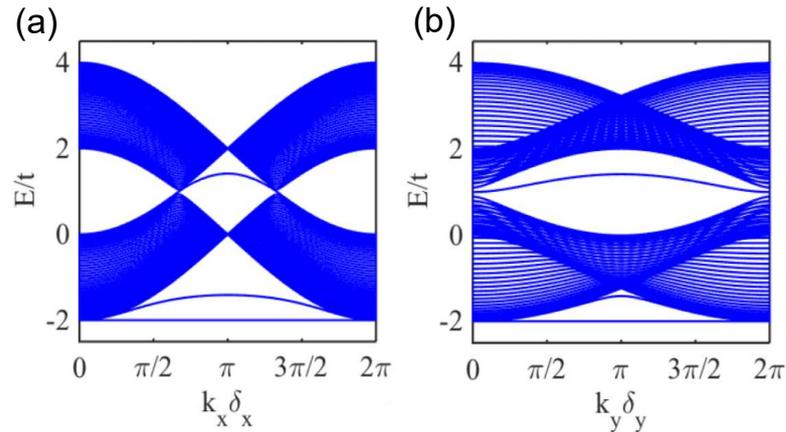


Figura 13 – Relações de dispersão das nanofitas de Kagome com bordas do tipo (a) dente de serra e (b) zigzag. Figura adaptada da Ref. (LIU, 2020).

dos estados de bordas nessas nanofitas, a Ref. (LIU *et al.*, 2010) afirma que para o caso das bordas do tipo dente de serra observa-se que cada aresta dente de serra hospeda dois estados de borda (LIU *et al.*, 2010). Um deles está localizado entre as duas bandas dispersivas, conectando os pontos de Dirac, enquanto o outro está localizado entre a banda plana e a banda dispersiva inferior. Para o caso de bordas do tipo zigzag temos que cada aresta em zigzag abriga dois estados de borda. Um deles está localizado entre as duas bandas dispersivas, enquanto o outro está localizado entre a banda plana e a banda dispersiva inferior (QI *et al.*, 2008). Discutiremos com mais detalhes os resultados para nanofitas de Kagome no Capítulo 3.

1.2.5 Nanofitas da rede de transição

Em 2019 foi demonstrado que as redes de Lieb e Kagome são interconvertíveis por tensões diagonais, permitindo o desenvolvimento de um modelo teórico *tight-binding* dependente de um ângulo θ , que nos permite tratar de uma forma geral ambas as redes de Lieb ($\theta = 90^\circ$) e de Kagome ($\theta = 120^\circ$), além de redes de transição ($90^\circ < \theta < 120^\circ$) (JIANG *et al.*, 2019b).² Por transição entende-se que podemos ir de uma rede para outra variando este parâmetro, dessa forma, um caminho natural é então explorarmos as propriedades físicas dessa transição.

A Ref. (JIANG *et al.*, 2019b) não foi a única que discutiu a evolução do espectro de Lieb em Kagome (YU *et al.*, 2009; LIM *et al.*, 2020; ABRAMOVICI, 2021). Por exemplo, as Refs. (LIM *et al.*, 2020; ABRAMOVICI, 2021) apresentam modelos *tight-binding* capazes de levar o espectro de energia de Lieb no espectro de Kagome somente pela evolução do *hopping* entre os sítios A e C, representados na Fig. 14(a). No entanto, esses modelos são menos precisos

² A interconvertibilidade entre as redes de Lieb e Kagome é sistematicamente discutida na Sec. 2.5.

do que o da Ref. (JIANG *et al.*, 2019b), uma vez que não propõem a evolução estrutural da rede de Lieb em Kagome, como feito na Ref. (JIANG *et al.*, 2019b).

A Fig. 14(a) mostra que a escolha de aplicar deformações ao longo da direção diagonal se deu porque essas redes compartilham a mesma configuração estrutural na célula unitária, ou seja, três sítios não equivalentes por célula unitária distribuídos de tal forma que há um estado de canto e dois estados de centro de borda. Partindo dessa similaridade, os autores da Ref. (JIANG *et al.*, 2019b) desenvolveram o recurso da interconvertibilidade que tanto garantiu a reprodução dos espectros de energia de Lieb e Kagome, assim como possibilitaram a investigação inicial da evolução de banda entre essas duas redes e o estudo preliminar das propriedades eletrônicas da rede de transição.

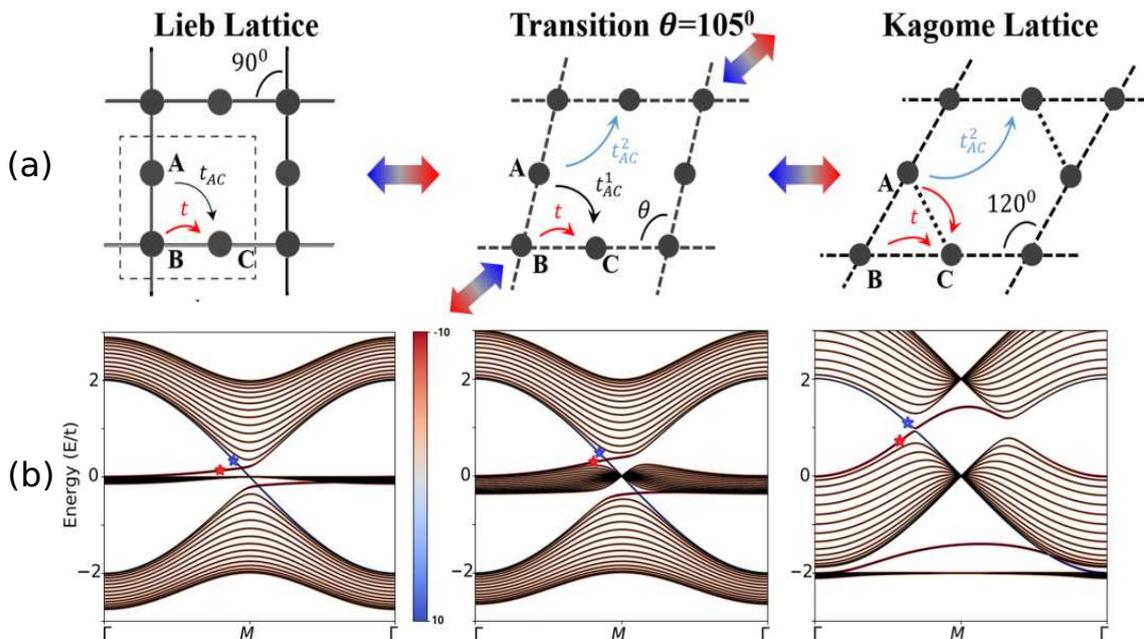


Figura 14 – Representação da transição (a) da estrutura cristalina com $\theta = 105^\circ$, (b) espectro de energia e estado da superfície de um sistema de 15 unidades, da rede de Lieb para Kagome. Figura adaptada da Ref. (JIANG *et al.*, 2019b).

Na Fig. 14(b) podemos observar uma deformação na banda plana do espectro eletrônico durante a transição entre as redes de Lieb e Kagome. Essa deformação ocorre até que a banda plana originalmente presente na parte central do espectro de energia de Lieb seja completamente destruída e então reconstruída ao final da transição na parte inferior do espectro de energia de Kagome. As cores vermelha e azul dos estados de borda representam as contribuições dos dois lados das nanofitas, respectivamente.

O recurso da interconvertibilidade desenvolvido na Ref. (JIANG *et al.*, 2019b)

foi usado em trabalhos subsequentes dos autores (JIANG *et al.*, 2019a; JIANG *et al.*, 2021). Essas referências apresentaram sínteses experimentais de redes de Lieb, Kagome e de transição construídas por moléculas orgânicas, que confirmaram as características previstas nos espectros de energia discutidos na Ref. (JIANG *et al.*, 2019b).

Por outro lado, até onde sabemos, não foi investigado sistematicamente as propriedades eletrônicas das nanofitas de redes de transição com tipos diferentes de bordas, e não encontramos na literatura estudos análogos de nanofitas construídas por redes de Lieb e Kagome que usassem o recurso da interconvertibilidade.

Portanto, motivados pela investigação de possíveis propriedades físicas interessantes dessas redes, dedicaremos esse trabalho ao estudo do espectro eletrônico, da densidade de estados e das funções de onda para diferentes configurações de nanofitas.

1.3 Escopo do trabalho

A dissertação está organizada como descrito a seguir. No Capítulo 2, apresentaremos o modelo *tight-binding* estabelecendo o passo a passo de como se dá sua aplicação e então calcularemos a estrutura de bandas usando a aproximação *tight-binding*, visando encontrar o espectro de energia para redes de Lieb, transição e Kagome. Estudaremos, ainda neste capítulo, a interconvertibilidade dessas redes e o efeito da quebra de simetria de subrede. No Capítulo 3 será apresentado a nanofita genérica que ao mudarmos o parâmetro de ângulo retornamos os casos limites das nanofitas de Lieb e Kagome com diferentes tipos de bordas, sendo elas: retas, barbadas e assimétricas. Investigamos também o efeito da quebra da degenerescência da banda plana no espectro de energia dessas redes, os efeitos ao se considerar as interações dos sítios vizinhos, e da quebra de simetria de subrede. No Capítulo 4, resumimos algumas conclusões e mencionaremos algumas de nossas perspectivas para trabalhos futuros.

2 MODELO *TIGHT-BINDING* PARA REDES DE LIEB, TRANSIÇÃO E KAGOME

Neste capítulo iremos apresentar o modelo *tight-binding* utilizado para calcular a estrutura de bandas eletrônicas dos cristais 2D investigados. Dentro dessa aproximação *tight-binding*, calculamos os elementos da matriz Hamiltoniana para o caso de uma rede genérica infinita que descreve ambas as redes de Lieb quanto de Kagome. Os espectros de energia são discutidos no contexto da interconvertibilidade dessas redes, assim como o efeito da quebra de simetria de subrede com diferentes configurações é analisado.

2.1 Rede infinita

Consideraremos uma rede genérica 2D infinita formada por três sítios de base (sítios A, B, e C, como indicado pelos círculos em verde, vermelho e azul, respectivamente, na Fig. 15). A nomenclatura aqui usada para “rede genérica” se deve ao parâmetro θ , que nos permite tratar de uma forma geral ambas as redes de Lieb ($\theta = 90^\circ$) e de Kagome ($\theta = 120^\circ$). O ângulo θ é definido entre as ligações de primeiros vizinhos entre as subredes $B - A$ e $C - B$, isto é, $\angle ABC$. Valores intermediários do parâmetro θ fornecem estruturas cristalinas para a rede de transição Lieb-Kagome. O presente modelo permite mapear estágios evolutivos do processo de interconvertibilidade entre as redes de Lieb e Kagome através de apenas um parâmetro, isto é, um modelo teórico de apenas um parâmetro de controle.

Embora não exista material 2D conhecido com essas estruturas na natureza, tais redes possuem análogos fotônicos e orgânicos, sendo seu estudo importante por causa da interação que não desaparece e da forte correlação envolvida. Sistemas com banda plana foram propostos para realizar ferromagnetismo, supercondutividade e estados topológicos (MUKHERJEE *et al.*, 2015). Apesar de não existir em materiais conhecidos, pode ser projetada, e apresenta, assim como o grafeno, bandas de energia exóticas.

Os vetores primitivos da rede real estão ilustrados na Fig. 15(a) e são dados por

$$\vec{a}_1 = a(1, 0), \quad \vec{a}_2 = a(-\cos \theta, \sin \theta), \quad (2.1)$$

tal que qualquer sítio da rede genérica pode ser encontrado pelo vetor $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$ da rede, onde (n_1, n_2) é um par ordenado formado por números inteiros que identifica a localização das células unitárias. Os vetores da rede recíproca são facilmente encontrados, obedecendo a relação

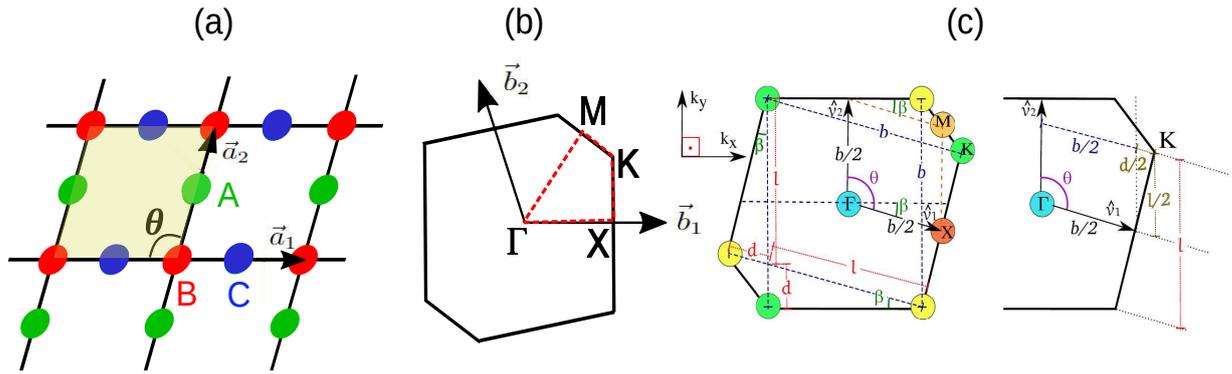


Figura 15 – Representação (a) da rede genérica 2D infinita de apenas um parâmetro de controle θ usado para descrever as redes de Lieb, transição e Kagome. A área destacada em amarelo representa a célula unitária. As subredes não-equivalentes A, B e C são representadas por círculos em cores verdes, vermelhas, e azuis, respectivamente. Os vetores primitivos da rede real são também apresentados \vec{a}_1 e \vec{a}_2 . (b, c) Primeira zona de Brillouin da rede recíproca de Lieb-Kagome, evidenciando no painel (b) o caminho a ser considerado na representação gráfica da relação de dispersão, e no painel (c) os pontos de alta simetria [Γ em azul, X em laranja, K em verde e M em amarelo] com as respectivas distâncias e ângulos utilizados na sua derivação.

$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$, onde δ_{ij} representa a delta de Kronecker, dados por

$$\vec{b}_1 = b_1(\sin \theta, \cos \theta), \quad \vec{b}_2 = b_2(0, 1), \quad (2.2)$$

onde

$$|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = \frac{2\pi}{a \sin \theta} = b. \quad (2.3)$$

A zona de Brillouin, definida como a célula unitária do espaço recíproco, para a rede genérica é apresentada na Fig. 15(b). Da mesma forma que a rede cristalina é dividida em células de Wigner-Seitz para redes de Bravais, a rede recíproca associada é dividida em zonas de Brillouin (ASHCROFT; MERMIN, 1976). Os limites da primeira zona de Brillouin são dados pelos planos equidistantes dos pontos da rede recíproca, e sua aplicação principal é nas funções de onda de Bloch. Conseguimos sua obtenção esquemática [Fig. 15(b)] traçando retas equidistantes paralelas e perpendiculares entre si.

Para encontrarmos os pontos de alta simetria para a rede genérica, analisaremos a Fig. 15(c). Na Fig. 15(c) apresentamos novamente a primeira zona de Brillouin da rede genérica de Lieb-Kagome mas agora com uma análise geométrica usada para encontrar as posições dos pontos de alta simetria. Os pontos de alta simetria $\vec{\Gamma}$, \vec{X} , \vec{K} , e \vec{M} são indicados na Fig. 15(c) por círculos nas cores azul, laranja, verde, e amarelo, respectivamente. Note que a distância entre dois mesmos pontos de alta simetria é dado por b , como indicado na Fig. 15(c), por exemplo, entre dois pontos K (veja na figura na parte superior da zona de Brillouin a linha pontilhada que

liga os dois círculos em verde). Pela Fig. 15(c) é fácil determinar as posições dos pontos $\vec{\Gamma}$, \vec{X} e \vec{M} , dadas por

$$\vec{\Gamma} = (0,0), \quad \vec{X} = \frac{b}{2}\hat{v}_1, \quad \vec{M} = \frac{b}{2}(\hat{v}_1 + \hat{v}_2), \quad (2.4)$$

onde

$$\hat{v}_1 = (\sin \theta, \cos \theta) \quad \text{e} \quad \hat{v}_2 = (0, 1). \quad (2.5)$$

A ilustração à direita da Fig. 15(c) nos permite localizar o ponto \vec{K} , tal como

$$\vec{K} = \frac{1}{2}(b-d)\hat{v}_1 + \frac{l}{2}\hat{v}_2, \quad (2.6)$$

com $b = l + d$. Podemos ainda explicitar a localização geométrica do ponto \vec{K} em termos do parâmetro de interconvencibilidade das redes Lieb-Kagome, isto é, do ângulo θ , usando os comprimentos b e d em termos de θ . Pela Fig. 15(c), temos que

$$d = l \sin \beta, \quad (2.7)$$

onde $\beta = \theta - \pi/2$ e $\sin \beta = -\cos \theta$, assim

$$d = -l \cos \theta = -\frac{b \cos \theta}{1 - \cos \theta}. \quad (2.8)$$

Dessa forma o comprimento $l = b - d$, ao substituir d pela expressão da Eq. (2.8), fica dependendo apenas de b e θ , tal como

$$l = \frac{b}{1 - \cos \theta}. \quad (2.9)$$

Finalmente, substituindo a Eq. (2.9) na expressão de \vec{K} [Eq. (2.6)], obtemos que

$$\vec{K} = \frac{1}{2}(b - l \cos \theta)\hat{v}_1 + \frac{l}{2}\hat{v}_2. \quad (2.10)$$

2.2 Modelo *tight-binding*

Encontrar as energias permitidas de um cristal é fundamental para o estudo de suas propriedades eletrônicas. Em geral, o procedimento teórico inicial para se obter a estrutura de bandas de um certo material é baseado em cálculos de primeiros princípios (*ab initio*) (DRESSELHAUS *et al.*, 1998) e, em seguida, é feita uma busca pelos parâmetros das ligações interatômicas que melhor ajustam as bandas de energia obtidas. Depois da realização de tal

processo de Wannierização (GARRITY; CHOUDHARY, 2021), à luz da teoria do funcional da densidade, pode-se descrever as bandas de energia de forma mais simples e elegante usando o modelo *tight-binding*, que significa em inglês modelo de ligação-forte. Este método lida com a superposição de funções de onda atômica, isto é, consiste em usar combinações lineares de orbitais atômicos. Em suma, o método *tight-binding* fornece um modo instrutivo de se visualizar níveis de Bloch, tomando a função de Bloch como sendo uma combinação de funções de onda atômicas somadas sobre todas as N células do cristal, onde o número de funções pode ser pequeno comparado com o número de ondas planas (ASHCROFT; MERMIN, 1976; KITTEL, 1967; SAITO *et al.*, 1998; SIMON, 2013). A seguir, descreveremos tal procedimento via modelo *tight-binding* para encontrar a equação secular que permite determinar as bandas de energia.

Considere um sólido cristalino ideal. Essa consideração implica certas aproximações: (i) aproximação adiabática - os núcleos dos átomos que compõem o cristal são fixos e com posições conhecidas na rede cristalina; (ii) modelo de um elétron - todos os outros elétrons são considerados como partes integrantes dos íons que criam um potencial periódico $V(\vec{r})$; e (iii) idealização de cristal ideal fictício - a rede cristalina é perfeitamente pura tal que impurezas e deformações, por exemplo, são tratadas via perturbação. Tais considerações resultam dizer que o problema envolve um potencial $V(\vec{r})$ com a periodicidade da rede cristalina, ou seja, $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$, para todos os vetores \vec{R} da rede de Bravais¹ e que os elétrons independentes obedecem individualmente à equação de Schrödinger $H\psi = E\psi$ com potencial periódico $V(\vec{r})$. Assim, reduz-se o problema de muitos corpos a um modelo de um elétron obedecendo a relação de periodicidade da rede. Esses elétrons independentes são chamados de elétrons de Bloch, sendo os autoestados da equação de Schrödinger conhecidos como estados de Bloch.

Consequentemente, devido à simetria translacional da célula unitária na direção dos vetores da rede, qualquer função do cristal satisfaz o Teorema de Bloch, que diz que os autoestados ψ do Hamiltoniano de um elétron para um potencial periódico [$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$] podem ser escritos na forma de uma onda plana multiplicada por uma função com a periodicidade da rede

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.11)$$

¹ Uma rede de Bravais é um conjunto infinito de pontos discretos com arranjo e orientação que parecem exatamente os mesmos, de qualquer um dos pontos de onde o arranjo seja visualizado. Uma rede de Bravais tridimensional é constituída por todos os pontos em vetores de posição \vec{R} que podem ser escritos na forma $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$, onde os \vec{a}_i , com $i = 1, 2$ e 3 , são chamados de vetores primitivos. (ASHCROFT; MERMIN, 1976; KITTEL, 1967)

onde

$$u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (2.12)$$

Combinando as Eqs. (2.11) e (2.12), tem-se que

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.13)$$

que corresponde ao Teorema de Bloch, onde os autoestados do Hamiltoniano podem ser escolhidos de modo que, associado a cada ψ , esteja um vetor de onda \vec{k} , tal que

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = T_{\vec{R}} \psi(\vec{r}) = e^{\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r}), \quad (2.14)$$

onde $T_{\vec{R}}$ é o operador de translação ao longo da rede. A função de Bloch é dada por

$$\phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j(\vec{r} - \vec{R}), \quad (2.15)$$

onde N é o número de células unitárias. Aplicando o Teorema de Bloch:

$$\phi_j(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \phi_j(\vec{r} + \vec{a} - \vec{R}), \quad (2.16)$$

organizando os termos, temos que

$$\phi_j(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}}}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{a})} \phi_j(\vec{r} - (\vec{R} - \vec{a})), \quad (2.17)$$

o que nos leva a seguinte equação

$$\phi_j(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \phi_j(\vec{k}, \vec{r}). \quad (2.18)$$

Usando a condição de contorno periódica de Born-Von Karman, que são um conjunto de condições de fronteira que são frequentemente escolhidas para aproximar um sistema grande (infinito) usando uma pequena peça chamada célula unitária, tal como

$$\phi_j(\vec{k}, \vec{r} + N_i \vec{a}_i) = \phi_j(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.19)$$

onde $N_i = N^{1/3}$, já que $N = N_1 N_2 N_3$ é o número total de células primitivas no cristal com N_1 , N_2 e N_3 sendo números inteiros positivos. Aplicando as condições de contorno (2.19) nos estados de Bloch (2.18), tem-se que

$$\phi_j(\vec{k}, \vec{r} + N_i \vec{a}_i) = e^{i\vec{k} \cdot N_i \vec{a}_i} \phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \phi_j(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.20)$$

o que implica que

$$e^{i\vec{k}\cdot N_i\vec{a}_i} = 1, \quad \text{com } i = 1, 2, \text{ e } 3. \quad (2.21)$$

As autofunções de um sólido são expressas como combinações lineares de funções de Bloch, tal como

$$\psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{j'=1}^n C_{jj'}(\vec{k}) \phi_{j'}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.22)$$

onde $C_{jj'}(\vec{k})$ são os coeficientes a serem determinados. O j -ésimo autovalor $E_j(\vec{k})$ é dada por:

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\int \psi_j^* H \psi_j dr}{\int \psi_j^* \psi_j dr}. \quad (2.23)$$

Substituindo a Eq. (2.22) na Eq. (2.23), obtemos

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \phi_j H \phi_{j'}}{\sum_{j=1}^n \sum_{j'=1}^n C_{ij}^* C_{ij'} \phi_j \phi_{j'}}, \quad (2.24)$$

que pode ser reescrita da seguinte forma:

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\sum_{j,j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}{\sum_{j,j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}, \quad (2.25)$$

onde $H_{jj'}(\vec{k}) = \langle \phi_j | H | \phi_{j'} \rangle$ corresponde aos elementos da matriz de transferência e $S_{jj'}(\vec{k}) = \langle \phi_j | \phi_{j'} \rangle$ aos elementos da matriz de *overlap*. Utilizando a função de Bloch (2.15), obtemos que os elementos de $H_{jj'}$ são dados por

$$H_{jj'} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}'-\vec{R})} t_{\vec{R}, \vec{R}'}^{jj'}, \quad (2.26)$$

onde

$$t_{\vec{R}, \vec{R}'}^{jj'} = \langle \phi_j(\vec{r}-\vec{R}) | H | \phi_{j'}(\vec{r}-\vec{R}') \rangle, \quad (2.27)$$

são chamados de parâmetros de *hopping* ou integral de transferência que está associado a energia de ligação entre os átomos localizados nos sítios \vec{R} e \vec{R}' .

Com a aplicação dessas matrizes, temos que, ao olharmos da perspectiva dos átomos $\vec{R}(\vec{R}')$, podemos considerar somente a contribuição dos átomos $\vec{R}'(\vec{R})$ que são os vizinhos mais próximos. Resultados mais precisos para as energias podem ser alcançados ao se considerar mais vizinhos de ordens maiores.

Agora, note que o coeficiente C_{ij}^* também é uma função de \vec{k} e assim C_{ij}^* é determinado para cada \vec{k} . Então quando tomamos uma derivada parcial com respeito aos coeficientes C_{ij}^* , obtemos

$$\frac{\partial E_j}{\partial C_{ij}^*} = \frac{\sum_{j'=1}^n H_{jj'} C_{ij'} \sum_{j'',j'=1}^n S_{jj''} C_{ij}^* C_{ij''} - \sum_{j'=1}^n H_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'} \sum_{j'',j'=1}^n S_{jj''} C_{ij''}}{(\sum_{j'',j'=1}^n S_{jj''} C_{ij}^* C_{ij''})^2}. \quad (2.28)$$

Usando a condição para obtermos um mínimo local

$$\frac{\partial E_j}{\partial C_{ij}^*} = 0, \quad (2.29)$$

e multiplicando ambos os lados por $\sum_{j'',j'=1}^n S_{jj''} C_{ij}^* C_{ij''}$, obtemos

$$\sum_{j'=1}^n H_{jj'} C_{ij'} = E_j(k) \sum_{j'=1}^n S_{jj'} C_{ij'}. \quad (2.30)$$

Temos então que $HC_i = E_i SC_i$, de forma que

$$[H - E_i S] C_i = 0, \quad (2.31)$$

se a matriz inversa existir obteríamos o caso trivial, onde os coeficientes C_i seriam todos iguais a zero. Logo só há autofunções quando a matriz inversa não existir, isto é equivalente a tomar o determinante igual a zero,

$$\det[H - E_i S] = 0. \quad (2.32)$$

Esta equação é chamada de equação secular, cuja soluções nos fornecem todos os autovalores de E_i para um dado \vec{k} . Assim, para se obter a relação de dispersão de energia deve-se resolver a equação secular (2.32).

2.3 Hamiltoniano genérico

Fazendo uso dos conhecimentos apresentados na seção anterior (Seç. 2.2) sobre teorema de Bloch e modelo *tight-binding* em primeira quantização, vamos nessa seção apresentar a obtenção dos elementos da matriz *tight-binding* para o caso do Hamiltoniano genérico, que descreve ambas as redes de Lieb e Kagome com a utilização de apenas um parâmetro de controle θ . Os aspectos cristalográficos da rede genérica foram apresentados na Seç. 2.1 e ilustração da rede na Fig. 15. De forma mais detalhada, mostra-se na Fig. 16 as distâncias entre os sítios $B - A$, $B - C$, $A - C^+$, e $A - C^-$, e os respectivos *hoppings* t_{BA} , t_{BC} , t_{AC}^- e t_{AC}^+ , que serão utilizados nos cálculos dos elementos de matriz *tight-binding* a seguir.

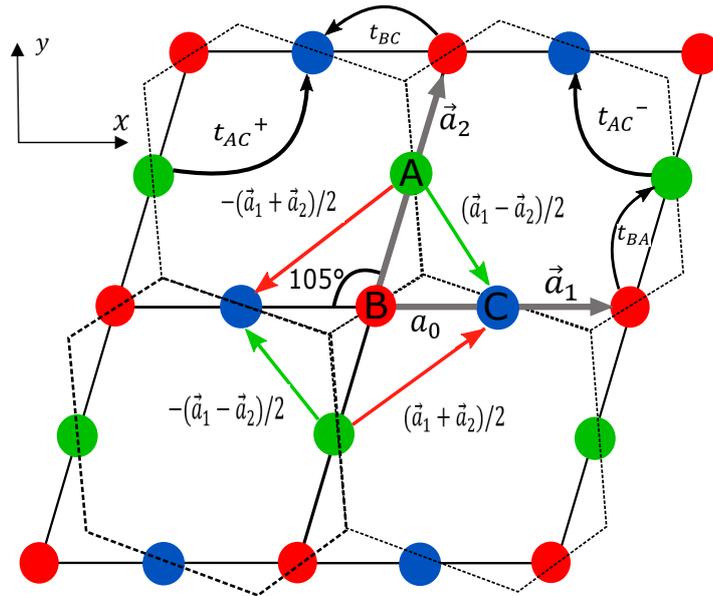


Figura 16 – Representação da rede genérica de Lieb-Kagome esquematizada com o valor fixo do parâmetro morfológico θ para o caso de $\theta = 7\pi/12$, enfatizando a distância entre os primeiros vizinhos a_0 , as distâncias entre os sítios $B - A$ ($\overline{BA} = |\vec{a}_2|/2$), $B - C$ ($\overline{BC} = |\vec{a}_1|/2$), $A - C^-$ ($\overline{AC^-} = |\vec{a}_1 - \vec{a}_2|/2$) e $A - C^+$ ($\overline{AC^+} = |\vec{a}_1 + \vec{a}_2|/2$), e os respectivos *hoppings*: t_{BA} , t_{BC} , t_{AC}^- e t_{AC}^+ .

Dentro da aproximação *tight-binding*, podemos escrever os autoestados do elétron como uma combinação linear das funções de Bloch, dado por

$$\Phi_j(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_\alpha} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_\alpha} \varphi_\alpha(\vec{r} - \vec{R}_\alpha), \quad (2.33)$$

onde $\alpha = A, B, C$ associado ao fato de que a rede Lieb-Kagome possui três átomos por célula unitária. Dessa maneira, a matriz de transferência será uma matriz 3×3 dada por

$$H = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} & H_{AC} \\ H_{BA} & H_{BB} & H_{BC} \\ H_{CA} & H_{CB} & H_{CC} \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

onde os elementos dessa matriz são adquiridos pela Eq. (2.26). Os termos da diagonal principal

são dados por

$$\begin{aligned}
H_{AA} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_A} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_A} \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \middle| H \middle| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_{A'}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{A'}} \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A'}) \right\rangle, \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_A, \vec{R}_{A'}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{A'} - \vec{R}_A)} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) | H | \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_{A'}) \rangle, \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_A} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) | H | \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \rangle = E_A,
\end{aligned} \tag{2.35a}$$

$$\begin{aligned}
H_{BB} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_B} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_B} \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \middle| H \middle| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_{B'}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{B'}} \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B'}) \right\rangle, \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_B, \vec{R}_{B'}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{B'} - \vec{R}_B)} \langle \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) | H | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_{B'}) \rangle, \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_B} \langle \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) | H | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle = E_B,
\end{aligned} \tag{2.35b}$$

$$\begin{aligned}
H_{CC} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_C} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_C} \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) \middle| H \middle| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_{C'}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{C'}} \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_{C'}) \right\rangle, \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_C, \vec{R}_{C'}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{C'} - \vec{R}_C)} \langle \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) | H | \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_{C'}) \rangle, \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_C} \langle \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) | H | \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) \rangle = E_C,
\end{aligned} \tag{2.35c}$$

onde E_A, E_B e E_C são as energias dos sítios A, B e C, respectivamente. Comparando os termos dentro dos somatórios com a Eq. (2.27), vemos que eles representam os parâmetros de *hopping* entre os mesmos sítios, isto é: $t_{A,A}$ [Eq. (2.35a)], $t_{B,B}$ [Eq. (2.35b)], e $t_{C,C}$ [Eq. (2.35c)]. Note que no cálculo de cada termo diagonal acima consideramos que a única contribuição é quando $\vec{R}_{\alpha'} = \vec{R}_\alpha$, com $\alpha = A, B, C$.

Vamos agora calcular as contribuições dos termos mistos $H_{i \neq j}$ da matriz (2.34), isto é, os elementos fora da diagonal principal entre sítios diferentes. Analisando a contribuição do sítio A com relação ao sítio B, temos que:

$$\begin{aligned}
H_{BA} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_B} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_B} \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \middle| H \middle| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_A} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_A} \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \right\rangle, \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_B, \vec{R}_A} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_A - \vec{R}_B)} \langle \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) | H | \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \rangle.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Usando a aproximação *tight-binding* até segundos vizinhos, temos que a localização dos sítios do tipo A com relação ao sítio B é dada por

$$\vec{R}_A = \vec{R}_B \pm \frac{\vec{a}_2}{2} \Rightarrow \vec{R}_A - \vec{R}_B = \pm \frac{\vec{a}_2}{2}, \quad (2.37)$$

como pode ser visto na Fig. 16. Substituindo a Eq. (2.37) no termo do somatório da Eq. (2.36), temos que

$$\sum_{\vec{R}_B, \vec{R}_A}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_A - \vec{R}_B)} = \sum_{\vec{R}_B}^N \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2/2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2/2} \right) = 2 \cos \left(\vec{k} \cdot \frac{\vec{a}_2}{2} \right), \quad (2.38)$$

o que nos permite escrever a Eq. (2.36) como

$$H_{BA} = 2t_{BA} \cos \left(\vec{k} \cdot \frac{\vec{a}_2}{2} \right), \quad (2.39)$$

onde

$$t_{BA} = \left\langle \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \left| H \right| \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \right\rangle = \left\langle \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \left| H \right| \varphi_A \left(\vec{r} - \vec{R}_B \mp \frac{\vec{a}_2}{2} \right) \right\rangle, \quad (2.40)$$

representa o parâmetro de *hopping* entre os sítios B e A à distância $|\vec{a}_2/2|$ (ver setas para t_{BA} na Fig. 16).

Analisando agora a contribuição do sítio C com relação ao sítio B

$$\begin{aligned} H_{BC} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_B}^N e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_B} \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \left| H \right| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_C}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_C} \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) \right\rangle, \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_B, \vec{R}_C}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_C - \vec{R}_B)} \langle \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \left| H \right| \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) \rangle. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Usando a aproximação *tight-binding* até segundos vizinhos, temos pela Fig. 16 que a localização dos sítios C com relação ao sítio B é dada por

$$\vec{R}_C = \vec{R}_B \pm \frac{\vec{a}_1}{2} \Rightarrow \vec{R}_C - \vec{R}_B = \pm \frac{\vec{a}_1}{2}. \quad (2.42)$$

Substituindo a Eq. (2.42) no termo do somatório da Eq. (2.41), obtém-se que

$$\sum_{\vec{R}_B, \vec{R}_C}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_C - \vec{R}_B)} = \sum_{\vec{R}_B}^N \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1/2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1/2} \right) = 2 \cos \left(\vec{k} \cdot \frac{\vec{a}_1}{2} \right), \quad (2.43)$$

o que nos permite escrever a Eq. (2.41) como

$$H_{BC} = 2t_{BC} \cos \left(\vec{k} \cdot \frac{\vec{a}_1}{2} \right), \quad (2.44)$$

onde

$$t_{BC} = \langle \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) | H | \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) \rangle = \left\langle \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \left| H \right| \varphi_C \left(\vec{r} - \vec{R}_B \mp \frac{\vec{a}_1}{2} \right) \right\rangle, \quad (2.45)$$

representa o parâmetro de *hopping* entre os sítios B e C à distância $|\vec{a}_1/2|$ (ver setas para t_{BC} na Fig. 16).

Agora analisaremos a contribuição H_{AC} entre os sítios do tipo C com relação aos sítios do tipo B. Para esse caso, temos as contribuições dos átomos localizados nas posições $\pm \frac{(\vec{a}_1 - \vec{a}_2)}{2}$ e $\pm \frac{(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)}{2}$, tal que

$$\begin{aligned} H_{AC} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_A} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_A} \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \left| H \right| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_C} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_C} \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) \right\rangle, \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}_A, \vec{R}_C} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_C - \vec{R}_A)} \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) | H | \varphi_C(\vec{r} - \vec{R}_C) \rangle. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Usando a aproximação *tight-binding* até segundos vizinhos, temos que as localizações dos sítios C com relação ao sítio A são dada por

$$\vec{R}_{C^-} = \vec{R}_A \pm \frac{(\vec{a}_1 - \vec{a}_2)}{2} \Rightarrow \vec{R}_{C^-} - \vec{R}_A = \pm \frac{(\vec{a}_1 - \vec{a}_2)}{2}, \quad (2.47a)$$

$$\vec{R}_{C^+} = \vec{R}_A \pm \frac{(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)}{2} \Rightarrow \vec{R}_{C^+} - \vec{R}_A = \pm \frac{(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)}{2}, \quad (2.47b)$$

como ilustrado pelas setas em verde e vermelha na Fig. 16 para $\vec{R}_{C^-} - \vec{R}_A$ e $\vec{R}_{C^+} - \vec{R}_A$, respectivamente. Substituindo as Eqs. (2.47a) e (2.47b) no termo do somatório da Eq. (2.46), obtém-se que

$$\sum_{\vec{R}_A, \vec{R}_{C^-}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{C^-} - \vec{R}_A)} = \sum_{\vec{R}_A} \left(e^{i\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)/2} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)/2} \right) = 2 \cos \left[\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2) / 2 \right], \quad (2.48a)$$

$$\sum_{\vec{R}_A, \vec{R}_{C^+}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{C^+} - \vec{R}_A)} = \sum_{\vec{R}_A} \left(e^{i\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/2} + e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/2} \right) = 2 \cos \left[\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 + \vec{a}_2) / 2 \right], \quad (2.48b)$$

o que nos permite escrever a Eq. (2.46) como

$$H_{AC} = 2t_{AC}^- \cos \left[\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2) / 2 \right] + 2t_{AC}^+ \cos \left[\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 + \vec{a}_2) / 2 \right], \quad (2.49)$$

onde

$$t_{AC}^- = \left\langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \left| H \right| \varphi_C \left(\vec{r} - \vec{R}_A \mp \frac{(\vec{a}_1 - \vec{a}_2)}{2} \right) \right\rangle, \quad (2.50a)$$

$$t_{AC}^+ = \left\langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \left| H \right| \varphi_C \left(\vec{r} - \vec{R}_A \mp \frac{(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)}{2} \right) \right\rangle, \quad (2.50b)$$

representam os parâmetros de *hopping* entre os sítios A e C^- à distância $|\vec{a}_1 - \vec{a}_2|/2$ e entre os sítios A e C^+ à distância $|\vec{a}_1 + \vec{a}_2|/2$, como ilustrado na Fig. 16.

Desta forma, usando o fato da matriz de transferência ser hermitiana, o que implica em $H_{AB} = H_{BA}^*$, $H_{CB} = H_{BC}^*$, e $H_{CA} = H_{AC}^*$, podemos reduzir a Eq. (2.34) tal como

$$H = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{BA}^* & H_{AC} \\ H_{BA} & H_{BB} & H_{BC} \\ H_{AC}^* & H_{BC}^* & H_{CC} \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

onde os elementos de H são dados por

$$H_{jj} = E_j, \quad (j = A, B, C), \quad (2.52a)$$

$$H_{BA} = 2t_{BA} \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2/2) = H_{AB}, \quad (2.52b)$$

$$H_{BC} = 2t_{BC} \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1/2) = H_{CB}, \quad (2.52c)$$

$$H_{AC} = 2t_{AC}^- \cos[\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)/2] + 2t_{AC}^+ \cos[\vec{k} \cdot (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/2] = H_{CA}. \quad (2.52d)$$

De forma geral para o caso da rede de transição com $\pi/2 \leq \theta \leq 2\pi/3$, podemos reescrever os elementos da matriz *tight-binding* dados nas Eqs. (2.52a)-(2.52d) utilizando os vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 dados em termos dos vetores \hat{v}_1 e \hat{v}_2 de acordo com a Eq. (2.5), isto é, tomando

$$\vec{a}_1 = a\hat{v}_1 \quad \text{e} \quad \vec{a}_2 = a\hat{v}_2, \quad (2.53)$$

nos elementos da matriz (2.52a)-(2.52d), tem-se que

$$H_{jj} = E_j, \quad (j = A, B, C), \quad (2.54a)$$

$$H_{BA} = 2t_{BA} \cos(a_0\vec{k} \cdot \hat{v}_2) = H_{AB}, \quad (2.54b)$$

$$H_{BC} = 2t_{BC} \cos(a_0\vec{k} \cdot \hat{v}_1) = H_{CB}, \quad (2.54c)$$

$$H_{AC} = 2t_{AC}^- \cos[a_0\vec{k} \cdot (\hat{v}_1 - \hat{v}_2)] + 2t_{AC}^+ \cos[a_0\vec{k} \cdot (\hat{v}_1 + \hat{v}_2)] = H_{CA}, \quad (2.54d)$$

assim obtendo todos os elementos da matriz que descreve o Hamiltoniano *tight-binding* para rede genérica em função do momento k e com dependência explícita do parâmetro morfológico θ de interconvencibilidade das redes Lieb-Kagome.

2.4 Espectros de energia para rede infinita

Na seção anterior (Seç. 2.3) descrevemos via modelo *tight-binding* o procedimento teórico para se obter a matriz 3×3 do Hamiltoniano para a rede genérica 2D infinita Lieb-Kagome, onde os elementos da matriz são dados pelas Eqs. (2.54a)-(2.54d). Tais elementos

de matriz são funções explícitas do vetor momento \vec{k} e dos vetores da rede primitiva que por sua vez possuem a dependência com o ângulo θ que expressa a interconvencibilidade das redes Lieb-Kagome. A partir daí, podemos encontrar o espectro de energia diagonalizando o Hamiltoniano obtido para os diferentes valores de \vec{k} dentro da primeira zona de Brillouin. Tal procedimento é equivalente à resolver a equação secular [Eq. (2.32)] para o Hamiltoniano (2.51) com os elementos dados pelas Eqs. (2.54a)-(2.54d). A obtenção via diagonalização dos espectros de energia para casos de Lieb, transição e Kagome na aproximação de primeiros vizinhos é simples e pode ser feita de forma analítica, como apresentada na Ref. (LIMA, 2020).

Mostramos nas Figs. 17, 18, e 19 os espectros de energia das redes de Lieb ($\theta = \pi/2$), transição ($\theta = 7\pi/12$) e Kagome ($\theta = 2\pi/3$), respectivamente, apresentados no formato (a) tridimensional e (b) bidimensional ao longo dos pontos de alta simetria. A análise do espectro apresentado de forma bidimensional [painéis (b) nas Figs. 17, 18, e 19] nos permite verificar o que acontece com as bandas de energia no caminho no espaço recíproco passando pelos pontos de alta simetria. Pela Fig. 17 pode-se observar que o espectro de energia da rede infinita de Lieb é formado por duas bandas dispersivas, que compõem um cone Dirac no ponto \vec{M} na primeira zona de Brillouin e uma terceira banda plana que cruza o ponto de Dirac. Assim, o espectro de energia exibe um ponto triplamente degenerado em \vec{M} , demonstrando uma ausência de *gap* de energia.

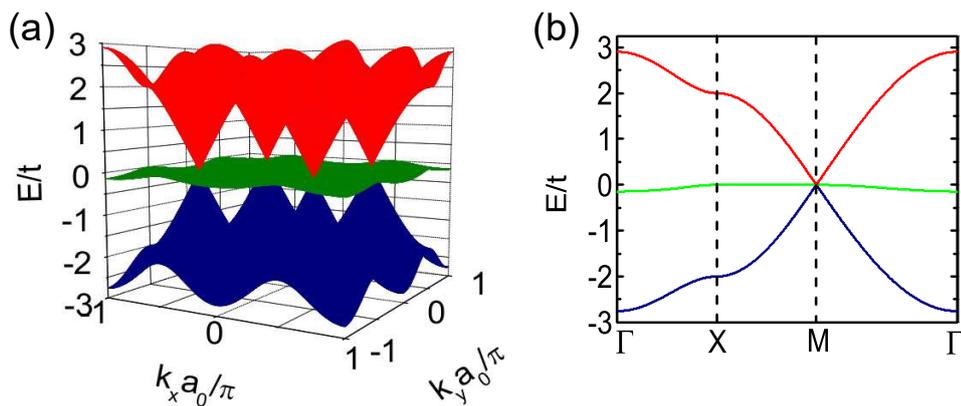


Figura 17 – Espectro eletrônico para rede de Lieb ($\theta = \pi/2$) infinita obtida por meio do cálculo *tight-binding* representado de forma (a) tridimensional e (b) bidimensional ao longo dos pontos de alta simetria.

Pela Fig. 18 do espectro de energia da rede de transição com $\theta = 105^\circ$, pode-se observar um estágio do processo evolutivo das bandas de energia entre as redes de Lieb ($\theta = \pi/2$) e Kagome ($\theta = 2\pi/3$). Nota-se que a banda plana se deformou, originando em dois cones de

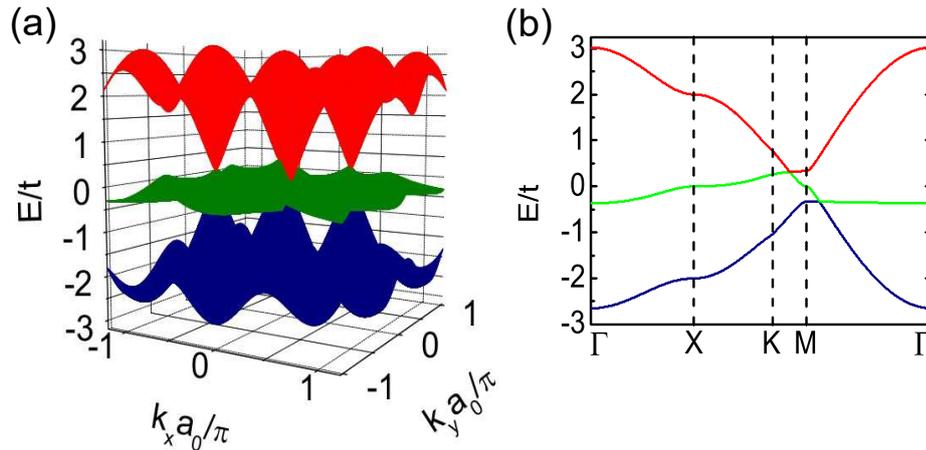


Figura 18 – Espectro eletrônico para rede de transição infinita obtida por meio do cálculo *tight-binding* representado de forma (a) tridimensional e (b) bidimensional ao longo dos pontos de alta simetria. Assumiu-se o valor de $\theta = 105^\circ$.

Dirac inclinados, um deles se move ao longo da direção $\vec{M} - \vec{\Gamma}$ e o outro se move ao longo das direções $\vec{M} - \vec{K}$ à medida que θ aumenta. Esses cones de Dirac formados entre a banda superior e a banda plana, e a banda inferior e a banda plana, são classificados em tipo-I e tipo-II, respectivamente. Isso mostra que o ponto triplamente degenerado na configuração de Lieb no ponto \vec{M} originou dois pontos duplamente degenerados na rede de transição, vindos da deformação da banda plana sem apresentar assim a abertura de *gap*. (JIANG *et al.*, 2019b; LIMA, 2020)

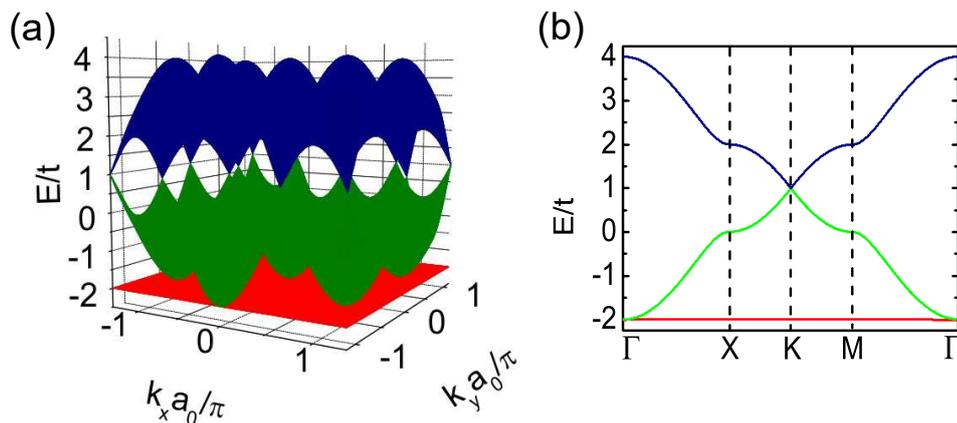


Figura 19 – Espectro eletrônico para rede de Kagome ($\theta = 2\pi/3$) infinita obtida por meio do cálculo *tight-binding* representado de forma (a) tridimensional e (b) bidimensional ao longo dos pontos de alta simetria.

Na Fig. 19 apresenta-se o espectro de energia para a rede de Kagome, onde observa-se duas bandas dispersivas, que compõem um cone de Dirac no ponto \vec{K} , e uma terceira banda não-dispersiva (totalmente plana) distante da energia de Fermi e localizada em $E = -2t$. Assim como os casos anteriores, as bandas de energia da rede de Kagome não apresentam *gap* de energia.

Pelo espectro tridimensional na Fig. 19(a), percebe-se uma forte semelhança entre as bandas dispersivas de Kagome com as bandas de energia do grafeno, que se deve ao formato similar dessas redes, exceto pelo fato de que agora para Kagome tem-se três subredes não-equivalentes, ao contrário das duas para o grafeno, o que leva a existência de três bandas de energia ao invés de duas como no caso do grafeno.

Ao analisar os valores das energias no entorno dos pontos de alta simetria para as redes de Lieb [Fig. 17(b)] e de Kagome [Fig. 19(b)], percebe-se que é no ponto $\vec{\Gamma}$ que estão os valores mais alto e mais baixo de energia. Para rede de Lieb [Fig. 17(b)], nota-se que o ponto \vec{X} corresponde a um ponto de cela e o ponto \vec{M} possui espectro triplamente degenerado. Para a rede de Kagome [Fig. 19(b)], percebe-se que os pontos \vec{X} e \vec{M} correspondem a pontos de cela, e que no ponto \vec{K} tem-se o ponto duplamente degenerado na energia de Fermi e também o valor mais baixo da estrutura de bandas devido a banda plana.

2.5 Interconvertibilidade das redes

Nessa seção discutiremos com mais detalhes a morfologia das redes entre Lieb ($\theta = \pi/2$) e Kagome ($\theta = 2\pi/3$), controladas pelo parâmetro $\pi/2 \leq \theta \leq 2\pi/3$, e suas consequências na evolução das bandas de energia para diferentes valores de θ da rede de transição. Nas Figs. 20, 21, 22, 23, 24, 25, e 26, ilustramos (a) a rede real, (b) a primeira zona de Brillouin no espaço recíproco com as posições dos pontos de alta simetria, e (c) apresentamos as bandas 2D para $\theta = 90^\circ, 95^\circ, 100^\circ, 105^\circ, 110^\circ, 115^\circ$ e 120° , respectivamente, seguindo o caminho no espaço recíproco dado pela linha pontilhada em vermelho nos painéis (b) passando pelos pontos de alta simetria para cada caso.

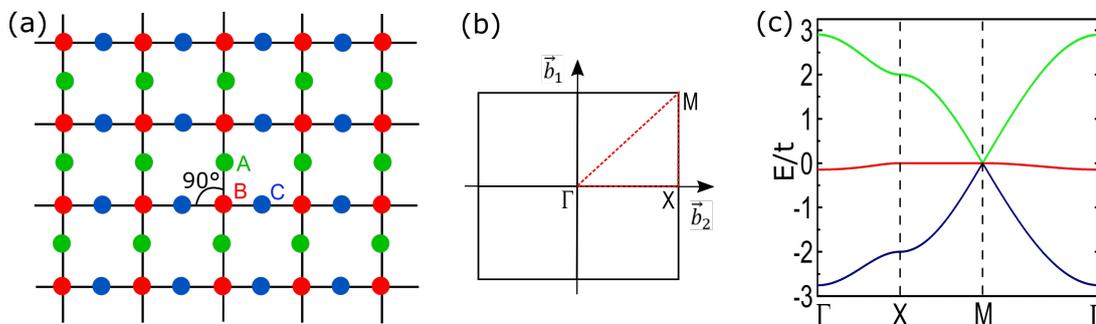


Figura 20 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de Lieb ($\theta = 90^\circ$). (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b).

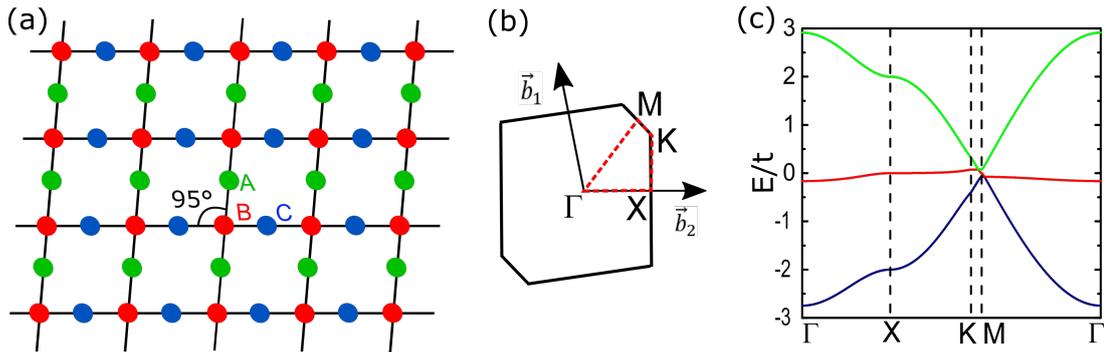


Figura 21 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 95^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b).

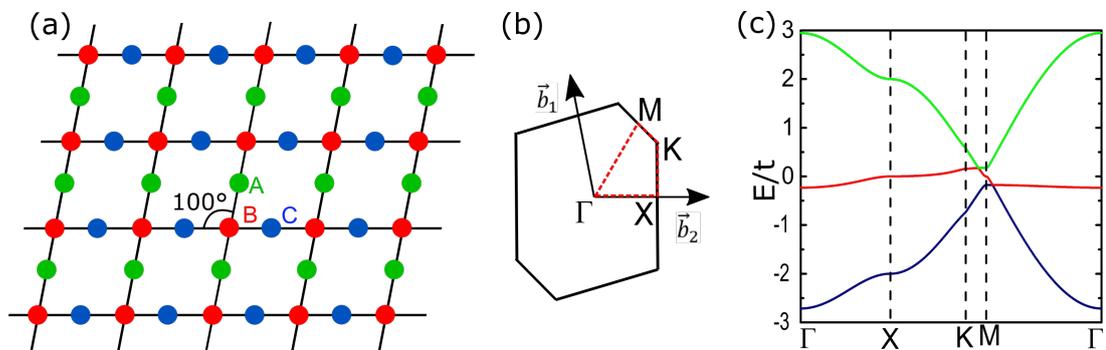


Figura 22 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 100^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b).

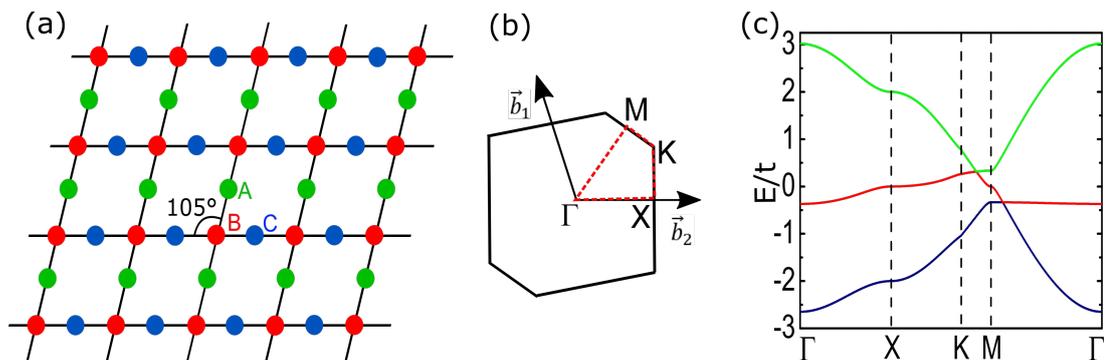


Figura 23 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 105^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b).

Analisando primeiro a evolução estrutural das redes no espaço real e sua consequência no espaço recíproco pelas Figs. 20(a,b), 21(a,b), 22(a,b), 23(a,b), 24(a,b), 25(a,b), e 26(a,b), vê-se que as redes de transição entre as redes de Lieb [Fig. 20] e Kagome [Fig. 26] podem ser alcançadas através de deformações diagonais, como discutido por W. Jiang *et al.* na Ref. (JIANG

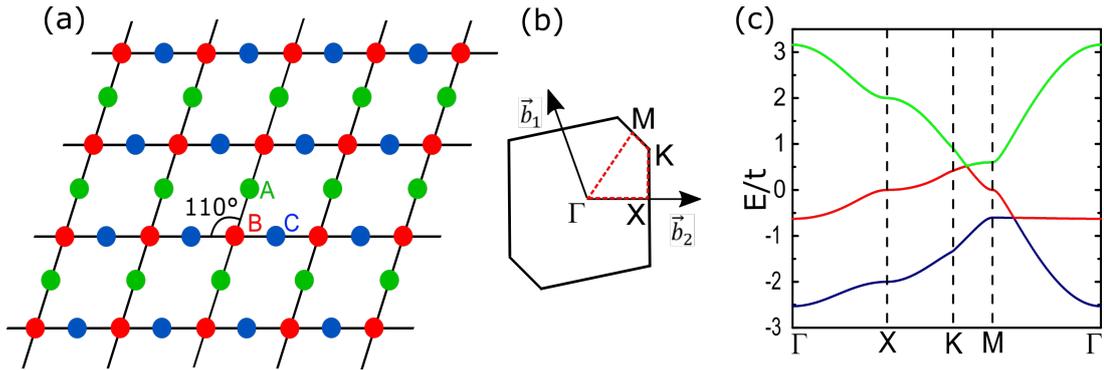


Figura 24 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 110^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b).

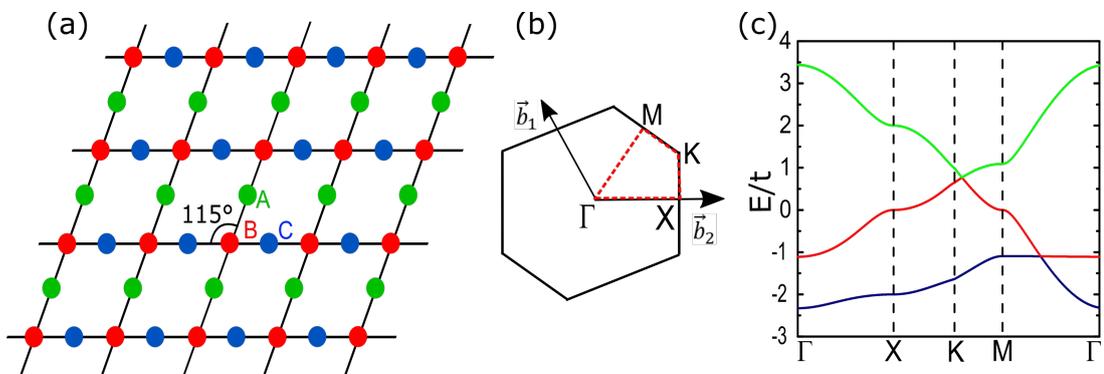


Figura 25 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de transição com $\theta = 115^\circ$. (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b).

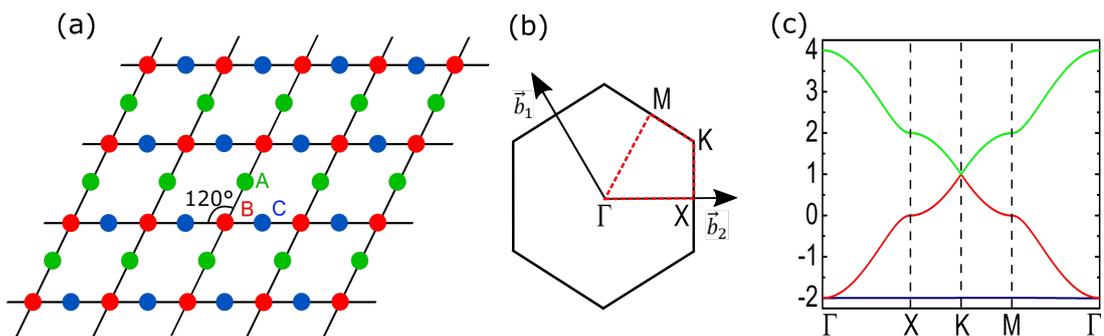


Figura 26 – Ilustração da (a) estrutura da rede no espaço real e (b) da primeira zona de Brillouin no espaço recíproco para a rede de Kagome ($\theta = 120^\circ$). (c) Espectro de energia ao longo dos pontos de alta simetria, tomando o caminho $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$ apresentado na linha pontilhada em vermelho no painel (b).

et al., 2019b) e W. P. Lima na Ref. (LIMA, 2020). Durante essa evolução, algumas ligações que eram de segundos vizinhos passam a ser de primeiros vizinhos, como por exemplo a ligação $A - C$ dentro da mesma célula unitária no caso da rede de Lieb [Fig. 20] que era de segundos vizinhos e passa a ser de primeiros vizinhos no caso da rede de Kagome [Fig. 26], pois a distância

\overline{AC} é a mesma que a distância \overline{AB} e \overline{BC} para a rede de Kagome. Com relação a evolução no espaço recíproco da primeira zona de Brillouin, vemos pelas Figs. 20(b), 21(b), 22(b), 23(b), 24(b), 25(b), e 26(b), que inicialmente ela possui a forma retangular para a rede de Lieb com o caminho triangular (linha vermelha pontilhada) passando pontos de alta simetria $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$, e que para valores de $\theta \neq \pi/2$ e $\theta \neq 2\pi/3$ passa a apresentar a forma de um polígono irregular de seis lados com caminho (linha vermelha pontilhada) na forma de um polígono irregular de quatro lados passando pelos mesmos pontos de alta simetria como no caso anterior mais o ponto \vec{K} , tal como: $\vec{\Gamma} - \vec{X} - \vec{K} - \vec{M} - \vec{\Gamma}$. Para o caso da rede de Kagome [$\theta = 2\pi/3$ - Fig. 26(b)], a zona de Brillouin passa a ser um polígono regular de seis lados, isto é, com formato hexagonal.

Avaliando as Figs. 20, 21, 22, 23, 24, 25, e 26, podemos notar que o espectro de energia apresenta uma evolução de tal forma que a banda plana se deforma levando a uma quebra de degenerescência, mas sem abertura de *gap*. Nota-se em estágios evolutivos nesse processo que o ponto triplamente degenerado localizado em \vec{M} do espaço recíproco leva a dois pontos duplamente degenerados conectando as bandas superior e inferior com a banda plana-deformada, até a situação em que o cone de Dirac tipo-II (formado entre a banda inferior e a plana-deformada) deixa de existir, dando lugar a uma banda totalmente plana para todos os valores de \vec{k} no espaço recíproco para o caso da rede de Kagome.

De acordo com W. Jiang *et al.* (JIANG *et al.*, 2019b), essa transição morfológica entre as redes de Lieb e Kagome preserva a simetria de inversão de tal forma que conserva as características topológicas (curvatura de Berry, centro de carga de Wannier e estados de borda) mesmo apresentando deformação da banda plana no nível de Fermi no caso de Lieb até o surgimento de banda plana abaixo (acima) das bandas dispersivas para $t < 0$ ($t > 0$) no caso de Kagome. Isso se dá pelo fato de que transições de fase topológicas são caracterizadas por mudanças dos invariantes topológicos das bandas de energia, evidenciados pela abertura e fechamento do *gap* de energia. Como discutimos anteriormente, em nenhum momento do estágio evolutivo das bandas de Lieb até Kagome observou-se a abertura do *gap* de energia.

2.6 Efeito da quebra de simetria de subrede

Todos os resultados apresentados na seção anterior (Seç. 2.5) são para o caso em que as energias *on-site* para as três subredes não-equivalentes são nulas, isto é, para $H_{AA} = E_A = 0$, $H_{BB} = E_B = 0$, e $H_{CC} = E_C = 0$ para os elementos da diagonal principal [Eq. (2.54a)] da matriz Hamiltoniana (2.51) referentes aos sítios A , B e C , respectivamente.

Na presente seção, vamos discutir as situações em que as energias *on-site* são não-nulas, isto é, vamos verificar os efeitos da quebra de simetria de subrede induzida por valores diferentes e não-nulos de E_j para as diferentes subredes ($j = A, B, C$) não-equivalentes para os casos das redes de Lieb, transição e Kagome. Consideraremos nove combinações distintas para as energias *on-site*, dadas a seguir:

– 1^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\delta & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

– 2^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & -\delta & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

– 3^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & -\delta \end{pmatrix}, \quad (2.57)$$

– 4^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad (2.58)$$

– 5^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

– 6^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.60)$$

– 7^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\delta & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad (2.61)$$

– 8^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad (2.62)$$

– 9^a configuração:

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\delta & 0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.63)$$

Existem formas experimentais de induzir a quebra de simetria de subrede, por exemplo, devido a substrato (COSTA *et al.*, 2017). Temos então que, δ é o potencial de massa no local induzido pelo substrato, que pode ser visto como um termo relacionado à massa dentro do modelo contínuo e aparece como um potencial escalonado dependente do local δ_i na abordagem *tight-binding*, tal que δ_i é positivo (negativo) se pertencer à sub-rede i ($j \neq i$) (ZHOU *et al.*, 2007; WANG *et al.*, 2015). Este truque é normalmente usado para abrir uma lacuna no espectro de energia do grafeno e, conseqüentemente, para simular o confinamento eletrônico em nanoestruturas de grafeno (NEVIUS *et al.*, 2015; WURM *et al.*, 2009).

Antes de discutirmos cada uma das configurações acima para quebra de simetria de subrede, note que as duas configurações abaixo

$$\begin{pmatrix} E_A & 0 & 0 \\ 0 & E_B & 0 \\ 0 & 0 & E_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm\delta & 0 & 0 \\ 0 & \pm\delta & 0 \\ 0 & 0 & \pm\delta \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

em que todos os elementos diagonais são iguais à $+\delta$ ou à $-\delta$ não implicam em uma quebra de simetria de subrede, e sim por sua vez apenas causam uma translação energética nos espectros de energia de $+\delta$ e $-\delta$. Dessa forma, a configuração da Eq. (2.64) corresponde a aplicação de um campo elétrico perpendicular ao plano do material 2D, o que leva a um deslocamento do nível de Fermi sem apresentar abertura de *gap*.

Os espectros das redes infinitas 2D para de Lieb, transição e Kagome para essas diferentes combinações de energia *on-site* são mostrados na Fig. 27 para a 1^a [Eq. (2.55)], 2^a [Eq. (2.56)], 3^a [Eq. (2.57)], a 4^a [Eq. (2.58)], 5^a [Eq. (2.59)], 6^a [Eq. (2.60)], a 7^a [Eq. (2.61)], 8^a [Eq. (2.62)], e 9^a [Eq. (2.63)] combinações. As curvas pretas representam o caso da energia *on-site* nula, isto é, com $\delta = 0$, as curvas azuis representam o caso da energia *on-site* positiva com $\delta = t$, e as curvas vermelhas representam o caso negativo com energia *on-site* $\delta = -t$. A coluna da esquerda, do meio, e da direita correspondem aos casos das redes de Lieb, transição e Kagome, respectivamente.

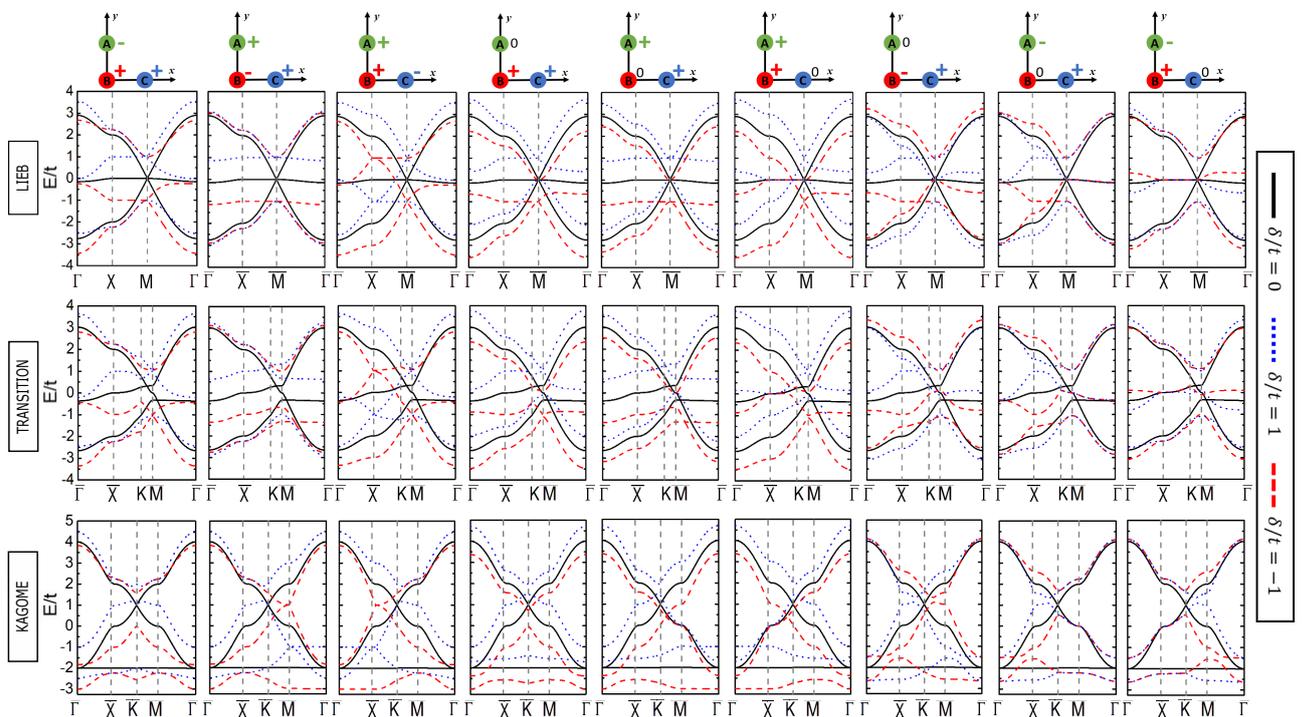


Figura 27 – Espectro de energia das redes infinita 2D de Lieb (à cima), transição (ao meio), e Kagome (à baixo) na presença de diferentes combinações de energias *on-site*. A primeira, a segunda, e a terceira linha de painéis correspondem às 9 configurações, com termos de energia *on-site* dados pelas Eqs. (2.55), (2.56), e (2.57), respectivamente.

Na 1^a configuração, temos abertura de *gap* no espectro de Kagome, enquanto que, para Lieb e transição, a banda plana se junta com a banda de cima para energia *on-site* positiva e se junta com a banda de baixo para o caso negativo. Na 2^a configuração, temos que, para energia *on-site* positiva, a banda plana se junta com a banda de cima para Lieb e se junta com a de baixo para Kagome, e temos abertura de *gap* para a rede de transição. Para o caso de *on-site* negativa, se tem um espelho da situação positiva. Na 3^a configuração não temos abertura de *gap* para Lieb e transição, no entanto, para Kagome a banda plana se junta com a banda de baixo para o caso positivo e de junta com a de cima para o caso negativo.

Na 4^a configuração, temos abertura de *gap* no espectro das redes de transição e Kagome. Para Lieb a banda plana se junta com a banda de cima para energia *on-site* positiva e se junta com a banda de baixo para o caso negativo. Na 5^a configuração, a banda plana se junta com a banda de cima para energia *on-site* positiva e se junta com a banda de baixo para o caso negativo para Lieb e transição, enquanto que, em Kagome ocorre o contrário. Na 6^a configuração, temos abertura de *gap* apenas para a rede de transição, para Lieb não há *gap*, e para Kagome temos a junção da banda plana com a banda de baixo apenas para o caso positivo.

Nas 7^a e 8^a configurações, observa-se a abertura de *gap* para as redes de transição e Kagome, para Lieb temos uma deformação na banda plana e uma separação da banda de baixo no caso da energia *on-site* positiva, e uma separação da banda de cima no caso negativo. Por fim, na 9^a configuração, temos abertura de *gap* no espectro das três redes.

3 MODELO *TIGHT-BINDING* PARA NANOFITAS DE LIEB, TRANSIÇÃO E KAGOME

Neste capítulo iremos apresentar os aspectos cristalográficos da construção das nanofitas genéricas, que descrevem as redes de Lieb, transição e Kagome, tais como célula unitária, contagem de linhas, e os três tipos diferentes de bordas investigados: reta, barbada e assimétrica. Para cada caso, calcularemos as relações de dispersão das nanofitas e suas densidades de estados. Discutiremos os aspectos morfológicos à luz do espectro de energia das nanofitas ao variar-se o parâmetro de controle, θ , entre as redes de Lieb e Kagome. Em seguida estudaremos para cada tipo de nanofita, o efeito de se considerar segundos vizinhos dentro do modelo *tight-binding*, em especial a quebra da degenerescência da banda plana, e por fim os efeitos das quebra de simetria de subrede.

3.1 Nanofitas genéricas

Dentro da abordagem descrita no capítulo anterior (Cap. 2) para a rede genérica (Fig. 16), cuja modelagem matemática captura a questão morfológica entre as redes de Lieb e Kagome através apenas de um parâmetro de controle θ [Fig. 28(a)], apresentaremos a construção de nanofitas de Lieb, transição e Kagome, considerando três tipos de terminações: (i) borda reta [Fig. 28(b)], (ii) borda barbada [Fig. 28(b)] e (iii) borda assimétrica [Fig. 28(c)]¹.

Nas Figs. 28(b), 28(c), e 28(d) representamos as três diferentes nanofitas investigadas, apresentando como se dá a contagem de linhas, a terminação estrutural das bordas, e a célula unitária (linha cinza tracejada) para cada caso. Nestas ilustrações, consideramos as nanofitas com simetria de translação ao longo do eixo horizontal (eixo x). A borda reta [Fig. 28(b)] é caracterizada por sua primeira e última linha sendo formadas por sítios dos tipos B e C . Caso tivéssemos considerado a direção vertical (eixo y) como sendo a direção com simetria de translação da nanofita, teríamos que as bordas retas seriam formadas pelas subredes A e B . Para o caso da borda barbada [Fig. 28(c)], temos que sua primeira e última linha são formadas por sítios do tipo A . Aqui, vemos que se a direção vertical (eixo y) fosse a direção com simetria de translação da nanofita, teríamos que as bordas barbadas seriam formadas pela subrede do tipo C . Por fim, para o caso da borda assimétrica [Fig. 28(d)], temos a composição das duas bordas anteriores, isto é, um lado da nanofita possui borda reta e o outro lado possui terminação do

¹ A descrição dos *hoppings* considerados dentro do modelo *tight-binding* para as nanofitas genéricas será discutida na próxima seção (Seç. 3.2).

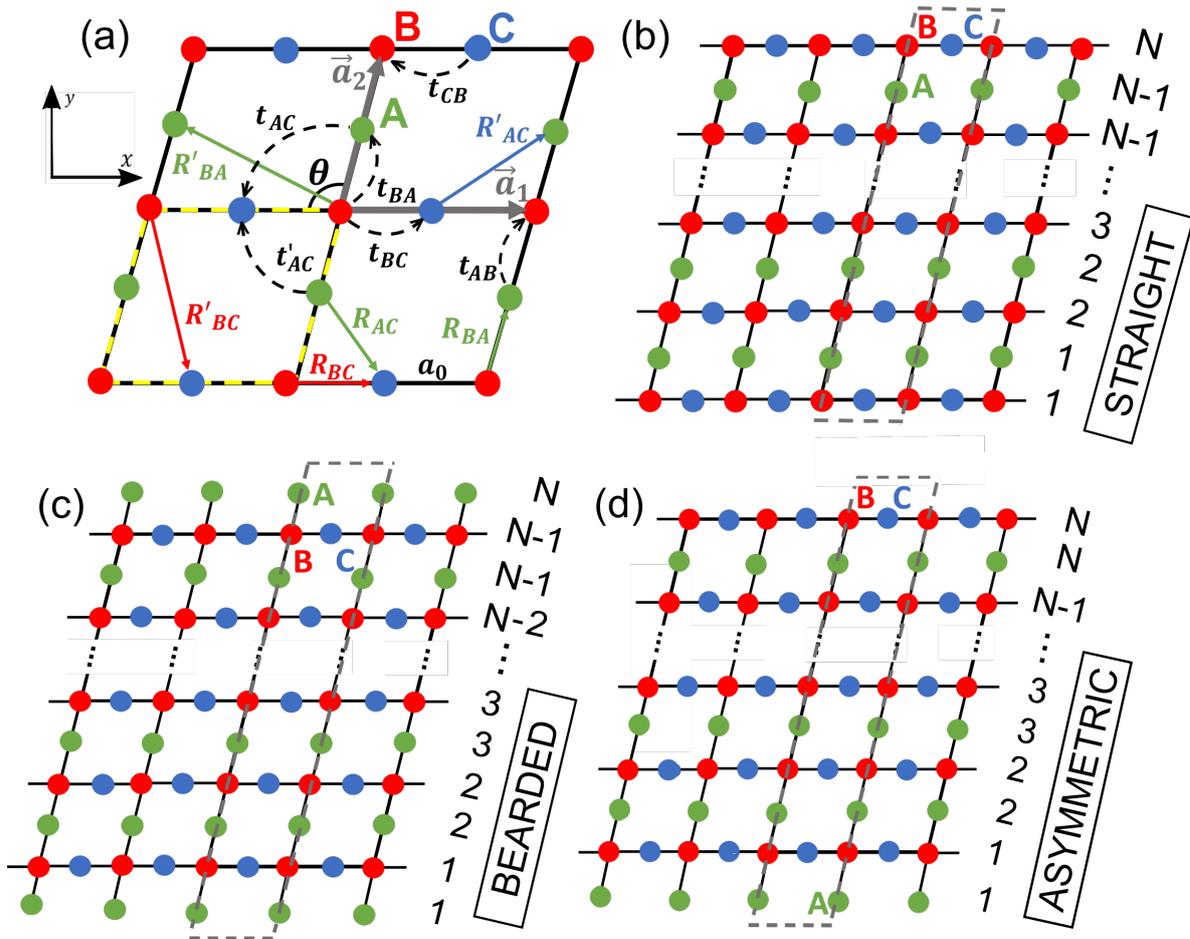


Figura 28 – (a) Representação esquemática da rede genérica controlada pelo parâmetro θ , correspondente à rede de Lieb para $\theta = \pi/2$, rede de transição para $\pi/2 < \theta < 2\pi/3$ e rede de Kagome para $\theta = 2\pi/3$. \vec{a}_1 e \vec{a}_2 são os vetores primitivos com célula unitária denotada pela linha tracejada amarela contendo três sítios não equivalentes A (verde), B (vermelho) e C (azul). A distância entre os sítios vizinhos mais próximos é a_0 e os parâmetros de *hopping* não-nulos são representados por t_{BA} , t_{BC} , t_{AC}^- , t_{AC}^+ . Para redes de Lieb e Kagome, o *hopping* do vizinho mais próximo é $t_{BA} = t_{BC} = t$ e $t_{AC}^- = t_{AC}^+ = t'$, respectivamente. Esboços de nanofitas genéricas com bordas (b) retas, (c) barbadas e (d) assimétricas, enfatizando suas células unitárias (linhas tracejadas cinzas), terminação das bordas e a contagem de linhas em cada caso.

tipo barbado. Dessa maneira, tem-se que a primeira linha de átomos da nanofita é formada por subredes do tipo A e sua última linha formada com subredes do tipo B e C, enquanto que no caso da simetria de translação sendo o eixo vertical, as bordas assimétricas seriam formadas por subredes do tipo A e B no lado da borda reta, e seriam formadas pela subrede do tipo C do lado da borda barbada.

Vamos agora analisar a contagem do número de linhas, de acordo como esquematizado na Fig. 28. Note que para o caso da borda barbada [Fig. 28(c)], temos $N_A = \frac{n+1}{2}$ e $N_B = N_C = \frac{N-1}{2}$, onde N_A , N_B e N_C correspondem aos números de linhas dos sítios A, B e C, respectivamente. N corresponde ao número total de linhas que define o tamanho da fita. Já para

o caso da borda reta [Fig. 28(b)], temos $N_A = \frac{n-1}{2}$ e $N_B = N_C = \frac{N-1}{2}$. Finalmente, para o caso da borda assimétrica [Fig. 28(d)], onde a primeira linha é composta apenas por sítios do tipo A, e a última linha é composta por sítios do tipo B e C, temos que $N_A = N_B = N_C = \frac{N}{2}$. Vale ressaltar que N é sempre ímpar no caso de bordas retas ou barbadadas. Para bordas assimétricas, por outro lado, N é necessariamente um número par.

3.2 Hamiltoniano *tight-binding* para nanofitas genéricas

Para desenvolvermos o modelo *tight-binding* que calcule o espectro de energia e funções de onda de nanofitas de Lieb, transição e Kagome, partimos do Hamiltoniano *tight-binding* de uma rede bidimensional com três sítios na base, escrito na linguagem de segunda quantização,

$$H = \sum_{i,j} t_{i,j} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i) + \sum_{j,m} t_{j,m} (b_j^\dagger c_m + c_m^\dagger b_j) + \sum_{i,m} t_{i,m} (a_i^\dagger c_m + c_m^\dagger a_i), \quad (3.1)$$

onde $d_i = a_i, b_i, c_i$ e $d_j^\dagger = a_j^\dagger, b_j^\dagger, c_j^\dagger$ são operadores que destroem e criam elétrons nos sítios i e j , respectivamente. $t_{i,j}$ são parâmetros de *hopping* que obedecem a seguinte relação,

$$t_{i,j} = t e^{-n(a_{ij}/a_0 - 1)} a_0 / a_{ij}, \quad n = 8, \quad (3.2)$$

com a_{ij} representando a distância entre os sítios i e j do tipo A, B ou C da rede genérica e t é o valor do parâmetro de *hopping* correspondente à distância entre os primeiros vizinhos na rede genérica, ou seja, a_0 [ver Fig. 28(a)]. O valor assumido de $n = 8$ na Eq. (3.2) governa os parâmetros de *hopping* de tal forma que distâncias maiores que a_0 se tornem desprezíveis, levando a um modelo *tight-binding* efetivo de primeiros vizinhos, para os casos particulares de Lieb ($\theta = \pi/2$) e Kagome ($\theta = 2\pi/3$).

Como a estrutura de nanofitas é caracterizada pelo número de linhas, é conveniente escrever nossos operadores na base de Fourier, tal como

$$d_i = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{k_x} \sum_n e^{ik_x r_{xi}} d_{k_x, n}, \quad (3.3a)$$

e

$$d_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{k'_x} \sum_{n'} e^{ik'_x r_{xj}} d_{k'_x, n'}^\dagger, \quad (3.3b)$$

com N_c representando o número de células unitárias ao longo da direção x , na qual a simetria de translação é mantida. Vale mencionar que $d_{k_x, n} (d_{k'_x, n'}^\dagger)$ destrói (cria) um elétron com momento

$\hbar k_x(\hbar k'_x)$ no sítio do tipo d na linha $n(n')$. Substituindo as Eqs. (3.3a) e (3.3b) na Eq. (3.1), temos

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{i,j} \frac{t_{i,j}}{N_c} \left(\sum_{k_x, k'_x} \sum_{n, n'} e^{-ik_x r_{x_i}} e^{ik'_x r_{x_j}} a_{k_x, n}^\dagger b_{k'_x, n'} + e^{-ik'_x r_{x_j}} e^{ik_x r_{x_i}} b_{k'_x, n'}^\dagger a_{k_x, n} \right) + \\
& \sum_{j,m} \frac{t_{j,m}}{N_c} \left(\sum_{k'_x, k''_x} \sum_{n', n''} e^{-ik'_x r_{x_j}} e^{ik''_x r_{x_m}} b_{k'_x, n'}^\dagger c_{k''_x, n''} + e^{-ik''_x r_{x_m}} e^{ik'_x r_{x_j}} c_{k''_x, n''}^\dagger b_{k'_x, n'} \right) + \\
& \sum_{i,m} \frac{t_{i,m}}{N_c} \left(\sum_{k_x, k'_x} \sum_{n, n'} e^{-ik_x r_{x_i}} e^{ik'_x r_{x_j}} a_{k_x, n}^\dagger c_{k'_x, n'} + e^{-ik'_x r_{x_j}} e^{ik_x r_{x_i}} c_{k'_x, n'}^\dagger a_{k_x, n} \right).
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Multiplicando pelo fator

$$e^{-ik'_x r_{x_i}} e^{ik'_x r_{x_i}} = 1, \tag{3.5}$$

e organizando os termos, obtemos

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{i,j} \frac{t_{i,j}}{N_c} \sum_{k_x, k'_x} \sum_{n, n'} e^{i(k'_x - k_x) r_{x_i}} e^{ik'_x (r_{x_j} - r_{x_i})} a_{k_x, n}^\dagger b_{k'_x, n'} + \\
& \sum_{i,j} \frac{t_{i,j}}{N_c} \sum_{k_x, k'_x} \sum_{n, n'} e^{-i(k'_x - k_x) r_{x_j}} e^{ik_x (r_{x_i} - r_{x_j})} b_{k'_x, n'}^\dagger a_{k_x, n} + \\
& \sum_{j,m} \frac{t_{j,m}}{N_c} \sum_{k'_x, k''_x} \sum_{n', n''} e^{i(k''_x - k'_x) r_{x_j}} e^{ik''_x (r_{x_m} - r_{x_j})} b_{k'_x, n'}^\dagger c_{k''_x, n''} + \\
& \sum_{j,m} \frac{t_{j,m}}{N_c} \sum_{k'_x, k''_x} \sum_{n', n''} e^{-i(k''_x - k'_x) r_{x_m}} e^{ik'_x (r_{x_j} - r_{x_m})} c_{k''_x, n''}^\dagger b_{k'_x, n'} + \\
& \sum_{i,m} \frac{t_{i,m}}{N_c} \sum_{k_x, k'_x} \sum_{n, n'} e^{i(k''_x - k_x) r_{x_i}} e^{ik''_x (r_{x_m} - r_{x_i})} a_{k_x, n}^\dagger c_{k'_x, n'} + \\
& \sum_{i,m} \frac{t_{i,m}}{N_c} \sum_{k_x, k'_x} \sum_{n, n'} e^{-i(k''_x - k_x) r_{x_m}} e^{ik_x (r_{x_m} - r_{x_i})} c_{k'_x, n'}^\dagger a_{k_x, n}.
\end{aligned} \tag{3.6}$$

No primeiro termo do lado direito da Eq. (3.6), vamos fixar a origem em um sítio i do tipo A, fazendo j variar sobre os primeiros vizinhos de B. No segundo termo vamos fixar a origem em um sítio j do tipo B, fazendo i variar sobre os primeiros vizinhos de A. No terceiro termo vamos fixar a origem em um sítio j do tipo B, fazendo m variar sobre os primeiros vizinhos de C. No quarto termo vamos fixar a origem em um sítio m do tipo C, fazendo i variar sobre os primeiros vizinhos de B. No quinto termo vamos fixar a origem em um sítio i do tipo A, fazendo m variar sobre os primeiros vizinhos de C. No sexto termo vamos fixar a origem em um sítio m do tipo C,

fazendo i variar sobre os primeiros vizinhos de A. Após esse procedimento, obtemos

$$\begin{aligned}
H = & \sum_i \frac{t_i}{N_c} \sum_{k_x, k'_x, n, n'} e^{i(k'_x - k_x)r_{x_i}} (\delta_{n, n'+1} + \delta_{n, n'}) a_{k_x, n}^\dagger b_{k'_x, n'} + \\
& \sum_j \frac{t_j}{N_c} \sum_{k_x, k'_x, n, n'} e^{-i(k'_x - k_x)r_{x_j}} (\delta_{n', n} + \delta_{n', n-1}) b_{k'_x, n'}^\dagger a_{k_x, n} + \\
& \sum_j \frac{t_j}{N_c} \sum_{k'_x, k''_x, n', n''} e^{i(k'_x - k''_x)r_{x_j}} (\delta_{n', n''} e^{-ik''_x a/2} + \delta_{n', n''} e^{ik''_x a/2}) b_{k'_x, n'}^\dagger c_{k''_x, n''} + \\
& \sum_m \frac{t_m}{N_c} \sum_{k'_x, k''_x, n', n''} e^{-i(k'_x - k''_x)r_{x_m}} (\delta_{n', n''} e^{-ik''_x a/2} + \delta_{n', n''} e^{ik''_x a/2}) c_{k''_x, n''}^\dagger b_{k'_x, n'} + \\
& \sum_i \frac{t_i}{N_c} \sum_{k_x, k'_x, n, n'} e^{i(k'_x - k_x)r_{x_i}} (\delta_{n, n''} e^{-ik''_x a/2} + \delta_{n, n''} e^{ik''_x a/2}) a_{k_x, n}^\dagger c_{k''_x, n''} + \\
& \sum_m \frac{t_m}{N_c} \sum_{k_x, k'_x, n, n''} e^{-i(k'_x - k_x)r_{x_m}} (\delta_{n, n''} e^{-ik''_x a/2} + \delta_{n, n''} e^{ik''_x a/2}) c_{k''_x, n''}^\dagger a_{k_x, n}.
\end{aligned} \tag{3.7}$$

No presente modelo, abrimos a soma da Eq. (3.7) considerando uma aproximação *tight-binding* que admite apenas parâmetros de *hoppings* que correspondem à interação entre sítios localizados em linhas vizinhas definidas pelos vetores $\vec{R}_{BA} = \vec{a}_2/2$, $\vec{R}'_{BA} = (\vec{a}_2/2 - \vec{a}_1)$, $\vec{R}_{BC} = \vec{a}_1/2$, $\vec{R}'_{BC} = (\vec{a}_1/2 - \vec{a}_2)$, $\vec{R}_{AC} = (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)/2$ e $\vec{R}'_{AC} = (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/2$ [ver Fig. 28(a)], bem como os respectivos vetores opostos que preservam as distâncias entre os sítios correspondentes. Adotando essa abordagem e introduzindo a função delta de Kronecker,

$$\delta_{k_x, k'_x} = \frac{1}{N_c} \sum_i e^{i(k_x - k'_x)r_{x_i}}, \tag{3.8}$$

obtemos o seguinte Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
H = & \sum_{k_x} \sum_{n, n'} (t_{BA} e^{-i\vec{R}_{BA} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n'+1} + t_{BA} e^{i\vec{R}'_{BA} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n'}) a_{k_x, n}^\dagger b_{k'_x, n'} + \\
& \sum_{k_x} \sum_{n, n'} (t'_{BA} e^{i\vec{R}'_{BA} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n'} + t_{BA} e^{-i\vec{R}'_{BA} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n'-1}) b_{k'_x, n'}^\dagger a_{k_x, n} + \\
& \sum_{k'_x} \sum_{n', n''} (t_{BC} e^{-i\vec{R}_{BC} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n'} + t_{BC} e^{i\vec{R}_{BC} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n'}) b_{k'_x, n'}^\dagger c_{k''_x, n''} + \\
& \sum_{k'_x} \sum_{n', n''} (t'_{BC} e^{i\vec{R}'_{BC} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n'+1} + t'_{BC} e^{-i\vec{R}'_{BC} \cdot \vec{K}} \delta_{n', n-1}) c_{k''_x, n''}^\dagger b_{k'_x, n'} + \\
& \sum_{k_x} \sum_{n, n''} (t_{AC} e^{i\vec{R}_{AC} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n} + t'_{BC} e^{-i\vec{R}'_{BA} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n'}) a_{k_x, n}^\dagger c_{k_x, n''} + \\
& \sum_{k_x} \sum_{n, n''} (t_{AC} e^{-i\vec{R}_{AC} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n+1} + t'_{AC} e^{i\vec{R}'_{AC} \cdot \vec{K}} \delta_{n, n+1}) c_{k_x, n''}^\dagger a_{k_x, n},
\end{aligned} \tag{3.9}$$

onde $\vec{K} = (K, 0)$.

É notório que podemos identificar os seguintes elementos matriciais para o caso das nanofitas com bordas retas:

$$\begin{aligned} \tau_{n,n'}^{AB} &= \delta_{n,n'}(t_{BA}e^{-i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t'_{BA}e^{-i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n,n'-1}(t_{BA}e^{i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t'_{BA}e^{i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}), \end{aligned} \quad (3.10a)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n,n'}^{BA} &= \delta_{n,n'}(t_{BA}e^{i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t'_{BA}e^{i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n,n'+1}(t_{BA}e^{-i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t'_{BA}e^{-i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}), \end{aligned} \quad (3.10b)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n,n''}^{AC} &= \delta_{n,n''}(t_{AC}e^{i\vec{R}_{AC}\cdot\vec{K}} + t'_{AC}e^{-i\vec{R}'_{AC}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n,n''-1}(t_{AC}e^{-i\vec{R}_{AC}\cdot\vec{K}} + t'_{AC}e^{i\vec{R}'_{AC}\cdot\vec{K}}), \end{aligned} \quad (3.10c)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n,n''}^{CA} &= \delta_{n,n''}(t_{AC}e^{-i\vec{R}_{AC}\cdot\vec{K}} + t'_{AC}e^{i\vec{R}'_{AC}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n''+1}(t_{AC}e^{i\vec{R}_{AC}\cdot\vec{K}} + t'_{AC}e^{-i\vec{R}'_{AC}\cdot\vec{K}}), \end{aligned} \quad (3.10d)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n',n''}^{BC} &= \delta_{n',n''}(t_{BC}e^{i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t_{BA}e^{-i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n',n''-1}t'_{BA}e^{-i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}} + \delta_{n',n''+1}t'_{BA}e^{i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}, \end{aligned} \quad (3.10e)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n',n''}^{CB} &= \delta_{n',n''}(t_{BC}e^{-i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t_{BA}e^{i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n'',n'-1}t'_{BA}e^{-i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}} + \delta_{n'',n'+1}t'_{BA}e^{i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}. \end{aligned} \quad (3.10f)$$

Para o caso das nanofitas com bordas barbadas e assimétricas, temos os seguintes elementos matriciais:

$$\begin{aligned} \tau_{n,n'}^{AB} &= \delta_{n,n'}(t_{BA}e^{i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t'_{BA}e^{i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n,n'+1}(t_{BA}e^{-i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t'_{BA}e^{-i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}), \end{aligned} \quad (3.11a)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n,n'}^{BA} &= \delta_{n,n'}(t_{BA}e^{-i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t'_{BA}e^{-i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n,n'-1}(t_{BA}e^{i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t'_{BA}e^{i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}), \end{aligned} \quad (3.11b)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n,n''}^{AC} &= \delta_{n,n''}(t_{AC}e^{-i\vec{R}_{AC}\cdot\vec{K}} + t'_{AC}e^{i\vec{R}'_{AC}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n,n''+1}(t_{AC}e^{i\vec{R}_{AC}\cdot\vec{K}} + t'_{AC}e^{-i\vec{R}'_{AC}\cdot\vec{K}}), \end{aligned} \quad (3.11c)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n,n''}^{CA} &= \delta_{n,n''}(t_{AC}e^{i\vec{R}_{AC}\cdot\vec{K}} + t'_{AC}e^{-i\vec{R}'_{AC}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n,n''-1}(t_{AC}e^{-i\vec{R}_{AC}\cdot\vec{K}} + t'_{AC}e^{i\vec{R}'_{AC}\cdot\vec{K}}), \end{aligned} \quad (3.11d)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n',n''}^{BC} &= \delta_{n',n''}(t_{BC}e^{i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t_{BA}e^{-i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n',n''-1}t'_{BA}e^{-i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}} + \delta_{n',n''+1}t'_{BA}e^{i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}, \end{aligned} \quad (3.11e)$$

$$\begin{aligned} \tau_{n',n''}^{CB} &= \delta_{n',n''}(t_{BC}e^{-i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}} + t_{BA}e^{i\vec{R}_{BA}\cdot\vec{K}}) \\ &+ \delta_{n'',n'-1}t'_{BA}e^{-i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}} + \delta_{n'',n'+1}t'_{BA}e^{i\vec{R}'_{BA}\cdot\vec{K}}. \end{aligned} \quad (3.11f)$$

Dessa forma, $\tau_{n,n'}^{ij}$, com $i, j = (A, B, C)$, correspondem aos elementos das matrizes $T^{AB}, T^{BA}, T^{BC}, T^{CB}, T^{AC}$ e T^{CA} , determinados para cada tipo de terminação de nanofita adotada.

Desse modo, chegamos ao seguinte Hamiltoniano

$$\begin{aligned} H = & \sum_{k_x} \sum_{n,n'} (\tau_{n,n'}^{AB} a_{k_x,n}^\dagger b_{k_x',n'} + \tau_{n',n}^{BA} b_{k_x',n'}^\dagger a_{k_x,n}) + \\ & \sum_{k_x'} \sum_{n',n''} (\tau_{n',n''}^{BC} b_{k_x',n'}^\dagger c_{k_x',n''} + \tau_{n'',n'}^{CB} c_{k_x',n''}^\dagger b_{k_x',n'}) + \\ & \sum_{k_x} \sum_{n,n''} (\tau_{n,n''}^{AC} a_{k_x,n}^\dagger c_{k_x,n''} + \tau_{n'',n}^{CA} c_{k_x,n''}^\dagger a_{k_x,n}). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Uma forma de obtermos o espectro de H é aplicar a equação de Heisenberg para os operadores $a_{k_x,n}, b_{k_x,n}$ e $c_{k_x,n}$. A relação de comutação entre os operadores e H deriva a seguinte relação:

$$\begin{aligned} [a_{k_x,n}, H] &= \sum_{\bar{k}_x} \sum_{\bar{n}, \bar{n}'} \tau_{\bar{n}, \bar{n}'}^{AB} [a_{k_x,n}, a_{\bar{k}_x, \bar{n}}^\dagger] b_{\bar{k}_x, \bar{n}'} + \sum_{\bar{k}_x} \sum_{\bar{n}, \bar{n}'} \tau_{\bar{n}, \bar{n}'}^{AC} [a_{k_x,n}, a_{\bar{k}_x, \bar{n}}^\dagger] c_{\bar{k}_x, \bar{n}'}, \\ &= \sum_{\bar{k}_x} \sum_{\bar{n}, \bar{n}'} \tau_{\bar{n}, \bar{n}'}^{AB} \delta_{k_x, \bar{k}_x} \delta_{n, \bar{n}} b_{\bar{k}_x, \bar{n}'} + \sum_{\bar{k}_x} \sum_{\bar{n}, \bar{n}'} \tau_{\bar{n}, \bar{n}'}^{AC} \delta_{k_x, \bar{k}_x} \delta_{n, \bar{n}} c_{\bar{k}_x, \bar{n}'}, \\ &= \sum_{n'} \tau_{n,n'}^{AB} b_{k_x, n'} + \sum_{n'} \tau_{n,n'}^{AC} c_{k_x, n'}, \\ &= \sum_{n'=1}^{N_B} \tau_{n,n'}^{AB} b_{k_x, n'} + \sum_{n'=1}^{N_C} \tau_{n,n'}^{AC} c_{k_x, n'}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Realizando o mesmo procedimento para os operadores $b_{k_x,n}$ e $c_{k_x,n}$, obtemos

$$[b_{k_x,n}, H] = \sum_{n'=1}^{N_A} \tau_{n,n'}^{BA} a_{k_x, n'} + \sum_{n'=1}^{N_C} \tau_{n,n'}^{BC} c_{k_x, n'}, \quad (3.14a)$$

e

$$[c_{k_x,n}, H] = \sum_{n'=1}^{N_B} \tau_{n,n'}^{BC} b_{k_x, n'} + \sum_{n'=1}^{N_A} \tau_{n,n'}^{AC} a_{k_x, n'}. \quad (3.14b)$$

Na ausência de campos externos variando no tempo, podemos assumir que a dependência temporal dos operadores é tal como $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$. Então

$$\frac{d}{dt} a_{k_x,n} = -\frac{iE}{\hbar} a_{k_x,n} = -\frac{i}{\hbar} [a_{k_x,n}, H], \quad (3.15a)$$

$$\frac{d}{dt} b_{k_x,n} = -\frac{iE}{\hbar} b_{k_x,n} = -\frac{i}{\hbar} [b_{k_x,n}, H], \quad (3.15b)$$

$$\frac{d}{dt} c_{k_x,n} = -\frac{iE}{\hbar} c_{k_x,n} = -\frac{i}{\hbar} [c_{k_x,n}, H]. \quad (3.15c)$$

Logo, temos que

$$Ea_{k_x,n} = [a_{k_x,n}, H], \quad (3.16a)$$

$$Eb_{k_x,n} = [b_{k_x,n}, H], \quad (3.16b)$$

$$Ec_{k_x,n} = [c_{k_x,n}, H]. \quad (3.16c)$$

Substituindo as Eqs. (3.13), (3.14a) e (3.14b) na Eq. (3.16), encontramos três equações acopladas para os operadores $a_{k_x,n}$, $b_{k_x,n}$ e $c_{k_x,n}$, sendo estas

$$\sum_{n'=1}^{N_B} \tau_{n,n'}^{AB} b_{k_x,n'} + \sum_{n'=1}^{N_C} \tau_{n,n'}^{AC} c_{k_x,n'} = Ea_{k_x,n}, \quad n = 1, 2, \dots, N_A, \quad (3.17a)$$

$$\sum_{n'=1}^{N_A} \tau_{n,n'}^{BA} a_{k_x,n'} + \sum_{n'=1}^{N_C} \tau_{n,n'}^{BC} c_{k_x,n'} = Eb_{k_x,n}, \quad n = 1, 2, \dots, N_B, \quad (3.17b)$$

$$\sum_{n'=1}^{N_B} \tau_{n,n'}^{BC} b_{k_x,n'} + \sum_{n'=1}^{N_A} \tau_{n,n'}^{AC} a_{k_x,n'} = Ec_{k_x,n}, \quad n = 1, 2, \dots, N_C. \quad (3.17c)$$

Na forma matricial, temos

$$T \begin{pmatrix} a_{k_x,n} \\ b_{k_x,n} \\ c_{k_x,n} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a_{k_x,n} \\ b_{k_x,n} \\ c_{k_x,n} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

onde T é uma matriz de ordem $(N_A + N_B + N_C) \times (N_A + N_B + N_C)$ dada por:

$$T = \begin{pmatrix} [O]_{N_A \times N_A} & [T^{AB}]_{N_A \times N_B} & [T^{AC}]_{N_A \times N_C} \\ [T^{BA}]_{N_B \times N_A} & [O]_{N_B \times N_B} & [T^{BC}]_{N_B \times N_C} \\ [T^{CA}]_{N_C \times N_A} & [T^{BC}]_{N_C \times N_B} & [O]_{N_C \times N_C} \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

onde τ^{AA} , τ^{BB} e τ^{CC} são matrizes diagonais cujos elementos são as energias locais dos sítios A, B e C, respectivamente.

Assim, tudo que precisamos fazer para encontrar os níveis de energia para cada tipo de nanofita investigado é diagonalizar a matriz T , configurando: (i) o ângulo θ para escolha da rede, e (ii) o valor do número de linhas totais N , que está associado a largura da nanofita.

3.3 Espectro de energia para nanofitas das redes genéricas

Os painéis apresentados na Fig. 29 mostram os espectros de energia e densidade de estados das nanofitas de Lieb. Tais resultados foram obtidos pelo modelo *tight-binding* para os três tipos de bordas considerados. São apresentados os níveis de energia para: (i) bordas

retas com $N = 5$ [Fig. 29(a)], $N = 13$ [Fig. 29(b)] e $N = 31$ [Fig. 29(c)], (ii) bordas barbadadas com $N = 5$ [Fig. 29(e)], $N = 13$ [Fig. 29(f)] e $N = 31$ [Fig. 29(g)], e (iii) bordas assimétricas com $N = 4$ [Fig. 29(i)], $N = 12$ [Fig. 29(j)] e $N = 30$ [Fig. 29(k)]. As densidades de estados para essas três terminações são mostradas nos painéis (d), (h) e (l) da Fig. 29, respectivamente. As Figs. 31 e 33 são análogas à Fig. 29, mas agora para nanofitas de transição e de Kagome, respectivamente.

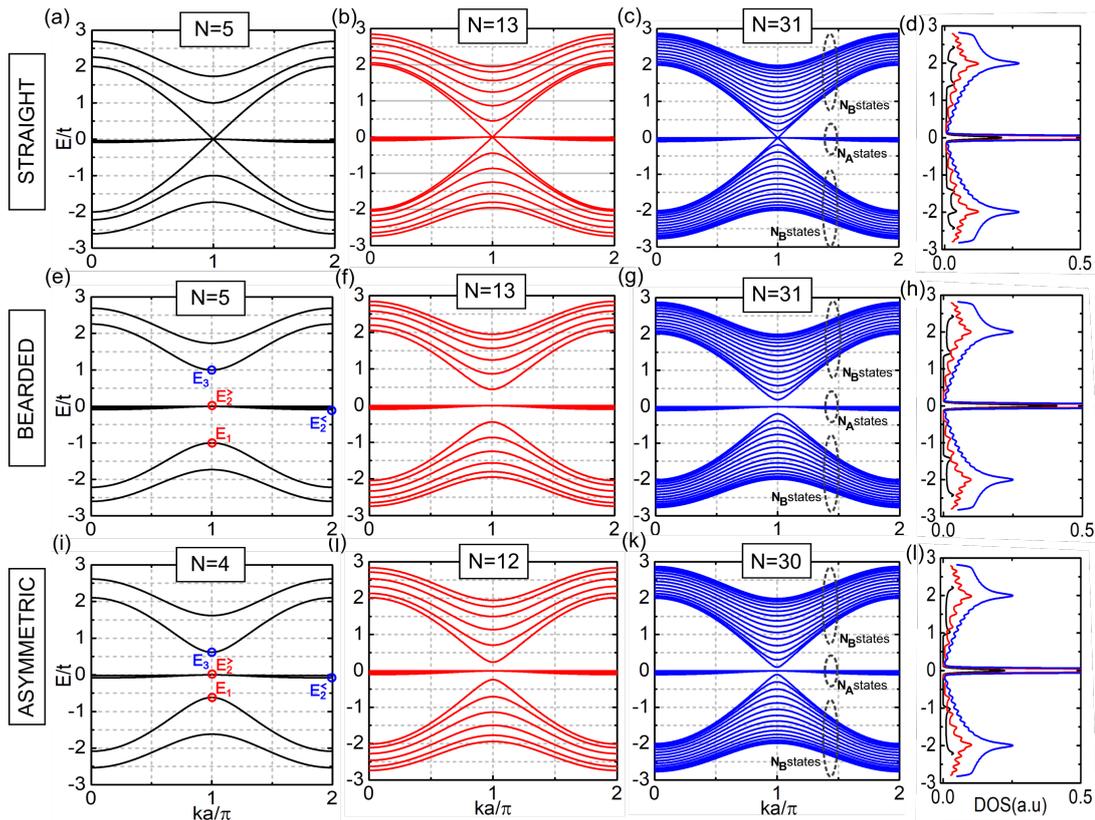


Figura 29 – Estruturas de bandas e densidade de estados (DOS) para a rede de Lieb, com bordas (fila superior) reta, (fila do meio) barbada, e (linha inferior) assimétricas e números diferentes de linhas atômicas da nanofita. As curvas pretas, vermelhas e azuis nos painéis da DOS correspondem aos espectros de energia na primeira, segunda e terceira colunas. N corresponde ao número total de linhas que definem o tamanho da fita, sempre ímpar (par) no caso de bordas retas ou barbadas (assimétricas). N_A , N_B e N_C são o número de linhas da nanofita com sites A, B e C, respectivamente.

Os resultados para a nanofita de Lieb (Fig. 29) mostram que o cone de Dirac, já encontrado no espectro de energia da rede infinita, está presente apenas para o caso da borda reta [Figs. 29(a), 29(b), e 29(c)], enquanto dois *gap* são abertos no espectros para os casos das bordas barbadadas [Figs. 29(e), 29(f), e 29(g)] e assimétricas [Figs. 29(i), 29(j), e 29(k)]. Um *gap* é aberto entre as bandas dispersivas inferiores (negativas) e as bandas quase planas, e outro *gap* é aberto entre as bandas quase planas e as bandas dispersivas mais altas (positivas). Além disso, a

principal diferença entre o espectro da nanofita com borda barbada [Figs. 29(e), 29(f), e 29(g)] e assimétrica [Figs. 29(i), 29(j), e 29(k)] é o tamanho dos *gaps* produzidos. Para nanofitas de Lieb de tamanhos semelhantes, as que possuem bordas barbadas têm *gaps* maiores do que as que possuem bordas assimétricas.

A estrutura de bandas influencia nas propriedades da densidade de estados calculadas para as nanofitas de Lieb. Isso pode ser visto claramente nas Figs. 29(d), 29(h) e 29(l). Observe os picos pronunciados de energia próxima de zero associados a banda quase plana na densidade de estados, como ocorre no sistema *bulk*.

Vale mencionar que as singularidades de van Hove correspondentes às bandas quase planas, ou seja, estados degenerados e quase degenerados, são evidentes e naturalmente observadas em outros sistemas de banda plana, como nanofitas construídas a partir de redes de dados (do inglês, *dice*) (SONI *et al.*, 2020). Além disso, um aumento na energia do elétron torna mais estados disponíveis para ocupação. No entanto, a DOS é descontínua para uma faixa de energia, o que significa que nenhum estado está disponível para os elétrons ocuparem dentro do *gap* do material. Essa condição também significa que um elétron na borda da banda de condução deve perder pelo menos a energia de *gap* do material para fazer a transição para outro estado.

Como pode ser visto, a nanofita de Lieb com bordas retas apresenta comportamento metálico [ver Fig. 29(a)], enquanto a nanofita de Lieb com borda barbada ou assimétrica é um sistema semicondutor [ver Fig. 29(b-c)].

A Fig. 30 mostra a (i) função de onda total, (ii) contribuição da subrede para a função de onda e (iii) norma da função de onda de nanofitas de Lieb com bordas retas [Fig. 30(a)], barbadas [Fig. 30(b)] e [Fig. 30(c)] assimétricas, correspondendo a algumas bandas quase planas enumeradas em $k = 3\pi/2$.

Esses resultados [Fig. 30] mostram que os modos quase planos presentes no espectro de energia de nanofitas de Lieb com borda reta [Fig. 30(a)(1-5)], barbada [Fig. 30(b)(1-6)] e assimétrica [Fig. 30(c)(1-5)] não são estados de borda, ao contrário das bandas quase planas de nanofitas de grafeno em zigzag que são estados de borda localizados na energia de Fermi (FUJITA *et al.*, 1996; WAKABAYASHI *et al.*, 1999). A banda tipo Dirac que cruza o *gap* de energia na nanofita com borda reta é um estado de bulk [Fig. 30(a)(6)], que se torna estados de borda somente se o acoplamento ISO for incluído.

O espectro de energia na nanofita de Lieb com borda barbada não possui estados de borda, enquanto o caso de borda assimétrica possui dois estados de borda que são topolo-

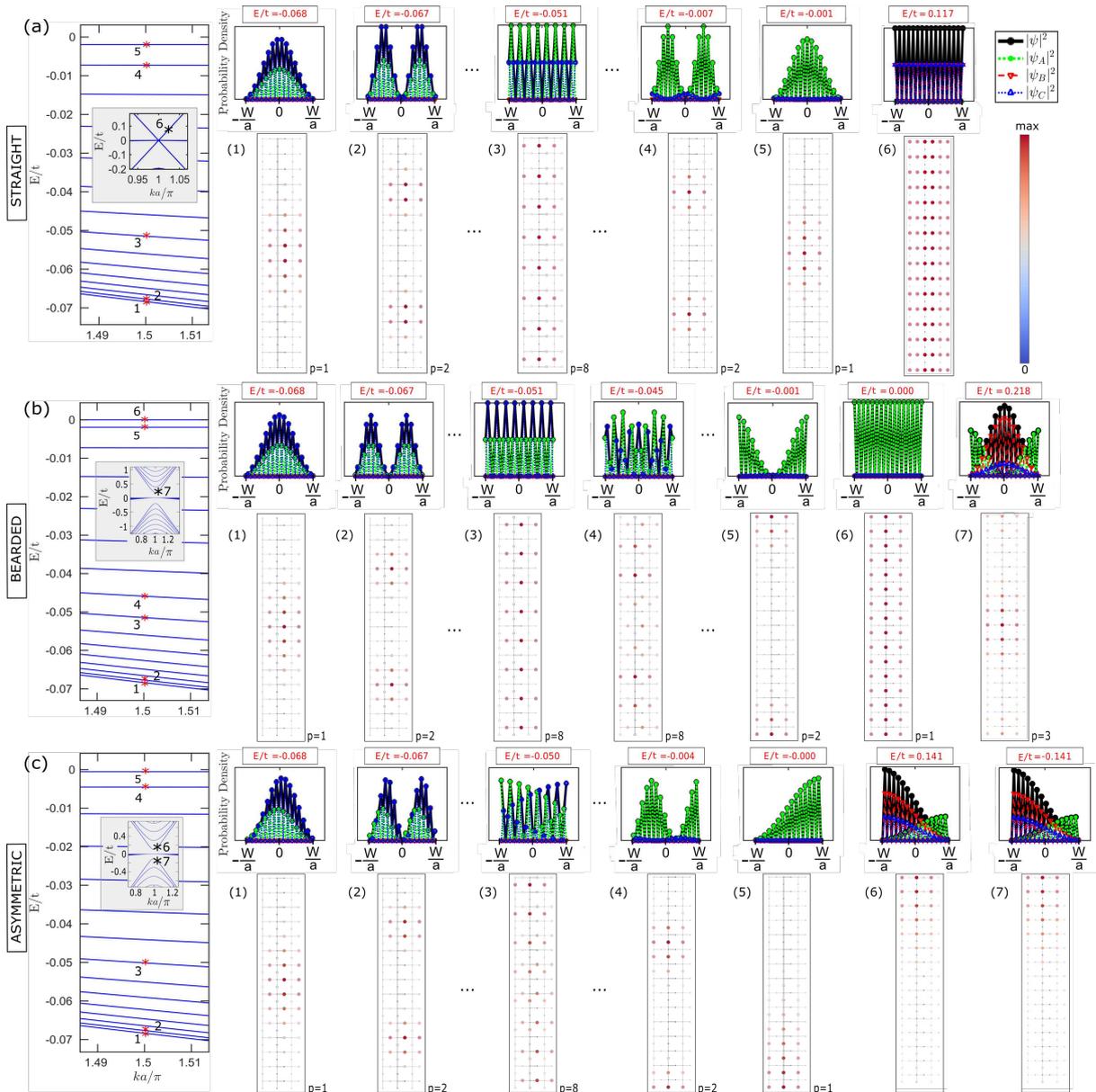


Figure 30 – Distribuição da função de onda de nanofitas de Lieb com (a) reta [$N = 31$], (b) barbuda [$N = 31$] e (c) arestas assimétricas [$N = 30$], para: (i) quase-bandas planas [destacadas por asteriscos vermelhos] enumeradas de baixo para cima em $k = 3\pi/2$, (ii) a banda tipo Dirac característica de arestas retas em $k = 3.261$ [destacada por um asterisco preto em a inserção de (a)], (iii) estado de massa em $k = \pi + 0.1$ [destacado por um asterisco preto na inserção de (b)] e (iv) o estado de borda em $k = \pi + 0.1$ [destacado pelo asterisco preto na inserção de (c)]. Para cada tipo de aresta, os painéis superiores mostram (i) a função de onda total [linhas sólidas pretas com círculos] e (ii) a função de onda na subrede A [linhas verdes pontilhadas com asteriscos], (iii) B [linhas tracejadas vermelhas com triângulos apontando para cima], e (iv) C [linhas pontilhadas azuis com triângulos apontando para baixo], tudo em função da largura da nanofita $W = (N - 1)a_0$. Nos painéis inferiores, o tamanho dos pontos e a escala de cores variando do azul ao vermelho representam a norma da função de onda variando de zero ao seu valor máximo ao longo da nanofita, respectivamente. p é o número de picos característicos do comportamento nodal das funções de onda das bandas quase planas.

gicamente triviais, ou seja, que não atravessam o gap de energia, que são: o mais energético modo das bandas dispersivas inferiores [Fig. 30(c)(6)] e o modo menos energético das bandas dispersivas superiores [Fig. 30(c)(7)]. De fato, sem acoplamento ISO, os nanofitas de Lieb com bordas retas e barbadas não possuem estados de borda, enquanto os nanofitas com bordas assimétricas exibem apenas estados de borda topologicamente triviais de acordo com a teoria de isoladores topológicos com ordem topológica Z_2 .

A banda quase plana mais baixa [Figs. 30(a)(1)] de nanofita de Lieb com borda reta [Fig. 30(a)] mostra uma função de onda com pico distribuído principalmente nos sítios C (mais intenso) e A (menos intenso) na região central da nanofita. O segundo estado quase plano [Figs. 30(a)(2)] possui dois picos e assim sucessivamente até o estado mostrado na Fig. 30(a)(3), que possui oito picos distribuídos ao longo da nanofita em alguns locais do tipo A. Portanto, o número de picos na função de onda diminui à medida que o valor das bandas quase planas aumenta. Portanto, a banda quase plana superior [Figs. 30(a)(5)] tem um pico distribuído na região central da nanofita como na primeira banda, mas agora a distribuição ocorre em sites do tipo A, em vez do que em átomos do tipo C.

A função de onda das bandas quase planas da nanofita de Lieb com bordas barbadas [Figs. 30(b)] e assimétricas [Figs. 30(c)] também mostra comportamento nodal. Na nanofita de borda barbada, a diferença está na banda quase plana mais energética [Figs. 30(b)(6)], que não apresenta um pico localizado no centro da nanofita, mas sim apresenta uma distribuição constante em sítios A ao longo da largura da nanofita [ver Fig. 30(b)(6)]. Para este tipo de borda, os níveis dispersivos também são estados bulk, conforme representado na Fig. 30(b)(7), o que mostra que a função de onda da banda de condução (nível menos energético da banda dispersiva superior bandas) possuem um pico localizado no centro da nanofita, não estando localizado na borda. Ao contrário dos estados de banda quase plana, que têm contribuições dos sítios centrais A e C, observamos que a maior contribuição para os estados dispersivos vem dos sítios dos cantos B.

No caso de borda assimétrica, os estados representados nas Figs. 30(c)(6,7), semelhante ao da Fig. 30(b)(7) para borda barbada, já é um estado de borda localizado mais intensamente em sites do tipo B e C no lado da borda reta. Além disso, o pico da função de onda da banda quase plana mais energética está localizado mais no lado da nanofita que tem uma terminação barbada [ver Fig. 30(c)(5)], embora não é um estado de borda. Isso ocorre porque os estados localizados nos sítios B da terminação barbada da nanofita com borda assimétrica são

estados de ligação pendente, ao contrário dos estados dos sítios A e C da terminação reta.

Podemos observar que, todos os estados quase planos de nanofitas de Lieb com borda assimétrica [ver Fig. 30(c)] mostram uma assimetria na distribuição de picos, ao contrário dos casos de borda reta [ver Fig. 30(a)] e barbada [ver Fig. 30(b)]. Isso é uma consequência da assimetria estrutural da nanofita com uma borda assimétrica, já que um lado da nanofita tem uma borda barbada enquanto o outro lado tem uma borda reta. Para os três tipos de arestas, a ocupação dos estados com níveis de energia mais baixos (mais altos) na banda quase plana tende a ocorrer mais nos sítios C(A).

As Fig. 31 e Fig. 32 são análogas às Fig. 29 e Fig. 30, mas agora mostra as estruturas de bandas e a função de onda, respectivamente, para nanofitas de transição com $\theta = 105^\circ$.

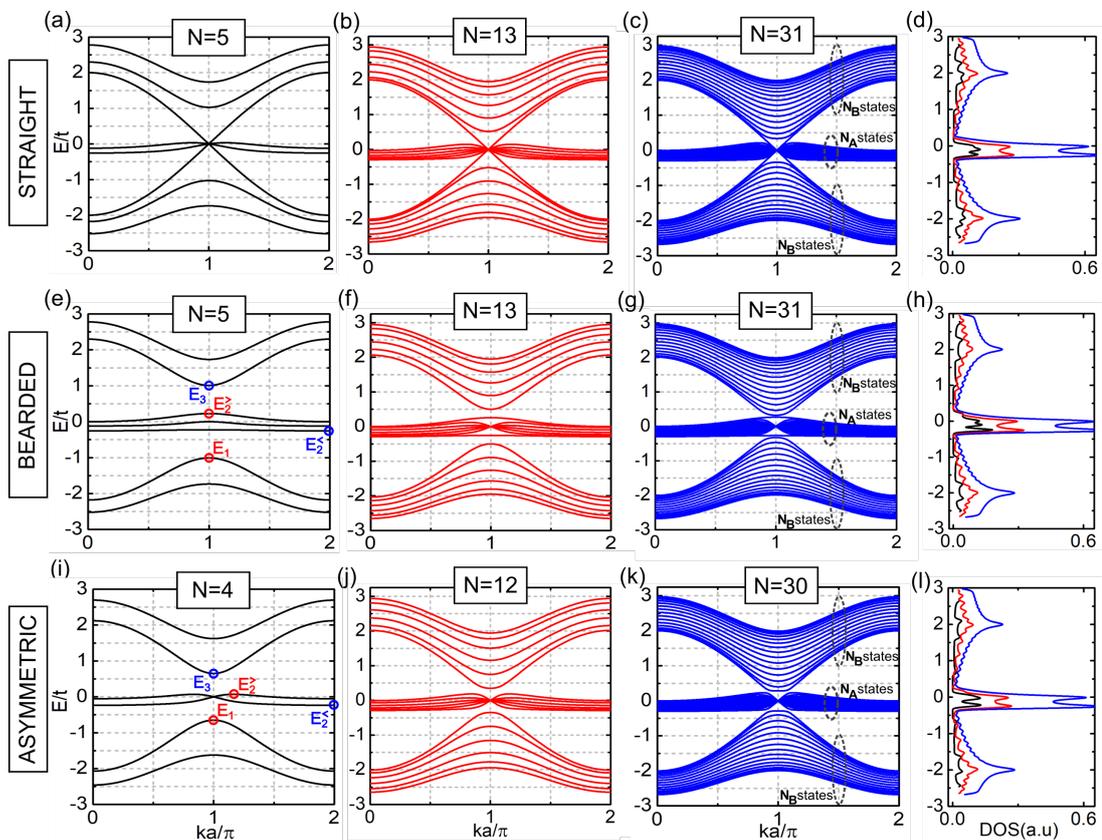


Figura 31 – O mesmo da Fig. 29, mas agora para a rede de transição.

Como observado no caso de Lieb, as nanofitas de transição com borda reta também são metálicas [Fig. 31(a)], enquanto as nanofitas de transição com borda barbada [Fig. 31(b)] e assimétrica [Fig. 31(c)] são sistemas semicondutores.

A principal diferença do espectro das nanofitas de transição (Fig. 31) em comparação com as das nanofitas de Lieb (Fig. 29) consiste nas bandas de energia quase planas próximas ao nível $E = 0$. Para os casos da nanofita de transição, as bandas quase planas são mais dispersivas,

ou seja, os modos são menos planos do que os da nanofita de Lieb. Esse comportamento se deve ao processo de interconvertibilidade da nanofita de transição, como ocorre no processo interconvertibilidade entre as redes infinitas de Lieb e Kagome.

A evolução do parâmetro θ de Lieb ($\theta = 90^\circ$) para Kagome ($\theta = 120^\circ$) leva à destruição das bandas quase planas localizadas no meio do espectro da nanofita de Lieb, e a consequente reconstrução na parte inferior do espectro de energia da nanofita Kagome [ver Fig. 33]. Em geral, nós chamamos de modos quase planos, os modos que estão localizados na vizinhança de $E = 0$ em Lieb ou nas nanofitas de transição, em $k = 0$ e $k = 2\pi/a$, ou na vizinhança de $E = -2t$ no caso de nanofitas Kagome, também em $k = 0$ e $k = 2\pi/a$.

Para a DOS de nanofitas de transição [Fig. 31(d,h,l)], identificamos que a singularidade de van Hove correspondente as bandas quase planas da nanofita de Lieb [Fig. 29(d,h,l)], divide-se em dois picos na DOS da nanofita de transição perto de $E = 0$, para a nanofita de transição com bordas retas ($N > 5$), assimétricas ($N > 4$) e barbadas ($N \geq 5$). Este efeito também evidencia o processo de interconvertibilidade entre as nanofitas Lieb e Kagome.

Assim como observado para Lieb, apenas a borda reta continua apresentando o cone de Dirac. No caso da borda barbada, o modo quase plano com menor energia e o modo quase plano com maior energia separam-se das outras bandas quase planas por $k = \pi$, enquanto no caso do assimétrico borda todos os estados são quase planos são degenerados neste ponto $k = \pi$.

Quando analisamos o caso com o menor número possível de linhas para cada tipo de borda da nanofita de transição, observamos que para a borda barbada, com $N = 5$, temos três modos para compor a banda do meio, um quase *flat* e dois deformados, enquanto que para a borda assimétrica, com $N = 4$, temos apenas dois que se cruzam em $k = \pi$.

Com relação às funções de onda da nanofita de transição com borda reta, a banda quase plana menos energética [Fig. 32(a)(1)] mostra um pico localizado na região central da nanofita e igualmente distribuídos nos sítios A e C, ao contrário do caso de Lieb em que os sítios C contribuíram mais que os sítios A [Fig. 30(a)(1)]. O comportamento nodal dos estados correspondentes às bandas quase planas ficam evidentes à medida que aumentamos o nível de energia, que atingem oito picos distribuídos ao longo da largura da nanofita nos sítios A (maior intensidade) e C (metade da intensidade dos sítios A). [Fig. 32(a)(3)], e culmina em um pico com uma contribuição dos sítios A maior que a do sítio C [Fig. 32(a)(5)]. Em geral, os sítios B não contribuem para a função de onda das bandas quase planas, como no caso de Lieb. Além disso, a Fig. 32(a)(6) mostra que o estado tipo Dirac é um estado bulk, que se assemelha ao estado tipo

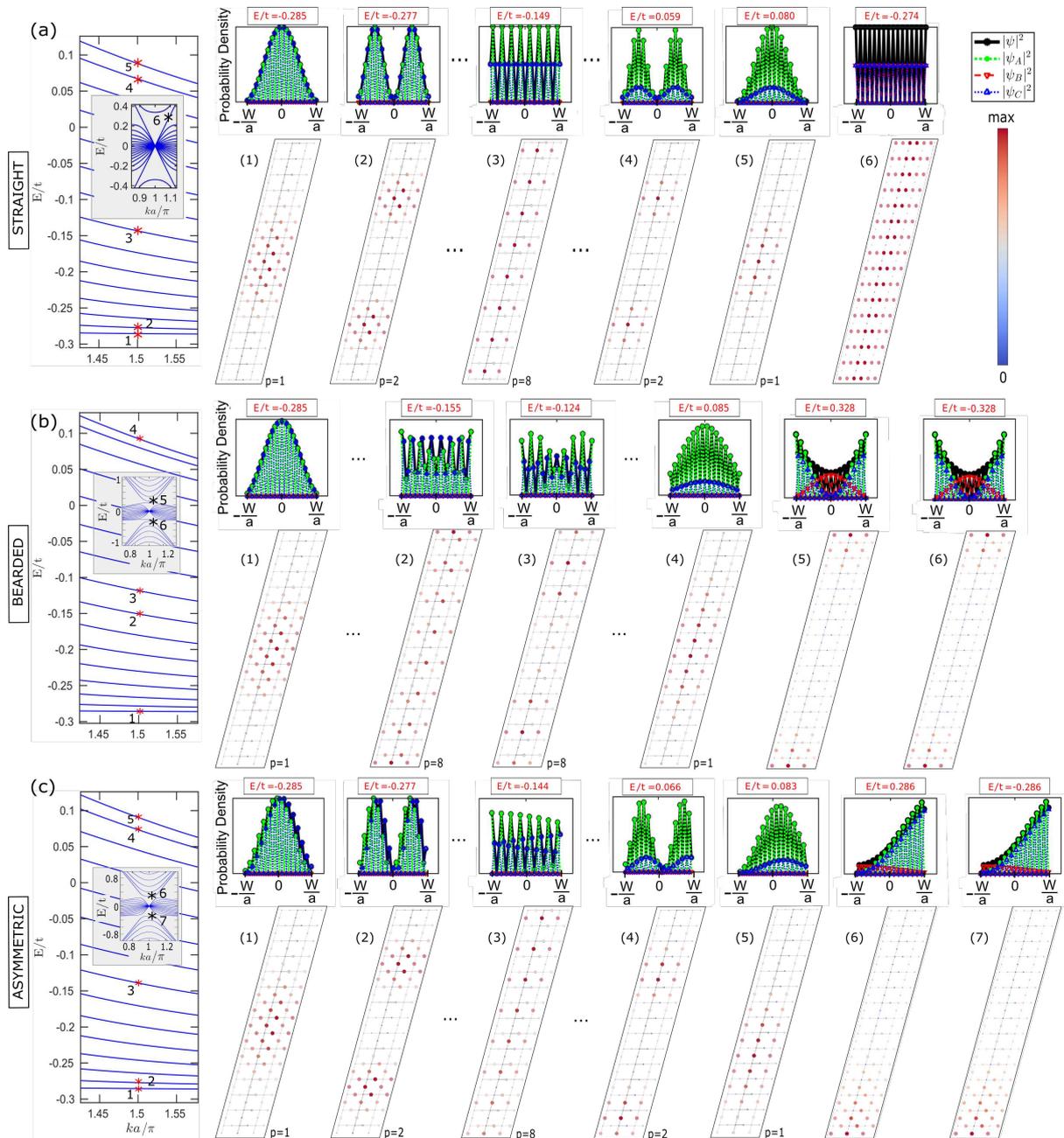


Figura 32 – O mesmo que a Fig. 30 para a rede de transição com $\theta = 105^\circ$. As bandas quase planas também foram enumeradas de baixo para cima em $k = 3\pi/2$, mas agora a banda tipo Dirac característica de arestas retas foi calculada para $k = 3.418$ [ver inserção de (a)], e (iii) os estados de borda em $k = \pi + 0.1$ [ver inserções de (b) e (c)].

Dirac presente no espectro de energia da nanofita de Lieb com borda reta [Fig. 30(a)(6)].

Os modos quase-planos presentes no espectro de energia de nanofitas de transição com bordas barbadas [Fig. 32(b)] e assimétricas [Fig. 32(c)] também mostram comportamento nodal. No caso de uma borda barbada, a banda quase plana mais energética apresenta um pico na região central da nanofita [Fig. 32(b)(4)], ao contrário do caso de Lieb que já é constante nos sítios A ao longo da largura da nanofita [Fig. 30(b)(6)]. Na nanofita de borda assimétrica, este estado [Fig. 32(c)(5)] também apresenta um pico, mas com uma assimetria mais suave devido às diferentes terminações da nanofita assimétrica, que de um lado tem uma terminação barbada e do outro lado tem uma terminação reta, como no caso correspondente em Lieb [Fig. 30(c)(5)].

Diferentemente do caso de Lieb, a nanofita de transição com bordas barbadas possui dois estados de borda [Fig. 32(b)(5,6)]. Tais estados correspondem à banda dispersiva inferior mais energética [Fig. 32(b)(5)] e à banda dispersiva superior menos energética [Fig. 32(b)(6)]. Deve-se notar que esses estados de borda não se originam das bandas quase planas, mas sim dos estados de banda dispersiva mais próximos das bandas quase planas. Além disso, a nanofita de transição com bordas assimétricas também possui dois estados de borda [Fig. 32(c)(6,7)], semelhante ao caso de Lieb correspondente [Fig. 30(c) (6,7)]. Além disso, no caso de transição, os estados de borda estão sempre localizados no lado da borda com terminação barbada [Fig. 30(c)(6,7)], ao contrário dos casos de Lieb correspondentes que estão localizados no lado da borda com terminação reta [Fig. 30(c)(6,7)]. Na nanofita de transição, a preferência dos elétrons em estados de borda é ocupar estados de ligação pendente, enquanto em Lieb eles preferem bordas retas. A existência de estados de borda em redes de transição sem acoplamento spin-órbita também é um achado que não havia sido mostrado na literatura até onde sabemos.

As Fig. 33 e Fig. 34 são análogas às Fig. 29 e Fig. 30, mas agora mostra as estruturas de bandas e a função de onda, respectivamente, para nanofitas de Kagome.

As nanofitas Kagome com bordas retas não possuem *gap* de energia, sendo, portanto, metálicas [Figs. 33(a-c)], semelhante às nanofitas de Lieb [Figs. 29(a-c)] e de transição [Figs. 31(a-c)] com este tipo de borda. As nanofitas Kagome com bordas barbadas [Figs. 33(e-g)] também são metálicas, não possuindo *gap* de energia, diferindo das nanofitas de Lieb [Figs. 29(e-g)] e de transição [Figs. 31(e-g)] com bordas barbadas, que são semicondutores. O caso de nanofitas Kagome com bordas assimétricas [Figs. 33(i-k)] são semicondutores como os casos equivalentes em Lieb [Figs. 29(i-k)] e transição [Figs. 31(i-k)] com este tipo de borda.

Até aqui, estávamos chamando de bandas quase planas as bandas que estão localiza-

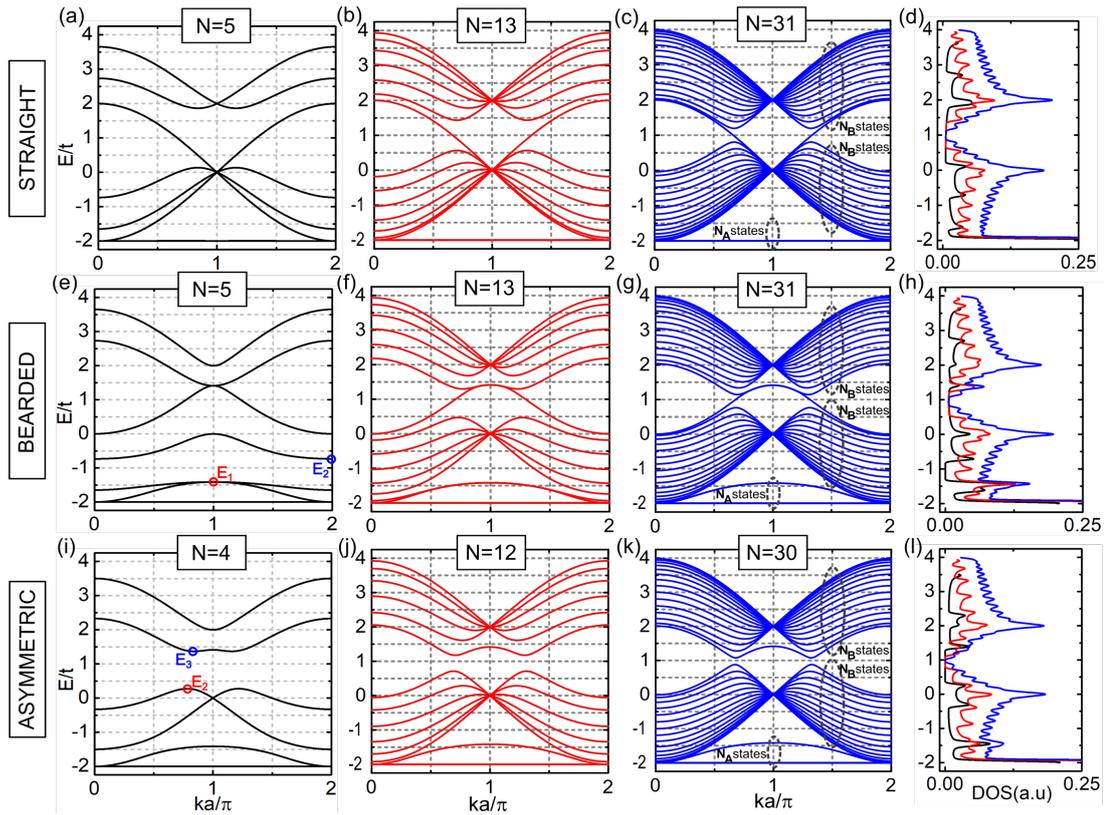


Figura 33 – O mesmo da Fig. 29, mas agora para a rede de Kagome.

das nas proximidades de $E = 0$ no Lieb ou nanofitas de transição (em $k = 0$ e $k = 2\pi/a$). Agora, no espectro de energia das nanofitas Kagome, chamaremos de bandas quase planas àquelas próximas a $E = -2t$ [Figs. 31(b,c,f,g,j,k)].

Destacamos que a abertura de *gap* para a nanofita de Kagome acontece de duas formas distintas, para a borda barbada temos a separação da banda plana das bandas dispersivas, enquanto que para a borda assimétrica, temos a separação das três bandas que compõem o espectro eletrônico dessa nanofita.

A DOS da nanofita de Kagome apresenta singularidades de van Hove em torno de $E = -2t$, correspondendo às bandas quase planas, como ocorre no DOS de nanofitas Lieb próximo a $E = 0$. Os picos da DOS em torno de $E = +2t$ e $E = 0$ são devidos a pontos degenerados em $k = \pi$. Os casos barbados e assimétricos também apresentam outro pico no DOS em torno de $E = -1.5t$, que se deve a dois (um) estados no caso barbado (assimétrico) que se origina nas bandas quase planas em $k = 0$ e $k = 2\pi$, mas separa deles k aproxima-se de $k = \pi$.

Na Fig. 34 identificamos que a banda tipo Dirac [Fig. 30(a)(1)] da nanofita Kagome com borda reta, corresponde a um estado bulk cuja função de onda é constante ao longo da largura da nanofita, similarmente aos casos correspondentes de Lieb [Fig. 30(a)(6)] e transição [Fig. 32(a)(6)]. Além disso, as funções de onda das bandas quase planas são nodais [Fig. 34(a)(2-

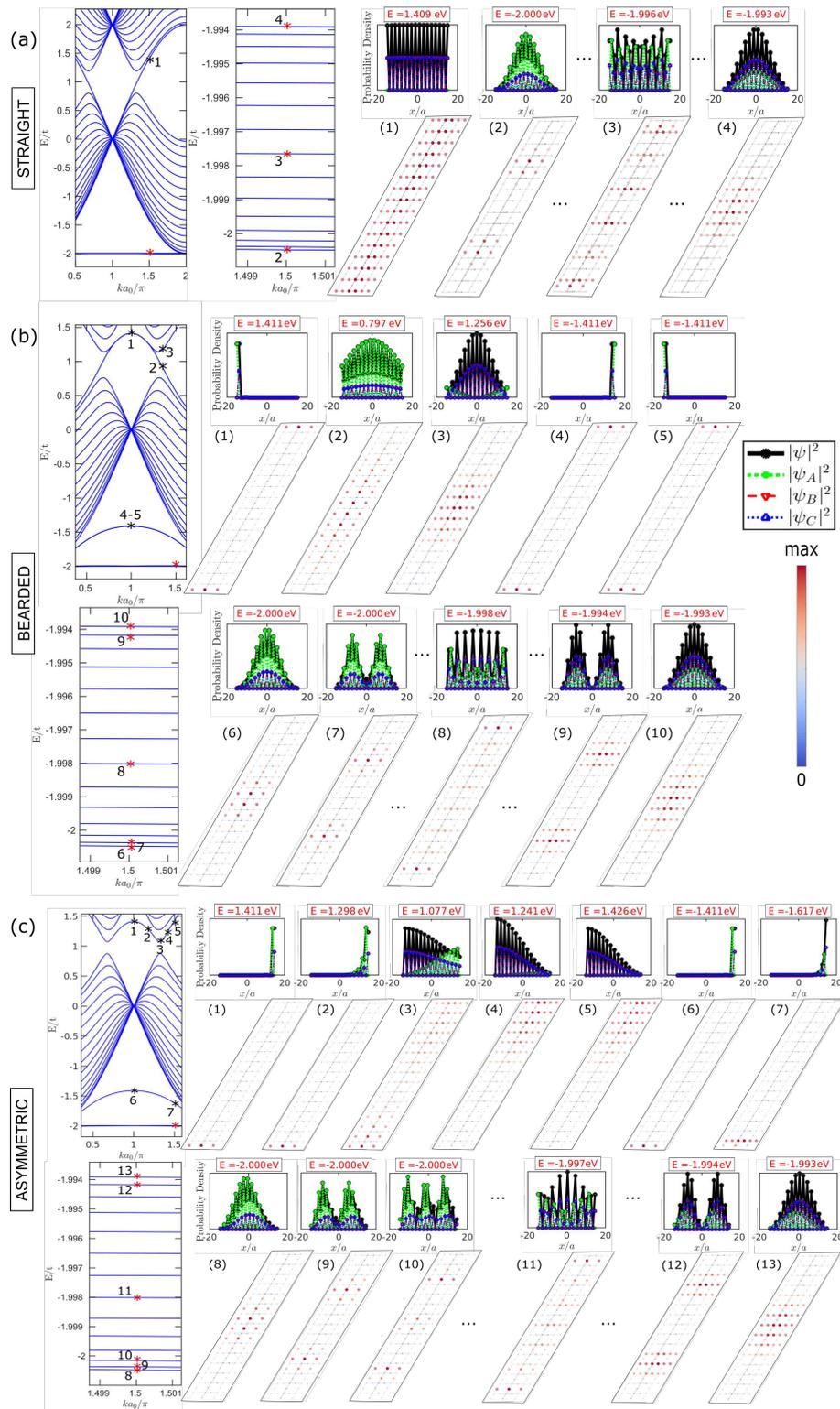


Figura 34 – Distribuição da função de onda de nanofitas Kagome com $\theta = 120^\circ$. (a) Estados Dirac-like [1] e quase-flats [2,3,4] foram calculados para $k = 4.228$ e $k = 3\pi/2$, respectivamente. (b) Os estados de bordas [1] e [4-5] adotaram $k = \pi$, enquanto [2,3,4] assumiram $k = 4.312$, $k = 4.312$ e $k = \pi + \pi/5$, respectivamente. (c) O estado de borda [1] adotou $k = \pi$, e sua evolução [2-5] foi calculada para $k = 7\pi/6$, $k = 4\pi/3$, $k = 4,455$ e $k = 3\pi/2$. Os estados bulk [6,7] de anti-cruzamento com estados de borda são mostrados para $k = \pi + \pi/5$ e $k = \pi + \pi/3$, respectivamente. O outro estado de borda [8,9] foi mostrado para $k = \pi$ e $k = 3\pi/2$, respectivamente. As bandas quase planas [10-15] também admitiram $k = 3\pi/2$.

4)]. A banda quase plana menos energética apresenta um pico simétrico em relação ao eixo central da nanofita, com maior intensidade nos sítios tipo A e menor intensidade nos sítios B e C, de forma que nenhum sítio possui uma contribuição nula para a função de onda. À medida que as bandas quase planas se tornam mais energéticas, o número de picos aumenta de um para oito picos [Fig. 34(a)(3)] e retorna a um pico no estado quase plano mais energético [Fig. 34(a)(4)], em que as intensidades das funções de onda dos locais B e C são aproximadamente iguais, enquanto que agora a contribuição do local A é menor que a dos locais B e C .

Em nanofitas Kagome com bordas barbadadas [Fig. 34(b)], existem quatro estados de borda. Dois estados de borda são representados nas Figs. 34(b)(1-3), de modo que a localização das funções de onda nas bordas ocorre apenas no intervalo degenerado [Fig. 34(b)(1)]. Quando eles se afastam do intervalo de degenerescência, os efeitos anti-cruzamento com os estados das bandas dispersivas mais próximas levam à deslocalização das funções de onda de borda, de modo que esses estados de borda aparecem como estados de bulk [Fig. 34(b)(2,3)]. Os outros dois estados de borda são mostrados nas Figs. 34(b)(4,5), que já são degenerados em todos os intervalos de k e, portanto, sempre apresentam uma função de onda localizada na borda barbada da nanofita de Kagome. Além disso, as funções de onda dos quatro estados de borda estão localizadas nas bordas barbadadas, com maior intensidade nos locais do tipo A e metade da intensidade de A está nos locais B e C [Fig. 34(1,4,5)].

As outras bandas quase planas [Fig. 34(b)(6-10)] são nodais e apresentam comportamento semelhante às bandas quase planas de nanofitas Kagome com borda reta [Fig. 34(a)(2-4)].

As nanofitas Kagome com bordas assimétricas [Fig. 34(c)] apresentam dois estados de borda. Um estado de borda é apresentado nas Figs. 34(c)(1-5), que mostra uma função de onda localizada no lado barbado [Figs. 34(c)(1,2)] da nanofita com borda assimétrica para valores de k com velocidade de grupo negativa, evoluindo para estados de bulk [Figs. 34(c)(3-5)] devido ao anti-cruzamento com aproximação estados de banda dispersiva [Figs. 34(c)(6,7)], e retornando a uma função de onda localizada no lado reto [Figs. 34(c)(8,9)] da nanofita com borda assimétrica para valores de k correspondentes à velocidade de grupo positiva.

Além disso, novamente as bandas quase planas são nodais [Figs. 34(c)(10-15)]. Porém, diferentemente dos casos com borda reta [Figs. 34(a)(2-4)] e barbada [Figs. 34(b)(6-10)], os picos das funções de onda das nanofitas Kagome com bordas assimétricas apresentam assimetria em relação ao eixo central da nanofita, semelhante aos casos das nanofitas de Lieb [Figs. 30(c)(1-5)] e transição [Figs. 32(c)(1-5)] com bordas assimétricas.

A evolução do estado de borda apresentado em Fig. 34(c)(1-5), foi feita para diferentes valores de k . Para detalharmos esta evolução, tomamos os seguintes valores para as configurações presentes no painel: em (1) temos $k_1 = \pi$, (2) temos $k_2 = 7\pi/6$, (3) temos $k_3 = 4\pi/3$, (4) temos que k_4 está entre $4\pi/3$ e $3\pi/2$, e em (5) temos $k_5 = 3\pi/2$, com essa variação de valores foi confirmado que este modo não se refere a um estado de borda, diferentemente do modo apresentado em (8) e (9) que mesmo variando k , a característica do estado de borda não é influenciada por outros modos do espectro por estarem distantes dos estados de *bulk*.

O aparecimento desses estados de bordas se mostram como um importante resultado, uma vez que não foi encontrado trabalhos a respeito de estados de bordas nessas nanofitas.

Além disso, quando analisamos o número de linhas de cada nanofita, estabelecemos duas relações interessantes, a primeira relaciona o número de linhas de sítios a com o número de modos da banda quase plana, e a segunda relaciona o número de linhas de sítios b com o número de modos *bulk* da nanofita.

Em todos os casos de nanofitas de Lieb, transição e Kagome, o número de bandas quase planas, N_{qf} , é numericamente igual aos números de linha dos sites A, ou seja, $N_{qf} = N_A$. Por outro lado, $N_d = 2N_A$, onde N_d é o número de bandas dispersivas, assim chamadas por serem bandas não planas. Além disso, o número de bandas dispersivas inferiores, N_{ld} é numericamente igual aos números de linha dos sites B, ou seja, $N_{ld} = N_B$.

Em geral, aumentar o número N de linhas tem o efeito esperado no espectro, que é reduzir o confinamento e obter mais modos com energia mais próxima uns dos outros. No limite N muito grande, restauramos o espectro de rede infinita.

Os resultados obtidos com nosso modelo *tight-binding* para Lieb (Fig. 29) e nanofitas Kagome (Fig. 33), mostram que existem bandas quase planas que não são afetadas pelo finito tamanho ou a geometria da borda e permanece intacta para todas as geometrias, ou seja, quando passamos das redes infinitas para as bordas com geometrias diferentes, os modos quase-planos persistem. De fato, as bandas quase planas estão localizadas principalmente nas proximidades de $E = 0$ ($E = -2t$), de forma análoga a a banda quase plana da rede infinita de Lieb (Kagome).

3.4 Quebra da degenerescência da banda plana

Os resultados apresentados nas seções anteriores foram calculados por meio de um modelo *tight-binding* que considera todos os parâmetros de *hopping* da Fig. 28(a) governados pela Eq. (3.2). Nesta seção, investigaremos os efeitos de considerar apenas *hoppings* de NN-sites

diferentes de zero, ou seja, t_{BA} e t_{BC} para nanofitas Lieb e transições e t_{BA} , t_{BC} e t_{AC} para nanofitas Kagome. Para fins de comparação, chamaremos esse modelo de aproximação NN-sites, enquanto o usado nas seções anteriores será chamado de aproximação NNN-sites.

A Fig. 35 mostra o espectro de energia de nanofitas construídas a partir da rede de Lieb ($\theta = 90^\circ$ - 1ª coluna), redes de transição com $\theta = 100^\circ$ (*circ*) (coluna 2ª) e $\theta = 110^\circ$ (coluna 3ª), e rede Kagome ($\theta = 100^\circ$ - 4ª coluna), para bordas retas [Figs. 35(a)-35(d)], barbadas [Figs. 35(e) - 35(h)] e assimétricas [Figs. 35(i)-35(l)]. Os resultados obtidos na aproximação NN-sites e NNN-sites são representados por linhas tracejadas vermelhas e sólidas pretas, respectivamente. Os estados de borda são mostrados para a aproximação NN-sites (linha verde tracejada) e NNN-sites (linha azul sólida). As funções de onda também são mostradas na parte inferior da figura para alguns desses estados de borda [Fig. 35(1-7)].

Note que se apenas NN-sites forem considerados, então as bandas planas degeneradas N_A -vezes persistem no espectro de energia de Lieb, transições e nanofitas de Kagome para os três tipos de borda. A inclusão de sítios NNN leva à destruição desta degenerescência em todos os casos, transformando as bandas planas em bandas quase planas.

Vale destacar também a morfologia das nanofitas entre Lieb ($\theta = \pi/2$) e Kagome ($\theta = 2\pi/3$), controladas pelo parâmetro $\pi/2 \leq \theta \leq 2\pi/3$, e suas consequências na evolução das bandas de energia para diferentes valores de θ da nanofita de transição. Observe que o espectro de energia das nanofitas de transição [Fig. 35($\theta = 100^\circ$, $\theta = 110^\circ$)] são idênticos à rede de Lieb espectros na aproximação NN-sites. Isso porque os efeitos da deformação da diagonal de aproximação dos sítios A e C mais próximos não são considerados no modelo NN-sítios, pois t_{AC} é admitido igual a zero. Somente quando $\theta = 120^\circ$ o espectro de aproximação de sítios NN muda abruptamente para o espectro de energia da nanofita Kagome porque o parâmetro de salto t_{AC} não é mais um parâmetro de sítios NNN como em nanofitas de transição para ser um parâmetro de salto de NN-sites em nanofitas Kagome.

Pela Fig. 35 fica evidente a evolução dos estados de borda. De fato Lieb, transições e nanofitas Kagome com bordas retas não apresentam estados de borda [Fig. 35(a-d)]. No caso da borda barbada, a nanofita de Lieb ainda não apresenta estados de borda [Fig. 35(e)], mas a nanofita de transição [Fig. 35(f,g)] já apresenta dois estados de borda [Fig. 35(1,2)] para o caso específico de aproximação NNN-sites, que são: (i) o mais energético das bandas dispersivas mais baixas e (ii) o menos energético das bandas dispersivas superiores. Portanto, no caso da borda com barba, os estados de borda são induzidos fazendo $\theta \geq 100^\circ$ junto com a inclusão de

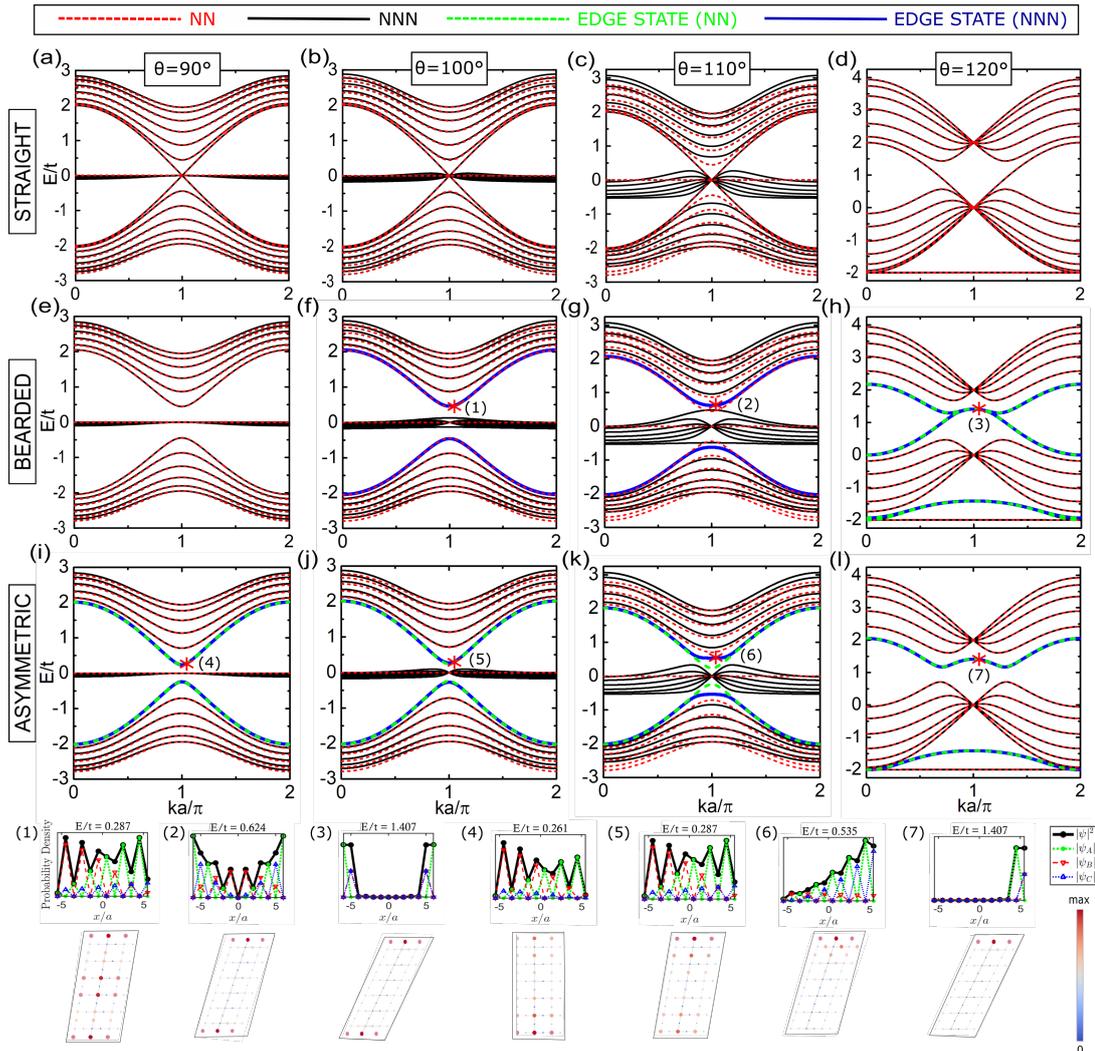


Figura 35 – Comparação do espectro de energia obtido na aproximação *tight-binding* com NN-sites (curvas vermelhas tracejadas) e NNN-sites (curvas pretas sólidas) com mudança do parâmetro θ , para os casos de nanofitas de: Lieb ($\theta = 90^\circ$ - primeira coluna), transição ($\theta = 100^\circ$ - segunda coluna e $\theta = 110^\circ$ - terceira coluna) e Kagome ($\theta = 120^\circ$ - quarta coluna) para liso ($N = 13$ - primeira linha), barbudo ($N = 13$ - segunda linha) e assimétrico ($N = 12$ - terceiro linha) arestas. A evolução dos estados de borda presentes no modelo TB de NN-sites (curvas tracejadas verdes) e NNN-sites (curvas sólidas azuis) são mostradas. Os painéis inferiores correspondem às distribuições da função de onda pelo modelo de ligação rígida com NNN-sites, para os estados rotulados nos painéis para (f-l) estados de Lieb [4], estados de transição com $\theta = 100^\circ$ [1,5] e $\theta = 110^\circ$ [2,6], e (d,h,l) estados de Kagome [3,7].

NNN-sites para nanofitas de transição. Os quatro estados de borda do espectro de energia da nanofita Kagome com borda barbuda, discutidos na seção anterior [Fig. 34(b)(1,5,6)], também são observado na aproximação NN-site [Fig. 35(3)].

No caso de bordas assimétricas [Fig. 35(i-l)], todos os estágios de evolução do processo de interconvertibilidade entre nanofitas de Lieb e Kagome apresentam dois estados de borda, que novamente são: (i) o mais energético das bandas dispersivas inferiores [Fig. 35(4-7)] e (ii) a menos energética das bandas dispersivas superiores. Diferentemente das nanofitas de

transição com bordas barbadadas, aquelas com bordas assimétricas apresentam tais estados de borda não apenas para a aproximação NNN-sites, mas também para a aproximação NN-sites.

Interessados também na densidade de probabilidade de encontrar a partícula em nosso sistema, nos dedicamos ao estudo das funções de onda para o caso degenerado, aplicando as condições estabelecidas para os diferentes tipos de bordas das nanofitas apresentadas.

O estudo das funções de onda para as nanofitas com diferentes tipos de bordas para o caso degenerado se deu negligenciando os segundos vizinhos, nesta situação estudamos as nanofitas de Lieb e Kagome, pois não faz sentido trabalhar com a nanofita de transição sem a contribuição dos segundo vizinhos.

Na Fig.36, onde temos os modos degenerados, apresentamos a densidade de probabilidade para a banda plana em prol de compararmos o comportamento das mesmas bandas com o caso em que temos a contribuição dos segundo vizinhos. Quando analisamos as bandas planas para o segundo caso, observamos que essas bandas apresentam comportamento nodais para todas as nanofitas, o que nos leva a concluir que ao incluir a contribuição dos segundos vizinhos há esta alteração na densidade de probabilidade.

Agora, para justificar totalmente a escolha do parâmetro n nas energias de salto $t_{i,j}$, dado pela Eq. (3.2), para o acoplamento entre os átomos i e j de qualquer uma das sub-redes A, B ou C, apresentamos nas Figs. 37, 38 e 39 a relação de dispersão de nanofitas de Lieb, transição (com $\theta = 105^\circ$) e Kagome, respectivamente, com bordas retas (primeira linha), barbadadas (segunda linha) e assimétricas (terceira linha) para diferentes valores do parâmetro n : (coluna da esquerda) $n = 4$, (coluna do meio) $n = 6$ e (coluna da direita) $n = 8$.

Antes de discutir as Figs. 37, 38 e 39, vale a pena primeiro analisar cuidadosamente o papel do parâmetro n no expoente exponencial na Eq. (3.2). Observe que ele funciona como um modulador de força das interações entre sítios atômicos conectados. Como esperado em uma visão geral das interações atômicas, quanto maior (menor) a distância entre os átomos menor (maior) a energia de acoplamento. Portanto, o parâmetro n na Eq. (3.2) determina a rapidez com que a distância interatômica decai.

Pelas Figs. 37, 38 e 39, há a quebra da degenerescência da banda plana quando mudamos o valor de n , pois para diferentes parâmetros n , o *hopping* evolui obedecendo a Eq. 3.2. Para valores de $n < 8$, a banda plana é destruída devido à consequente intensificação da contribuição de sites mais distantes que os NN-sites. Portanto, para obter aproximadamente um modelo *tight-binding* com apenas NN-sites hoppings, é necessário tomar $n = 8$. Isso ocorre

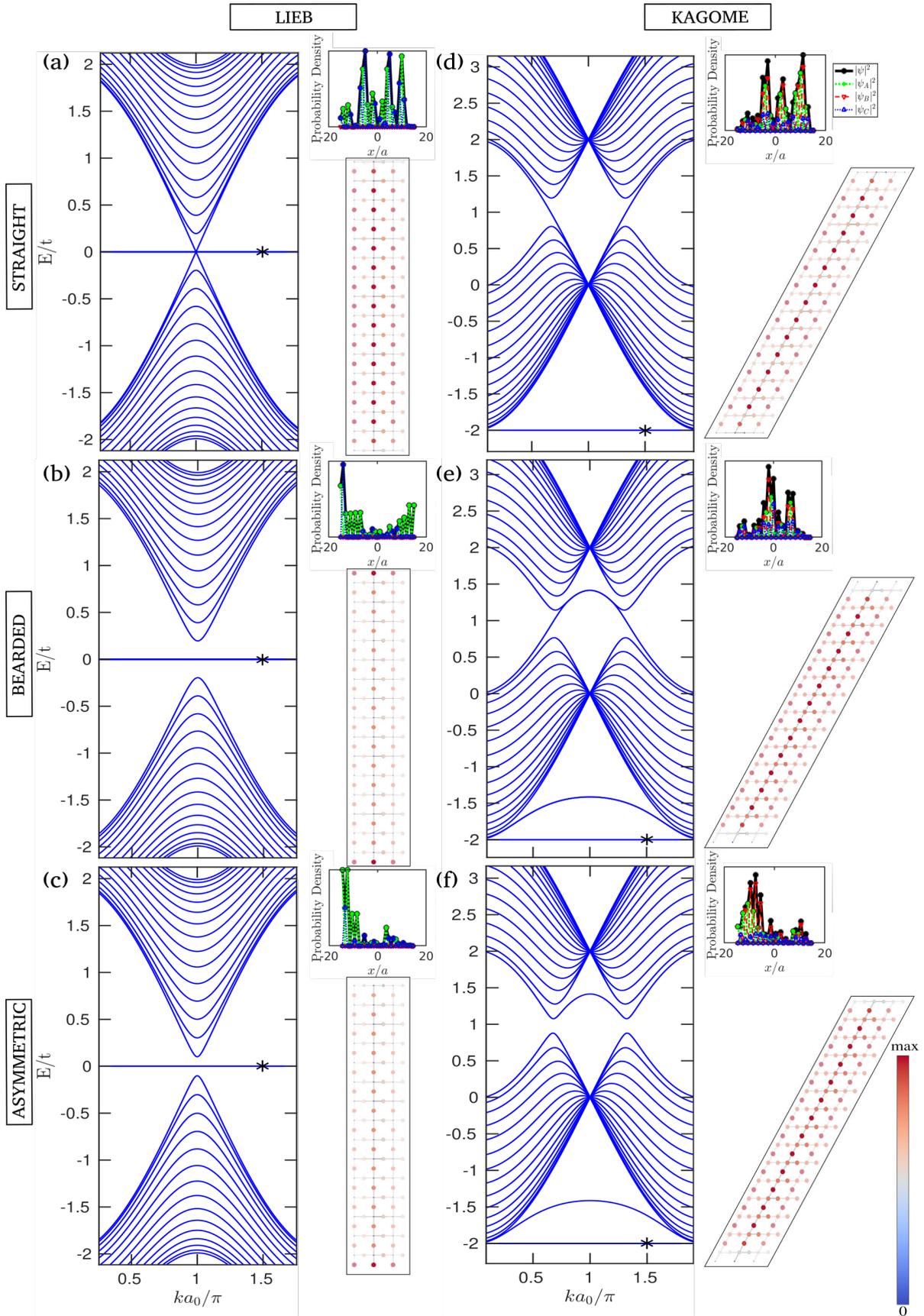


Figura 36 – Funções de onda referente a banda plana para os espectros de Lieb ((a)-(c)) e Kagome ((d)-(f)) sem a inclusão de segundos vizinhos para os três tipos de bordas estudadas.

porque o espectro de energia das nanofitas de Lieb e Kagome restaura as bandas quase planas, que se aproximam nas bandas exatamente planas características da aproximação exata dos primeiros vizinhos.

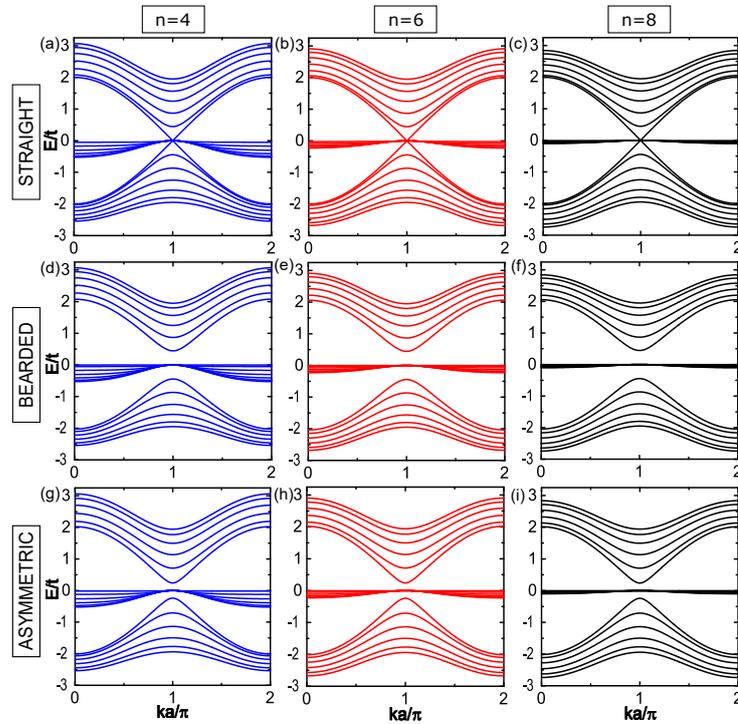


Figura 37 – Espectros de energia de nanofitas de Lieb com bordas retas(a-c), barbadas(d-f) e assimétricas(g-i), para $n = 4$ [Fig. 37(a,d,g)], $n = 6$ [Fig. 37(b,e,h)] e $n = 8$ [Fig. 37(c,f,i)]. Nota-se os efeitos dos diferentes valores de n na banda plana para a rede de Lieb.

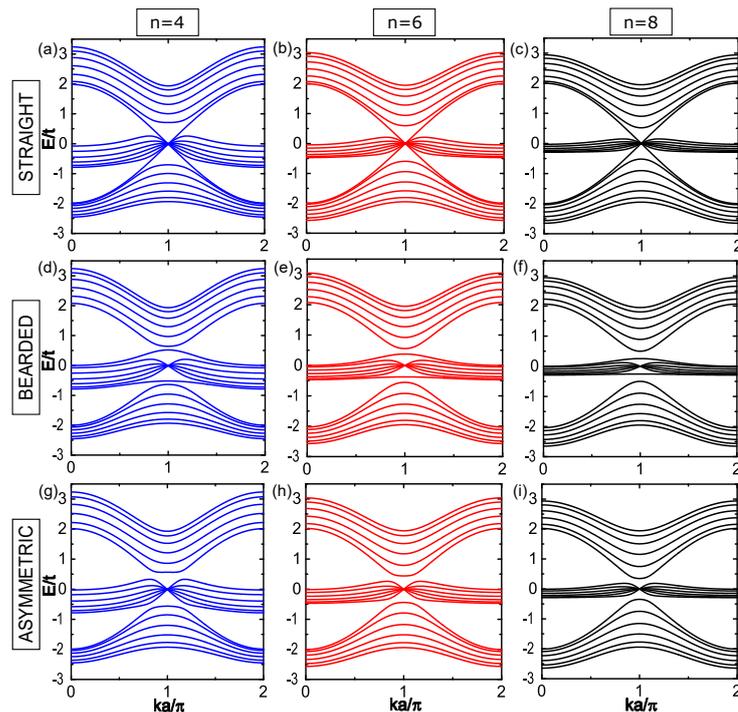


Figura 38 – O mesmo da Fig. 37, mas agora para a rede de transição ($\theta = 105^\circ$).

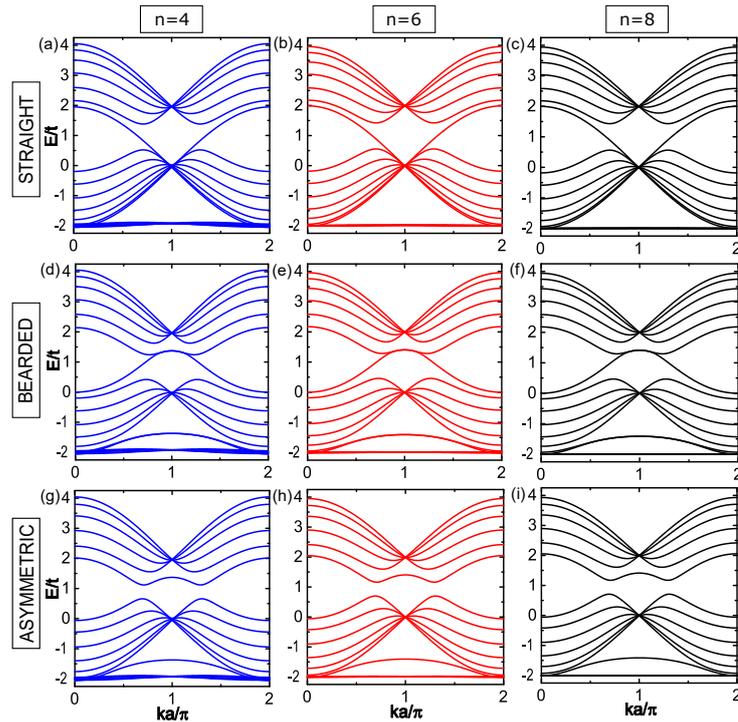


Figura 39 – O mesmo da Fig. 37, mas agora para a rede de Kagome.

3.5 Leis de escala de energias de gaps de banda

Nesta seção, investigamos as leis de escala que regem as energias de intervalo de banda de nanofitas de Lieb, transição e Kagome usando nosso modelo *tight-binding*. Variamos sistematicamente k_x e k_y de 0 a 2π e determinamos Δ_{12} , que é a menor diferença de energia entre a banda mais energética das bandas inferiores (E_1) e a menos banda energética das bandas médias ($E_2^<$). Da mesma forma, Δ_{23} é a menor diferença de energia entre a banda mais energética das bandas intermediárias ($E_2^>$) e a banda menos energética das bandas superiores (E_3). As figuras 30, 32 e 34 mostram E_1 , $E_2^<$, $E_2^>$ e E_3 das menores nanofitas de Lieb, transição e Kagome. Para comparar os gaps de energia das bordas barbadadas (B-superscript) e retas (S-superscript), realizamos uma análise visual usando um ajuste de curva e pontos de dados mostrados na Fig. 40. Para garantir uma comparação significativa, excluiremos nanofitas com bordas retas de nossa análise devido à ausência de um gap de energia discutida nas seções anteriores.

Em geral, a dependência dos gaps de energia com a largura (W) de nanofitas com bordas assimétricas segue uma lei de potência $\propto W^{-3/4}$ para todos os parâmetros θ . Por outro lado, os gaps de energia de nanofitas com bordas barbadadas exibem uma evolução diferente em relação à largura, dependendo do tipo específico de rede. Para nanofitas Lieb, a dependência do gap é $\propto W^{-3/4}$ [Fig. 40(a)], para nanofitas de transição é $\propto W^{-1}$ [Fig. 40(b)], e para nanofitas

Kagome é $\propto W^{-3/2}$ [Fig. 40(c)]. A dependência dos gaps de energia no parâmetro de ângulo de borda θ para bordas barbadas nesses diferentes tipos de redes sugere que as propriedades eletrônicas de nanofitas podem ser adaptadas controlando o ângulo em que as bordas são cortadas. Essas descobertas apresentam um caminho promissor para o design de dispositivos nanoeletrônicos com as propriedades eletrônicas desejadas.

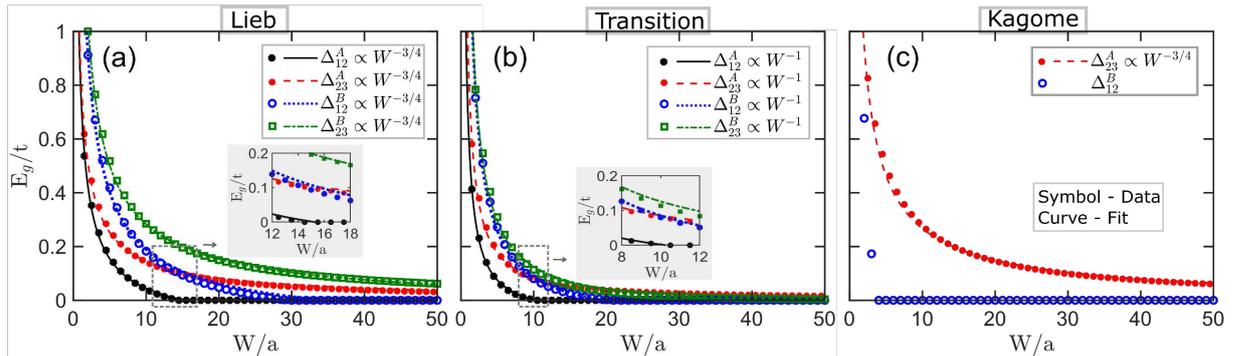


Figura 40 – Energias de gap entre as bandas inferior e média (Δ_{12}), e entre as bandas média e superior (Δ_{23}), em função da largura da nanofita, $W = (N - 1)a_0$, para: (a) Lieb, (b) transição e (c) nanofitas Kagome. Os resultados em ponto de dados (símbolo) e ajuste (curva) são apresentados para bordas assimétricas (A-sobrescrito) e barbeadas (B-sobrescrito). O gráfico inserido mostra versões grandes do gap destacadas em cinza.

Identificamos que os dois gaps de energia presentes no espectro de energia das nanofitas de Lieb [Fig. 40(a)], que separam as bandas dispersivas inferior e superior das bandas médias quase planas, são simétricos entre si outro em ambos os casos barbudos (Δ_{12}^B e Δ_{23}^B) e assimétricos (Δ_{12}^A e Δ_{23}^A). No entanto, as lacunas correspondentes no espectro de energia das nanofitas de transição [Fig. 40(b)] são assimétricas, com valores diferentes, mas preservando a função $\propto W^{-3/4}$ no barbudo caso e $\propto W^{-1}$ no caso assimétrico.

Além disso, descobrimos que o gap máximo de energia, $E = t$, é observado apenas no caso de nanofitas de Lieb com bordas barbadas. Para todas as outras configurações de nanofitas de Lieb, transição e Kagome, os gaps são menores que $E = t$. A presença de gaps de energia maiores em nanofitas de Lieb com bordas barbadas indica que essas bordas podem ser cruciais para aplicações que requerem gaps maiores, como no desenvolvimento de dispositivos nanoeletrônicos. Além disso, a observação de dois gaps de energia simétricos no espectro de energia de nanofitas de Lieb fornece informações valiosas para futuras investigações experimentais.

Nosso estudo revela que a dependência de lacunas de energia no gap da nanofita difere para bordas assimétricas e barbadas em nanofitas de transição, sugerindo que esses dois tipos de bordas podem afetar as propriedades eletrônicas da nanofita de maneira diferente.

Essas descobertas podem ter implicações significativas para o design de dispositivos eletrônicos baseados em nanofitas de transição.

3.6 Efeito da quebra de simetria de subrede com diferentes tipos de bordas

Nos propomos a estudar o efeito da quebra de simetria de subrede para as nanofitas com diferentes tipos de bordas. Iniciamos as análises para a quebra de simetria na nanofita de Lieb, transição e Kagome, respectivamente, utilizando as mesmas nove configurações apresentadas anteriormente, para o caso infinito, referente a $\delta/t = -1$ em relação a $\delta = 0$. As curvas pretas são referentes a quebra de simetria nula, onde $\delta = 0$, enquanto as curvas vermelha e azul representam a quebra de simetria negativa e positiva, respectivamente.

3.6.1 Nanofita de Lieb

Borda reta É observado na primeira configuração que a banda de cima se junta com a de baixo, e a banda plana sobe de 0 para 2 na escala energética. O ponto triplamente degenerado ficou duplamente degenerado com a separação da banda plana. Na segunda configuração, há a abertura de um gap entre a banda de cima e a banda plana, essa permanece junta da banda de baixo. Na terceira configuração, um gap é aberto e as três bandas se separam, a banda plana, em especial, sofre uma deformação bastante visível no ponto antes triplamente degenerado. Na quarta configuração, ocorre o mesmo que na primeira configuração, mas em um nível energético menor. Já na quinta configuração, ocorre o mesmo que na segunda configuração, também em nível energético menor. Na sexta configuração, a banda plana sofre deformação, é aberto um gap de energia entre a banda plana e a banda de baixo. Tanto na sétima configuração quanto na oitava, a banda plana sofre deformação e se junta com a de baixo. Na nona configuração, as três bandas se separam, e a banda plana, que ficava antes entre as duas bandas dispersivas, passa para a parte superior do espectro de energia.

Borda barbada Podemos observar que, na primeira configuração, os modos planos passam para a parte superior do espectro de energia, há também a separação das três bandas. Na segunda configuração, a banda plana desce para -1 na escala de nível energético. Na terceira configuração, um dos modos da banda plana sofre deformação, enquanto o outro desce na escala de energia. Na quarta configuração, apenas um dos modos sofre deformação. Já na quinta configuração, ocorre o mesmo que na segunda configuração. Na sexta configuração, ocorre o

mesmo que na terceira configuração, se diferenciando apenas na escala de energia. Nas sétima e oitava configurações, temos que um dos modos planos se junta com a banda de baixo. Na nona configuração, percebe-se uma deformação em um dos modos planos.

Borda assimétrica Na primeira configuração, percebemos que a banda plana sofre deformação e se aproxima da banda de baixo. Na segunda configuração, a banda plana desce para -1 na escala energética. Na terceira configuração, a banda plana sofre deformação. Na quarta configuração, ocorre o mesmo que na primeira configuração, mas em um nível de energia menor. Já na quinta configuração, se tem o mesmo que ocorre na segunda configuração. Na sexta configuração, a banda plana sofre deformação e se junta com a banda de cima. Na sétima configuração, ocorre o mesmo que quarta configuração. Na oitava configuração, assim como a quarta configuração, ocorre o mesmo que na primeira configuração. Na nona configuração a banda plana sobe na escala de energia e sofre deformação.

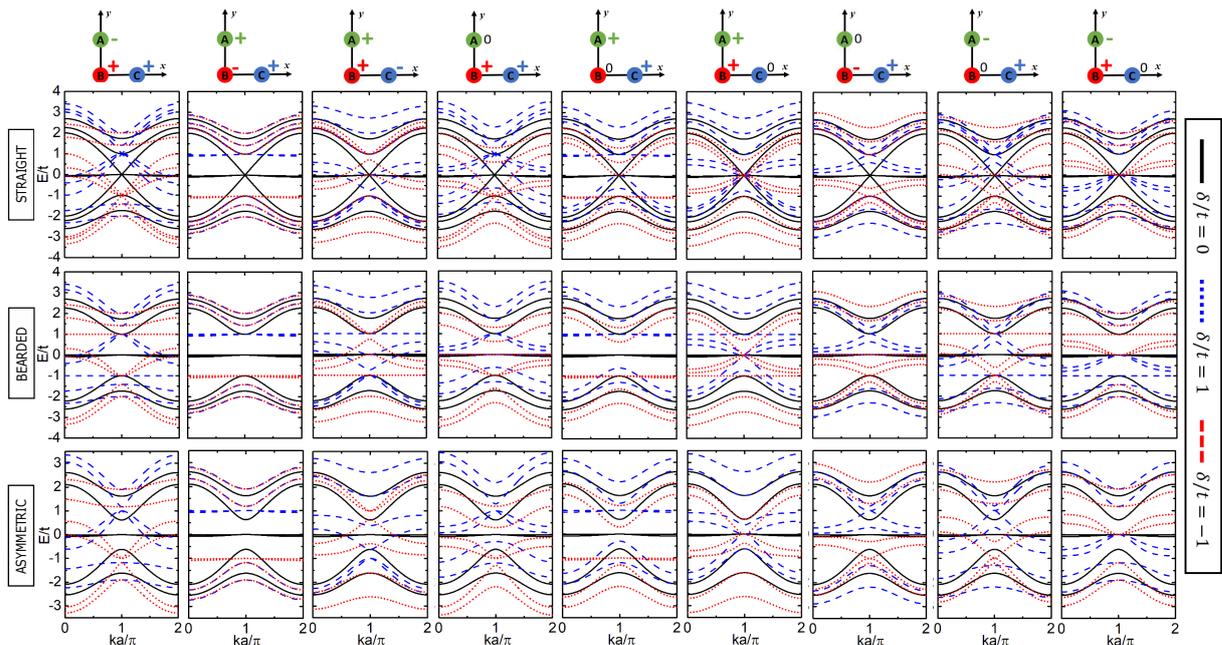


Figura 41 – Nove diferentes tipos de configurações usadas na quebra de simetria de subrede para as bordas retas (linha de cima), barbadas (linha do meio) e assimétrica (linha de baixo) para a nanofita de Lieb.

3.6.2 Nanofita de transição

Analisando as mesmas configurações estudadas anteriormente, considerando as mesmas três bordas: reta, barbada e assimétrica, percebe-se que, para a nanofita de transição, ocorre o mesmo já verificado para a nanofita de Lieb, onde a borda barbada apresenta uma

diferença maior (perceptível) nos resultados dessas configurações. Isso se deve aos modos que compõem a banda quase plana da nanofita com essa terminação de borda. Com o menor valor possível da nanofita, é possível observar que as bordas retas e assimétricas se assemelham em quantidade de modos para cada banda nos casos das nanofitas de Lieb e transição, enquanto que a borda barbada apresenta na banda quase plana dois modos em transição e apenas um em Lieb.

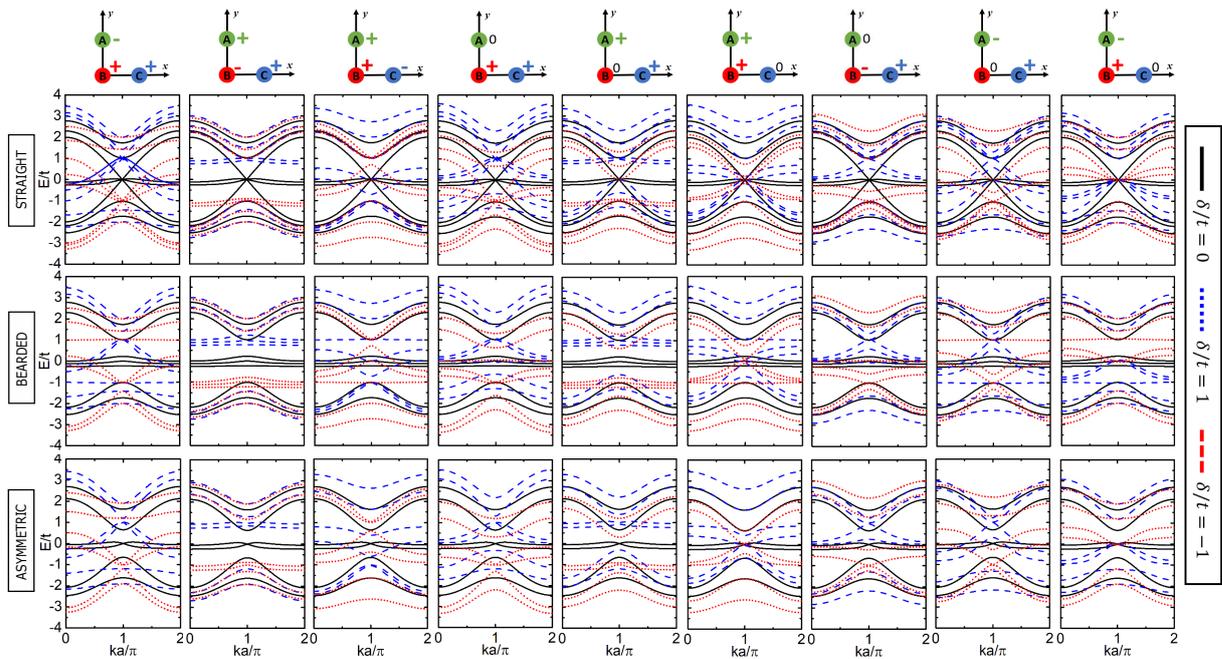


Figura 42 – O mesmo da Fig. 41, mas agora para nanofita de transição.

3.6.3 Nanofita de Kagome

O estudo da quebra de simetria de subrede para a nanofita de Kagome apresentou casos interessantes, se diferenciando das duas nanofitas estudadas anteriormente.

Borda reta Na primeira configuração, observa-se que a banda plana, que ficava na parte inferior do espectro de energia, sobe na escala energética e agora cruza o cone de Dirac. Nas segunda e terceira configurações, é aberto um gap de energia e o cone deixa de existir. Já na quarta configuração, ocorre o mesmo que na primeira configuração, se diferenciando por apresentar uma deformação na banda plana. Nas quinta e sexta configurações, é aberto um gap de energia e as bandas se separam. Na sétima configuração, além do gap aberto, podemos observar que acontece a mesma coisa com energia on-site positiva ou negativa. Nas oitava e nona configurações, ocorre a separação das bandas, e a banda plana sobe no espectro de energia, ficando entre as outras duas bandas dispersivas.

Borda barbada É possível observar que, na primeira configuração, ocorre um

espaçamento entre as bandas de energia. Tanto na segunda configuração quanto na terceira, quinta e sexta, é aberto um gap e os modos se separam. Já na quarta configuração, as bandas descem na escala de energia. Na sétima configuração, um gap é aberto e observa-se que o comportamento das curvas é o mesmo quando $\delta/t = \pm 1$. Nas oitava e nona configurações, há uma separação entre os modos de energia.

Borda assimétrica Na primeira configuração, percebemos uma inversão no sentido da curvatura de um dos modos. Nas segunda e terceira configurações, observa-se o aparecimento de uma banda quase plana na parte inferior do espectro de energia. Já na quarta configuração, há o surgimento de uma banda totalmente plana entre as duas bandas dispersivas. Nas quinta e sexta configurações, não há grandes mudanças com essa quebra de simetria, apenas uma variação na escala para um valor menor que a curva sem energia on-site. Na sétima configuração, não há mudança no comportamento das curvas no espectro, mas percebemos que ocorre a mesma coisa no caso positivo e negativo de δ . Tanto na oitava configuração quanto na nona, é possível observar o aparecimento de uma banda quase plana entre as outras bandas.

Para a análise feita de $\delta/t = 1$, observamos que, para Lieb e transição, em todos os casos estudados e com os diferentes tipos de bordas, $\delta/t = 1$ apresenta um comportamento espelhado do caso $\delta/t = -1$. No entanto, para a nanofita de Kagome esse espelhamento não ocorre.

Para a nanofita de Kagome com a borda reta, temos que na primeira configuração, a banda plana sofre uma pequena deformação, enquanto o restante do espectro sobe na escala energética. Nas segunda e terceira configurações, ocorre o mesmo que no caso negativo, se diferenciando apenas na escala de energia. Na quarta configuração, o espectro não sofre alteração, mas também sobe na escala. Nas quinta e sexta configurações, abre-se um gap de energia entre as duas bandas dispersivas. Já na sétima configuração, abre-se um gap de energia e as três bandas são separadas. Nas oitava e nona configurações, um gap de energia é aberto entre as três bandas, e a banda plana sofre uma pequena deformação.

No caso da nanofita de Kagome com a borda barbada, na primeira configuração observamos que os modos da banda de cima ficam mais espaçados, enquanto os modos da banda de baixo ficam mais estreitos. Nas segunda, terceira, quinta e sexta configurações, abre-se um gap de energia entre as bandas e a de baixo se torna uma banda plana, o mesmo observado no caso negativo, mas em um nível de energia maior. Na sétima configuração, não há distinção entre o caso positivo e negativo. Nas oitava e nona configurações, abre-se um gap de energia e a banda

de cima apresenta modos mais espaçados e a de baixo apresenta modos mais próximo entre si.

Com a borda assimétrica, podemos observar que, na primeira configuração, assim como na oitava e nona, a deformação nas bandas dispersivas fica mais intensa. Nas segunda e terceira configurações, a banda de baixo se deforma, enquanto a banda do meio se torna quase flat. Na quarta configuração, a banda inferior fica totalmente plana e as bandas dispersivas sofrem deformação. Nas quinta e sexta configurações, a banda do meio fica quase flat e o espectro sobe na escala energética. Na sétima configuração, assim como em outras bordas, os casos positivo e negativo são iguais.

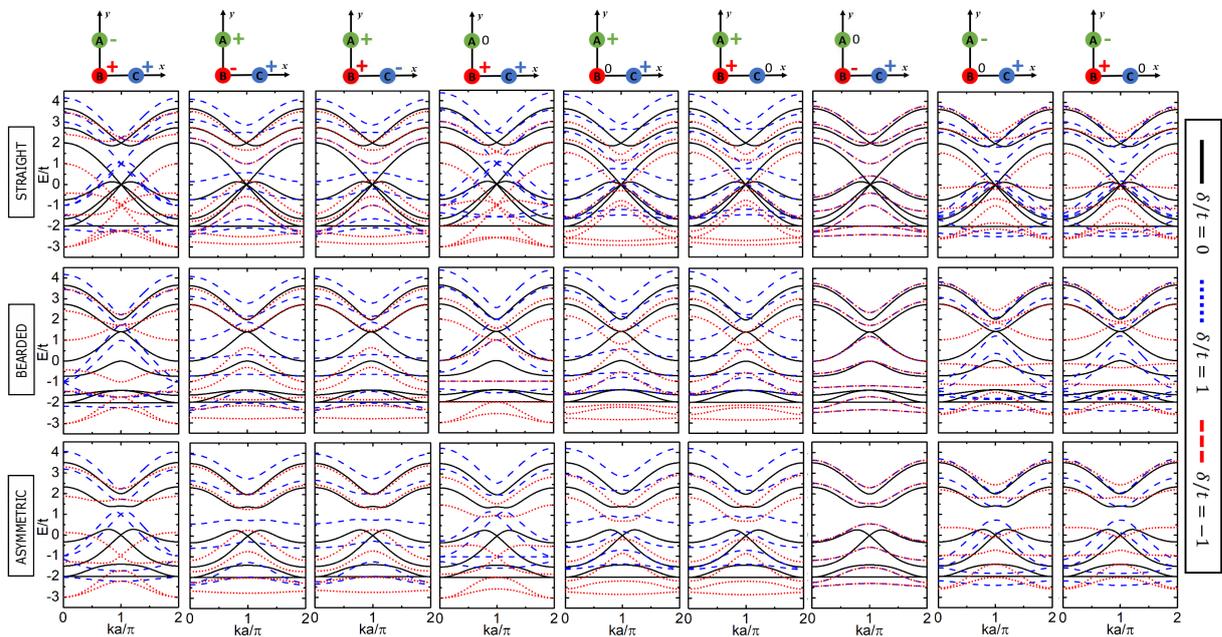


Figura 43 – O mesmo da Fig. 41, mas agora para nanofita de Kagome.

4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Em resumo, estudamos sistematicamente os estados eletrônicos de nanofitas feitas de redes de Lieb, transição e Kagome com base em um Hamiltoniano dentro do modelo *tight-binding* recentemente proposto (JIANG *et al.*, 2019b) que leva em conta a interconvertibilidade entre essas redes. Espectros de energia e densidade de estados são investigados assumindo diferentes tipos de terminações de borda (retas, barbadadas e assimétricas) e larguras das nanofitas. Os efeitos das interações dos primeiros e segundos vizinhos mais próximos nos espectros de energia são analisados, em particular, nos níveis quase-planos.

Inicialmente revisamos o estudo sobre a interconvertibilidade entre as redes Lieb-Kagome para o caso da rede infinita. Em seguida, investigamos em primeira mão o efeito da quebra de simetria de subrede nos espectros eletrônicos das folhas infinitas dessas redes, avaliando nove configurações não-equivalentes de energias *on-site* para as três subredes.

Para as nanofitas podemos observar o efeito da quebra da degenerescência da banda plana analisando as interações de segundos vizinhos e também variando o parâmetro de *hopping*. O que nos leva a conclusão de que as interações dos segundos vizinhos mais próximos causam principalmente uma distorção dos estados planos, levando-os a ter uma dispersão não-nula e quebrando sua degenerescência.

Independentemente do tipo de borda, o número de estados quase-planos é o mesmo que o número de átomos pertencentes à subrede atômica central, ou seja, o número de subredes *A* com direção vertical de simetria de translação e seriam subredes do tipo *C* no caso de direção de simetria de translação horizontal, e equivalentemente é semelhante ao número de estados de *bulk* positivos e negativos em relação à energia de Fermi.

Ao investigarmos o espectro eletrônico da rede de Lieb e Kagome encontramos bandas de energias características formadas por duas bandas compondo um cone de Dirac e uma terceira banda plana, já quando analisamos os efeitos de bordas das nanofitas de Lieb e Kagome os resultados se mostraram ainda mais interessantes, uma vez que a banda plana persiste em todos os modos e o cone de Dirac some, para o caso das bordas barbadadas e assimétricas, dando lugar a um gap de energia.

Concluimos que a geometria influencia significativamente na abertura de *gaps* de energia. Já esperávamos que o confinamento causasse discretização nos níveis eletrônicos, mas observamos que ao confinarmos nossas redes em uma nanofita com borda reta não há o surgimento de *gaps* de energia, enquanto que com as outras geometrias de bordas, barbada e

assimétrica, podemos perceber o aparecimento desses *gaps*.

A partir do estudo da interconvertibilidade entre as redes Lieb e Kagome, podemos observar em seus espectros de energia a transição dos estados dos cones e *flats*. Na transição de Lieb para Kagome a banda plana sobre deformação até que é totalmente destruída nessa fase, ao final da transição a banda plana que estava no meio entre as bandas que formam um cone, passa para baixo do cone. Isto é, o ponto triplamente degenerado em Lieb desaparece com a deformação da banda plana, dando origem a dois pontos duplamente degenerados no espectro da rede de transição, surgindo agora dois cones de Dirac inclinados, até que a banda plana reaparece na parte inferior do espectro em Kagome.

Realizando o estudo, a partir do plote das funções de onda para cada caso estudado neste trabalho foi possível discutir sobre os estados de bordas, especificando quando aparecem e devido a quais tipos de nanofitas, motivado em entender a diferença entre o estado de borda e o estado *flat* dentro do espectro de energia e no comportamento da função de onda. Contudo, foi observado que as bandas planas apresentam comportamento nodais para todas as nanofitas e há o aparecimento de estados de bordas apenas para a nanofita de Kagome com dois tipos de bordas: barbadadas e assimétricas. E temos ainda que, N_a é igual ao número de modos da banda plana e N_b é igual ao número de modos bulk da banda inferior, isso ocorre para todas as nanofitas com todos os tipos de bordas.

Demonstramos ainda que: (i) as leis de escala de energia de intervalo de banda para nanofitas barbadadas e assimétricas exibem padrões distintos, de modo que a lei de potência para nanofitas barbadadas segue $\propto W^{-3/4}$, enquanto as nanofitas assimétricas de Lieb compartilham a mesma lei de potência com as barbadadas, e nanofitas de transição têm uma lei de potência de $\propto W^{-1}$, e nanofitas Kagome demonstram uma lei de potência $\propto W^{-3/2}$.; (ii) independentemente do tipo de aresta, o número de bandas quase planas é igual ao número de átomos pertencentes à sub-rede atômica central, ou seja, o número de sub-redes A no caso da Fig. 28 com direção de simetria de translação vertical e seria C sub-redes no caso de direção de simetria de translação horizontal, e equivalentemente é semelhante ao número de estados positivos e negativos em relação à energia de Fermi; (iii) as interações NNN causam principalmente uma distorção dos estados planos, levando-os a uma dispersão não nula e quebrando sua degenerescência; (iv) Lieb e transição ($\theta = 105^\circ$) nanofitas com bordas retas são metálicas, enquanto nanofitas com bordas assimétricas e barbadadas são semicondutoras, e apenas nanofitas Kagome com bordas assimétricas são semicondutoras, de modo que nanofitas com bordas retas e barbadadas são metálicas.

Foi realizado um estudo sistemático das propriedades eletrônicas das nanofitas de Lieb, transição e Kagome. Estudando assim os efeitos da quebra de simetria de subrede nas propriedades eletrônicas dessas nanofitas ao se considerar nove diferentes configurações de quebra de simetria, analisando a quebra da degenerescência da banda plana, a mudança da curvatura das bandas.

Para trabalhos futuros pretendemos dar continuidade ao estudo dos efeitos de tamanho finito nos estados de bordas para as redes de Lieb, transição e Kagome, considerando agora o acoplamento spin-órbita (ISO). Com a inclusão do ISO é aberto uma lacuna topologicamente não trivial e origina o efeito Hall de spin quântico (QSH) caracterizado por dois pares de estados de bordas sem intervalos dentro do gap (CHEN; ZHOU, 2016).

Pretendemos nos dedicar a abordagem continua para o espectro de energia dessas redes levando a investigação de condições de contorno para as nanofitas de Lieb, transição e Kagome com bordas retas, barbadadas e assimétricas no âmbito do modelo contínuo, de forma a encontrar resultados que sejam próximos aos obtidos pelo modelo *tight-binding* para baixas energias.

Por fim, nos propomos a explorar os efeitos do campos externos, tais como campo magnético, nos espectros de energia das folhas infinitas e nanofitas das redes de Lieb, transição e Kagome. Inicialmente, pretende-se encontrar os níveis de Landau, borboleta de Hofstadter, e condutividade Hall, para a rede de transição e comparar com os resultados já obtidos na literatura para os casos de Lieb e Kagome, a fim de verificar se tais efeitos correspondem aos casos limites dessas redes. Em seguida, pretende-se investigar os efeitos do campo magnético no espectro das nanofitas considerando os diferentes tipos de bordas. Realizando, assim, o estudo a respeito da dependência dos espectros de energia com o campo magnético para redes de Lieb, transição e Kagome, e suas nanoestruturas.

Esperamos que esses resultados sejam úteis para projetos de dispositivos nanoestruturados baseados em redes genéricas (orgânicas ou inorgânicas) provavelmente de Lieb, transição e Kagome, uma vez que efeitos de tamanho finito são relevantes em qualquer estrutura de confinamento quântico como as discutidas aqui sobre os estados de borda e física de banda plana.

REFERÊNCIAS

- ABRAMOVICI, G. Topology of contact points in lieb–kagome model. **The European Physical Journal B**, v. 94, n. 6, p. 1, 2021.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. [S. l.]: Holt, Rinehart and Winston, 1976. Appendix C.
- BHIMANAPATI, G. R.; LIN, Z.; MEUNIER, V.; JUNG, Y.; CHA, J.; DAS, S.; ROBINSON, J. A. Recent advances in two-dimensional materials beyond graphene. **ACS Nano**, v. 9, n. 12, p. 11509, 2015.
- BISWAS, T.; GHOSH, T. K. Magnetotransport properties of the $\alpha - t_3$ model. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 28, n. 49, p. 495302, 2016.
- BOLENS, A.; NAGAOSA, N. Topological states on the breathing kagome lattice. **Physical Review B**, v. 99, n. 16, p. 165141, 2019.
- BREY, L.; FERTIG, H. A. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the dirac equation. **Physical Review B**, v. 73, n. 23, p. 235411, 2006.
- CHANG, C. P.; WU, B. R.; CHEN, R. B.; LIN, M. F. Deformation effect on electronic and optical properties of nanographite ribbons. **Journal of Applied Physics**, v. 101, n. 6, p. 063506, 2007.
- CHEN, R.; ZHOU, B. Finite size effects on the helical edge states on the lieb lattice. **Chinese Physics B**, v. 25, n. 5, p. 067204, 2016.
- CHEN, Y.-R.; XU, Y.; WANG, J.; LIU, J. F.; MA, Z. Enhanced magneto optical response due to the flat band in nanoribbons made from the $\alpha - t_3$ lattice. **Physical Review B**, v. 99, n. 4, p. 045420, 2019.
- CHENG, X.; ZHOU, B.; ZHOU, B.; ZHOU, G. Strain effect on electronic structure and transport properties of zigzag $\alpha - t_3$ nanoribbons: A mean-field theoretical study. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 33, n. 21, p. 215301, 2021.
- COSTA, D. R. da; CHAVES, A.; FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M. Valley filtering in graphene due to substrate-induced mass potential. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 29, n. 21, p. 215502, 2017.
- da Costa, D. R.; ZARENIA, M.; CHAVES, A.; FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M. Energy levels of bilayer graphene quantum dots. **Physical Review B**, v. 92, n. 11, p. 115437, 2015.
- DENG, S.; SIMON, A.; KöHLER, J. The origin of a flat band. **Journal of Solid State Chemistry**, v. 176, n. 2, p. 412–416, 2003.
- DEPENBROCK, S.; MCCULLOCH, I. P.; SCHOLLWÖCK, U. Nature of the spin-liquid ground state of the $s=1/2$ heisenberg model on the kagome lattice. **Physical Review Letters**, v. 109, n. 6, p. 067201, 2012.
- DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S.; SAITO, R. **Physical Properties of Carbon Nanotubes**. [S. l.]: World Scientific, 1998.

- FUJITA, M.; WAKABAYASHI, K.; NAKADA, K.; KUSAKABE, K. Peculiar localized state at zigzag graphite edge. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 65, n. 7, p. 1920, 1996.
- GALASHEV, A. E.; RAKHMANOVA, O. R. Mechanical and thermal stability of graphene and graphene-based materials. **Physics-Uspokhi**, v. 57, n. 10, p. 970, 2014.
- GARRITY, K. F.; CHOUDHARY, K. Database of wannier tight-binding hamiltonians using high-throughput density functional theory. **Scientific Data**, v. 8, n. 1, p. 106, 2021.
- GUO, H.-M.; FRANZ, M. Topological insulator on the kagome lattice. **Physical Review B**, v. 80, n. 11, p. 113102, 2009.
- GUZMAN-SILVA, D.; MEJIA-CORTES, C.; BANDRES, M. A.; RECHTSMAN, M. C.; WEIMANN, S.; NOLTE, S.; VICENCIO, R. A. Experimental observation of bulk and edge transport in photonic lieb lattices. **New Journal of Physics**, v. 16, n. 6, p. 063061, 2014.
- GUZMÁN-SILVA, D.; MEJIA-CORTES, C.; BANDRES, M.; RRECHTSMAN, M. C.; WEIMANN, S.; NOLTE, S.; SZAMEIT, A. Bulk and edge transport in photonic lieb lattices. In: OPTICAL SOCIETY OF AMERICA. **Nonlinear Photonics**. [S. l.], 2014. p. NTh3A.6.
- HARRISON, P.; VALAVANIS, A. **Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures**. [S. l.]: John Wiley & Sons, 2016.
- HOVE, L. V. The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal. **Physical Review**, v. 89, n. 6, p. 1189, 1953.
- JIANG, W.; HUANG, H.; LIU, F. A lieb-like lattice in a covalent-organic framework and its stoner ferromagnetism. **Nature Communications**, v. 10, n. 1, p. 1, 2019.
- JIANG, W.; KANG, M.; HUANG, H.; XU, H.; LOW, T.; LIU, F. Topological band evolution between lieb and kagome lattices. **Physical Review B**, v. 99, n. 12, p. 125131, 2019.
- JIANG, W.; NI, X.; LIU, F. Exotic topological bands and quantum states in metal–organic and covalent–organic frameworks. **Accounts of Chemical Research**, v. 54, n. 2, p. 416, 2021.
- KATSNELSON, M. I. Graphene: Carbon in two dimensions. **Materials Today**, v. 10, n. 1-2, p. 20, 2007.
- KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. [S. l.]: Wiley, 1967.
- KUNO, Y. Extended flat band, entanglement, and topological properties in a creutz ladder. **Physical Review B**, v. 101, n. 18, p. 184112, 2020.
- LANDAU, L. D. Zur theorie der phasenumwandlungen ii. **Phys. Z. Sowjetunion**, v. 11, n. 545, p. 26–35, 1937.
- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. **Mechanics and electrodynamics**. [S. l.]: Elsevier, 2013.
- LEYKAM, D.; ANDREANOV, A.; FLACH, S. Artificial flat band systems: From lattice models to experiments. **Advances in Physics: X**, v. 3, n. 1, p. 1473052, 2018.
- LIEB, E. H. Two theorems on the hubbard model. **Physical Review Letters**, v. 62, n. 10, p. 1201, 1989.

- LIM, L.-K.; FUCHS, J. N.; PIECHON, F.; MONTAMBAUX, G. Dirac points emerging from flat bands in lieb-kagome lattices. **Physical Review B**, v. 101, n. 4, p. 045131, 2020.
- LIMA, W. P. **Efeitos de Strain nos Espectros de Energias do Grafeno e das Redes de Lieb e Kagome Calculados via Aproximação Tight-binding**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Ceará, 2020.
- LIU, G.; ZHU, S. L.; JIANG, S.; SUN, F.; LUI, W. M. Simulating and detecting the quantum spin hall effect in the kagome optical lattice. **Physical Review A**, v. 82, n. 5, p. 053605, 2010.
- LIU, T. Strain-induced pseudomagnetic field and quantum oscillations in kagome crystals. **Physical Review B**, v. 102, n. 4, p. 045151, 2020.
- LIU, Z.; LIU, F.; WU, Y.-S. Exotic electronic states in the world of flat bands: From theory to material. **Chinese Physics B**, v. 23, n. 7, p. 077308, 2014.
- MATAGNE, P. **Quantum Modelling of Single-Electron Charging in Vertical Quantum Dots**. Tese (Ph.D. thesis) – Universite de Liege, 2001.
- MERMIN, N. D. Crystalline order in two dimensions. **Physical review**, APS, v. 176, n. 1, p. 250, 1968.
- MORADINASAB, M.; NEMATIAN, H.; POURFATH, M.; FATHPOUR, M.; KOSINA, H. Analytical models of approximations for wave functions and energy dispersion in zigzag graphene nanoribbons. **Journal of Applied Physics**, v. 111, n. 7, p. 074318, 2012.
- MOULTON, B.; LU, J.; HAJNDL, R.; HARIHARAN, S.; ZAWOROTKO, M. J. Crystal engineering of a nanoscale kagomé lattice. **Angewandte Chemie**, v. 114, n. 15, p. 2945, 2002.
- MUKHERJEE, S.; SPRACKLEN, A.; CHOUDHURY, D.; GOLDMAN, N.; OHBERG, P.; ANDERSSON, E.; THOMSON, R. R. Observation of a localized flat-band state in a photonic lieb lattice. **Physical Review Letters**, v. 114, n. 24, p. 245504, 2015.
- NAKATA, Y.; OKADA, T.; NAKANISHI, T.; KITANO, M. Observation of flat band for terahertz spoof plasmons in a metallic kagomé lattice. **Physical Review B**, v. 85, n. 20, p. 205128, 2012.
- NETO, A. H. C.; GUINEA, F.; PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The electronic properties of graphene. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n. 1, p. 109, 2009.
- NEUPERT, T.; SANTOS, L.; CHAMON, C.; MUDRY, C. Fractional quantum hall states at zero magnetic field. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 23, p. 236804, 2011.
- NEVIUS, M. S.; CONRAD, M.; WANG, F.; CELIS, A.; NAIR, M. N.; TALEB-IBRAHIM, A.; CONRAD, E. H. Semiconducting graphene from highly ordered substrate interactions. **Physical Review Letters**, v. 115, n. 13, p. 136802, 2015.
- NEWTON, T. D.; WIGNER, E. P. Localized states for elementary systems. **Reviews of Modern Physics**, v. 21, n. 3, p. 400, 1949.
- NIȚĂ, M.; OSTAHE, B.; ALDEA, A. Spectral and transport properties of the two-dimensional lieb lattice. **Physical Review B**, v. 87, n. 12, p. 125428, 2013.

- NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.-e.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- PEIERLS, R. Quelques propriétés typiques des corps solides. In: **Annales de l'institut Henri Poincaré**. [S. l.: s. n.], 1935. v. 5, n. 3, p. 177–222.
- QI, X.-L.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. **Physical Review B**, v. 78, n. 19, p. 195424, 2008.
- SAITO, R.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S. **Physical Properties of Carbon Nanotubes**. [S. l.]: Imperial College Press, 1998.
- SHEN, R.; SHAO, L. B.; WANG, B.; XING, D. Y. Single dirac cone with a flat band touching on line-centered-square optical lattices. **Physical Review B**, v. 81, n. 4, p. 041410(R), 2010.
- SIMON, S. H. **The Oxford: Solid State Basics**. [S. l.]: Oxford University Press, 2013.
- SONI, R.; KAUSHAL, N.; OKAMOTO, S.; DAGOTTO, E. Flat bands and ferrimagnetic order in electronically correlated dice-lattice ribbons. **Physical Review B**, v. 102, n. 4, p. 045105, 2020.
- SUN, K.; GU, Z.; KATSURA, H.; SARMA, S. D. Nearly flatbands with nontrivial topology. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 23, p. 236803, 2011.
- TAN, H.; XU, Y.; WANG, J.; LIU, J. F.; MA, Z. Valley filter and giant magnetoresistance in zigzag $\alpha - t_3$ nanoribbons. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 54, n. 10, p. 105303, 2020.
- TANG, E.; MEI, J.-W.; WEN, X.-G. High-temperature fractional quantum hall states. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 23, p. 236802, 2011.
- THOMPSON-FLAGG, R. C.; MOURA, M. J.; MARDER, M. Rippling of graphene. **Europhysics Letters**, v. 85, n. 4, p. 46002, 2009.
- VIGH, M.; OROSZLÁNYI, L.; VAJNA, S.; SAN-JOSE, P.; DAVID, G.; CSERTI, J.; DORA, B. Diverging dc conductivity due to a flat band in a disordered system of pseudospin-1 dirac-weyl fermions. **Physical Review B**, v. 88, n. 16, p. 161413, 2013.
- WAKABAYASHI, K.; FUJITA, M.; AJIKI, H.; SIGRIST, M. Electronic and magnetic properties of nanographite ribbons. **Physical Review B**, v. 59, n. 12, p. 8271, 1999.
- WAKABAYASHI, K.; TAKANE, Y.; YAMAMOTO, M.; SIGRIST, M. Electronic transport properties of graphene nanoribbons. **New Journal of Physics**, v. 11, n. 9, p. 095016, 2009.
- WANG, J.; LIU, J.-F. Quantum spin hall phase transition in the $\alpha - t_3$ lattice. **Physical Review B**, v. 103, n. 7, p. 075419, 2021.
- WANG, W.-X.; GWEON, G. H.; FEDOROV, A. V.; FIRST, P. D.; HEER, W. A. de; LEE, D. H.; LANZARA, A. Atomic resolution imaging of the two-component dirac-landau levels in a gapped graphene monolayer. **Physical Review B**, v. 92, n. 16, p. 165420, 2015.

- WANG, Z.; ZHANG, P. Edge states and the integer quantum hall conductance in spin-chiral ferromagnetic kagome lattice. **Physical Review B**, v. 77, n. 12, p. 125119, 2008.
- WANG, Z.; ZHANG, P. Quantum spin hall effect and spin-charge separation in a kagomé lattice. **New Journal of Physics**, v. 12, n. 4, p. 043055, 2010.
- WEEKS, C.; FRANZ, M. Topological insulators on the lieb and perovskite lattices. **Physical Review B**, v. 82, n. 8, p. 085310, 2010.
- WURM, J.; RYCERZ, A.; ADAGIDELI, I.; WIMMER, M.; RICHTER, K.; BARANGER, H. U. Symmetry classes in graphene quantum dots: Universal spectral statistics, weak localization, and conductance fluctuations. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 5, p. 056806, 2009.
- XIA, S.; HU, Y.; SONG, D.; ZONG, Y.; TANG, L.; CHEN, Z. Demonstration of flat-band image transmission in optically induced lieb photonic lattices. **Optics Letters**, v. 41, n. 7, p. 1435, 2016.
- YAGMURCUKARDES, M.; PEETERS, F. M.; SENGER, R. T.; SAHIN, H. Nanoribbons: From fundamentals to state-of-the-art applications. **Applied Physics Reviews**, v. 3, n. 4, p. 041302, 2016.
- YOSHIDA, T.; MIZOGUCHI, T.; HATSUGAI, Y. Chiral edge modes in evolutionary game theory: A kagome network of rock-paper-scissors cycles. **Physical Review E**, v. 104, n. 2, p. 025003, 2021.
- YU, S.-L.; LI, J.-X.; SHENG, L. Quantum phase transition in hall conductivity on an anisotropic kagome lattice. **Physical Review B**, v. 80, n. 19, p. 193304, 2009.
- ZHENG, H.; WANG, Z. F.; LUO, T.; SHI, Q. W.; CHEN, J. Analytical study of electronic structure in armchair graphene nanoribbons. **Physical Review B**, v. 75, n. 16, p. 165414, 2007.
- ZHOU, S. Y.; GWEON, G. H.; FEDOROV, A. V.; FIRST, P. D.; HEER, W. A. de; LEE, D. H.; LANZARA, A. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. **Nature Materials**, v. 6, n. 10, p. 770, 2007.
- ZONG, Y.; XIA, S.; TANG, L.; SONG, D.; HU, Y.; PEI, Y.; CHEN, Z. Observation of localized flat-band states in kagome photonic lattices. **Optics Express**, v. 24, n. 8, p. 8877, 2016.

APÊNDICE A – DENSIDADE DE ESTADOS

A evolução da densidade de estados (DOS) é realizada por uma superposição de estados de energia individuais que ampliamos usando uma função gaussiana

$$f(E) = e^{-(E-E_0)^2/\gamma^2}, \quad (\text{A.1})$$

com fator de alargamento γ é menor que as separações dos níveis de energia. $\gamma = 0.05$ eV foi assumido para todas as figuras daqui em diante, salvo indicação em contrário. (da Costa *et al.*, 2015)

No estado fundamental de um sistema de N elétrons livres, os orbitais ocupados do sistema preenchem uma esfera de raia k_f . A energia de um elétron de vetor de onda k_f é dada por $\varepsilon_f = \hbar^2 k_f^2 / 2m$ (KITTEL, 1967).

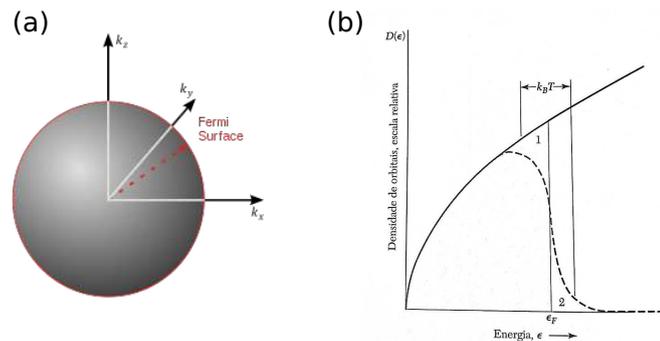


Figura 44 – (a) Superfície de Fermi na energia ε_f . (b) Densidade de estados de uma única partícula em função da energia para um gás de elétrons livres em três dimensões.

Vamos então determinar a expressão para o número de orbitais por intervalo de energia, $D(\varepsilon)$. O número total de orbitais com energia $\leq \varepsilon$ é dado por:

$$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}. \quad (\text{A.2})$$

Esta equação relaciona a energia de Fermi com a concentração de elétrons, N/V . Assim, a densidade de estados é dada por

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}, \quad (\text{A.3})$$

onde podemos expressar este resultado de forma mais simples, obtendo a seguinte expressão para a densidade de estados:

$$D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{3N}{2\varepsilon}. \quad (\text{A.4})$$

Este resultado nos mostra que, a menos de um fator numérico da ordem da unidade, o número de orbitais por intervalo de energia de Fermi é igual ao número total de elétrons de condução dividido pela energia de Fermi (KITTEL, 1967).

A densidade de estados depende dos limites dimensionais do próprio material, em um sistema bidimensional, as unidades de DOS são energia e área. Dessa forma, considerando um sólido nanométrico em forma de fio, com as dimensões dos eixos x e y muito pequenas, enquanto a dimensão ao longo do eixo z é muito grande, as energias e autoestados são

$$\varepsilon = \varepsilon_{i,j} + \hbar^2 k_z^2 / 2m \quad \psi(x,y,z) = \psi_{i,j}(x,y) e^{ikz}, \quad (\text{A.5})$$

onde i e j são números quânticos dos autoestados no plano xy .

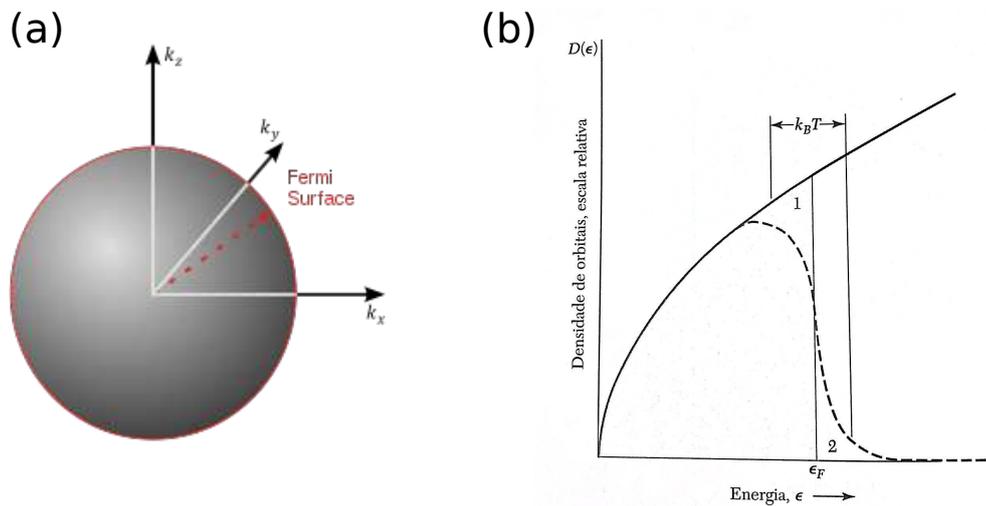


Figura 45 – Diagrama de um fio retangular quase unidimensional, juntamente com as relações de dispersão e a densidade de estados das sub-bandas unidimensionais.

A relação de dispersão consiste em uma série de sub-bandas unidimensionais, cada uma correspondente a um estado diferente de energia.