



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

ANILTON DE BRITO VIEIRA FILHO

**EFEITO DE TAMANHO FINITO EM ISOLANTES TOPOLÓGICOS Z_2 COM UM
TERMO DE ACOPLAMENTO DEVIDO AS INTERAÇÕES ENTRE SEGUNDOS E
TERCEIROS VIZINHOS EM DIFERENTES TIPOS DE BORDA**

FORTALEZA

2017

ANILTON DE BRITO VIEIRA FILHO

EFEITO DE TAMANHO FINITO EM ISOLANTES TOPOLÓGICOS Z_2 COM UM TERMO DE ACOPLAMENTO DEVIDO AS INTERAÇÕES ENTRE SEGUNDOS E TERCEIROS VIZINHOS EM DIFERENTES TIPOS DE BORDA

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Raimundo Nogueira Costa Filho .

FORTALEZA
2017

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

V713e Vieira Filho, Anilton de Brito.

Efeito de tamanho finito em isolantes topológicos Z_2 com um termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos em diferentes tipos de borda / Anilton de Brito Vieira Filho. – 2017.

160 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2017.

Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira Costa Filho.

1. Isolantes Topológicos. 2. Modos de Borda. 3. Gap no Bulk. 4. Tamanho Finito. I. Título.

CDD 530

ANILTON DE BRITO VIEIRA FILHO

EFEITO DE TAMANHO FINITO EM ISOLANTES TOPOLÓGICOS Z_2 COM UM TERMO DE ACOPLAMENTO DEVIDO AS INTERAÇÕES ENTRE SEGUNDOS E TERCEIROS VIZINHOS EM DIFERENTES TIPOS DE BORDA

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 13/06/2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Andrey Chaves
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Antonio de Macedo Filho
Universidade Estadual do Piauí (UESPI)

Prof. Dr. Tayroni Francisco de Alencar Alves
Universidade Federal do Piauí (UFPI)

*Parte dos resultados apresentados nesta tese foram aceitos na revista Physics Letters A - Volume 381, Issues 25–26, 12 July 2017, Pages 2123–2126.
DOI: 10.1016/j.physleta.2017.04.027*

AGRADECIMENTOS

Inicialmente, gostaria de agradecer a Universidade Federal do Ceará (UFC) e ao Programa de Pós-Graduação em Física, pela oportunidade de realizar os meus estudos e este trabalho.

Agradecimento especial ao meu orientador Professor Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho, pela orientação, paciência, discussões e amizade ao longo destes anos de convívio e pela realização deste trabalho.

A todos os professores que contribuíram para a minha formação acadêmica, em especial aos professores Memória, Carlos Alberto, José Pimentel e Valdemiro da Paz.

Ao professor Murilo pela amizade e discussões sobre diversos assuntos, que com certeza contribuíram muito no decorrer deste período.

Aos meus colegas: Paulo Leite, Natanael Rocha, Paulo Roberto e Aldene Alves.

Aos colegas e amigos da Universidade: Maurício, Thiago Muniz, Francisco Leandro, José Cardoso, Janete Batista e Manoel, pela amizade, ajuda e apoio durante o período que passei na UFC.

Aos meus pais, Anilton e Ocirene, pelo amor, dedicação, carinho, preocupação e apoio em minhas decisões.

As minhas irmãs, Ocimara e Beatriz, pelo amor e conselhos.

À minha esposa Francinalda Maria e a minha filha Isabella Maria, pelo amor, paciência, companheirismo e ajuda.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoas de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro

RESUMO

Isolantes topológicos (IT) são materiais eletrônicos que possuem um gap de energia no estado de *bulk* como um isolante convencional, mas também possuem estados de borda que permitem a condução de corrente que são invariantes sob pequenas deformações no material. Estes estados são possíveis por causa da combinação de uma forte interação *spin*-órbita e da simetria de reversão temporal. O modelo que utilizamos para descrever os isolantes topológicos Z_2 é constituído por um modelo de ligação forte sobre uma rede quadrada, onde cada sítio da rede contém dois orbitais, sendo que, um dos orbitais tem a paridade ímpar e o outro tem a paridade par. Esse modelo é uma simplificação do modelo Bernevig-Hughes-Zhang para poços quânticos que têm, recentemente, atraído muita atenção para realização de um isolante topológico bi-dimensional com estados de borda helicoidais protegidos. Nós investigamos o efeito de tamanho finito em isolante topológico Z_2 bi-dimensional com interações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos. Para isso, utilizamos o modelo *tight-binding* que mostra a existência de estados de borda helicoidais. Esse modelo é caracterizado por um termo de massa $M(k) = \Delta - Bk^2$, que é modificado de acordo com a variação dos parâmetros de interação entre segundos e terceiros vizinhos, assim modificando a região onde o material se comporta como isolante trivial ou um IT. Através da solução da Hamiltoniana *tight-binding* para uma geometria de tira de largura finita nós observamos que os estados de borda helicoidais sobre os dois lados do espectro de energia podem se acoplar produzindo assim um *gap* de energia. A interação entre segundos e terceiros vizinhos modifica o tamanho do gap desse espectro. Analisando o efeito de tamanho finito sobre os modos de borda de um TI, notamos que, o aumento cadenciado dos parâmetros de interação entre os segundos e terceiros vizinhos, provoca uma gradual modificação na relação de dispersão para um isolante topológico Z_2 , as quais trazem contribuições ao espectro, assim modificando a região onde o material é isolante.

Palavras-chave: Isolantes Topológicos. Modos de Borda. Gap no Bulk. Tamanho Finito.

ABSTRACT

Topological insulators are material electronic that possess a gap of energy in the states of bulk as a conventional insulator, but possess edge states that allow the current conduction which are invariant under small deformation of the material. These states are possible because of a combination of strong spin-orbit interactions and time reversal symmetry. The model that we use to describe the Z_2 topological insulators is constituted by a model strong binding under a square lattice, where each site on the network contains two orbital, being that, a orbital has odd parity and the other has even parity. The orbital with odd parity has a higher energy than the orbital with even parity. This model is a simplification of the Bernevig-Hughes-Zhang model for quantum wells that have recently attracted much attention for realization of two-dimensional topological insulators with protected helicoidal states of edge. We investigated the effect of finite size in two-dimensional Z_2 topological insulator with interactions between first, second and third neighbors. For this, we use a tight-binding model which shows the existence of helical edge states. This model is characterized by a mass term $M(k) = \Delta - Bk^2$, that is modified in accordance with the variation of parameters of interactions between second and third neighbors, so modifying the region where the material behaves as an insulator trivial or a topological insulator. Through the solution of tight-binding Hamiltoniana for a geometry of strip of finite width, We observe that the helicoidal edge on both sides of the spectrum of energy can couple together thus producing a gap of energy. The interaction between second and third neighbors modifies the size of the gap that spectrum. Analyzing the effect of finite size on the modes of edge of a topological insulator, we noticed that, the cadenciado increase of the parameters of interactions between the seconds and third neighbors, causes a gradual modification in the dispersion relation for a Z_2 topological insulator, which bring contributions to the spectrum, thus modifying the region where the material is insulation.

Keywords: Topological Insulator. Edge Modes. Gap in Bulk. Finite Size.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – As combinações dos vetores de onda e o Δ resultando num espectro <i>gapless</i> com os respectivos pontos na zona de Brillouin.	44
Tabela 2 – As combinações dos vetores de onda e o Δ resultando num espectro <i>gapless</i> com os respectivos pontos na zona de Brillouin.	55
Tabela 3 – As combinações dos vetores de onda e o Δ resultando num espectro <i>gapless</i> com os respectivos pontos na zona de Brillouin.	65

LISTA DE FIGURAS

<p>Figura 1 – Uma xícara de café é topologicamente equivalente a um toro, pois ambos possuem o mesmo número de buracos (genus = 1) e podem ser deformados um no outro.</p>	21
<p>Figura 2 – Sólido em $1d$ com, comprimento infinito. Diferentes escolhas da célula unitária levam à diferentes vetores de polarização elétrica (figuras a e b). Por outro lado a variação da polarização não depende da escolha da célula unitária [11].</p>	28
<p>Figura 3 – Dispersão eletrônica entre dois pontos na borda do Isolante Topológico que possuem degenerescência de Krammers. Em (a) o número de estados da superfície cruzando a E_F entre os pontos $\Gamma_a = 0$ e $\Gamma_b = \pi/a$ é par e em (b) ímpar. Quando um número ímpar de estados cruza a energia de Fermi existem estados metálicos topologicamente protegidos no contorno do material.</p>	32
<p>Figura 4 – Esquema da estrutura de bandas de $E_n(k)$. Os pares de Kramers se cruzam nos pontos invariantes a reversão temporal</p>	33
<p>Figura 5 – Estados de borda no EHQS. A esquerda interface entre um EHQS que possui $\nu = 1$ e o vácuo, $\nu = 0$. Existem estados de borda metálicos que são <i>spin</i> polarizados, isto é, partículas com diferentes componentes <i>up</i> e <i>down</i> do <i>spin</i> propagam em sentidos opostos sendo os dois “canais” de propagação conectados pela simetria de Reversão Temporal. A direita um esquema da estrutura de bandas onde o gap do bulk do material e os estados metálicos da borda <i>spin</i> polarizados são mostrados.</p>	39
<p>Figura 6 – Os orbitais <i>s</i> e <i>p</i> têm paridade diferente. O orbital <i>s</i> é esfericamente simétrica, enquanto o orbital <i>p</i> tem uma dependência angular em $im\phi$.</p>	41
<p>Figura 7 – Um esquema que explica a aproximação <i>tight-binding</i>. (a) Um único átomo com órbitas discretas para os elétrons. (b) Quando os átomos se juntam para formar um sólido, as funções de onda de duas órbitas (preto) de átomos adjacentes sobrepõem-se no espaço. (c) Se a sobreposição das órbitas é pequena, os elétrons estão ainda a ser considerado quase localizados ao redor das órbitas originais, mas possuem uma pequena probabilidade de tunelamento para as órbitas adjacentes formando uma banda de energia [20].</p>	41
<p>Figura 8 – (a)Esquematização de uma rede quadrada em duas dimensões.(b)Amplitude de <i>hopping</i> entre sítios vizinhos de uma rede quadrada.</p>	42

Figura 9 – Relação de dispersão para $A = 1.0, B = 1.0$, e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = 0.0$, (b) $\Delta = 1.0$, (c) $\Delta = 3.0$,(d) $\Delta = 4.0$, (e) $\Delta = 5.0$, (f) $\Delta = 6.0$, (g) $\Delta = 7.0$, (h) $\Delta = 8.0$	45
Figura 10 –A zona de Brillouin para uma rede quadrada mostrando os pontos de maior simetria Γ, X e M	46
Figura 11 –Relação de dispersão para $\Delta = 0, B = 0.5$, e oito diferentes valores para A . (a) $A = 0.0$, (b) $A = 0.5$, (c) $A = 1.0$, (d) $A = 1.5$, (e) $A = 2.0$, (f) $A = 2.5$, (g) $A = 3.0$, (h) $A = 3.5$	48
Figura 12 –A relação de dispersão para $\Delta = 0.0, B = 2$ e quatro valores diferentes para t_1 . a) $t_1 = 0.5$, b) $t_1 = 1.0$, $t_1 = 1.5$, $t_1 = 2.0$. [21]	49
Figura 13 –Relação de dispersão para $\Delta = 0.0, A = 1.5$, e oito diferentes valores para B . (a) $B = 0.0$, (b) $B = 0.1$, (c) $B = 0.3$, (d) $B = 0.4$, (e) $B = 0.5$, (f) $B = 0.7$, (g) $B = 1.0$, (h) $B = 1.2$	50
Figura 14 –O comportamento da energia com B para $\Delta = 0, A = 2.0$ e para três diferentes valores de k_y . (a) $k_y = 0.0$, (b) $k_y = 0.5\pi$, (c) $k_y = \pi$	51
Figura 15 –Relação de dispersão para $B = 0.5, A = 1.5$, e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = 0.0$, (b) $\Delta = 0.5$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$, (e) $\Delta = 2.5$, (f) $\Delta = 3.5$, (g) $\Delta = 4.0$, (h) $\Delta = 4.5$	52
Figura 16 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.2, B = 1.0, B_2 = 0.2$, e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.80$, (b) $\Delta = 0.0$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$, (e) $\Delta = 3.0$, (f) $\Delta = 4.8$, (g) $\Delta = 6.0$, (h) $\Delta = 7.2$	57
Figura 17 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.6, B = 1.0, B_2 = 0.6$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -2.4$, (b) $\Delta = -1.0$, (c) $\Delta = 0.0$, (d) $\Delta = 1.0$, (e) $\Delta = 2.0$, (f) $\Delta = 4.0$, (g) $\Delta = 5.6$, (h) $\Delta = 6.4$	58
Figura 18 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 1.0, B = 1.0, B_2 = 1.0$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -4.0$, (b) $\Delta = -2.0$, (c) $\Delta = -1.0$, (d) $\Delta = 0.0$, (e) $\Delta = 1.0$, (f) $\Delta = 2.0$, (g) $\Delta = 3.0$, (h) $\Delta = 8.0$	59
Figura 19 –Relação de dispersão para $\Delta = 2.0, B = 1.0, B_2 = 0.20$ e $A = 1.0$, e oito diferentes valores para A_2 . (a) $A_2 = 0.10$, (b) $A_2 = 0.20$, (c) $A_2 = 0.30$, (d) $A_2 = 0.40$, (e) $A_2 = 0.50$, (f) $A_2 = 0.60$, (g) $A_2 = 0.70$, (h) $A_2 = 0.80$	60
Figura 20 –Relação de dispersão para $\Delta = 0.0, B = 1.0, A = 1.0, A_2 = 0.20$, e oito diferentes valores para B_2 . (a) $B_2 = 0.00$, (b) $B_2 = 0.20$, (c) $B_2 = 0.40$, (d) $B_2 = 0.50$, (e) $B_2 = 0.70$, (f) $B_2 = 0.80$, (g) $B_2 = 0.90$, (h) $B_2 = 1.00$	61
Figura 21 –Relação de dispersão para $B = 0.5, B_2 = 0.10, A = 1.5, A_2 = 0.9$, e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.40$, (b) $\Delta = 0.0$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 1.5$, (e) $\Delta = 2.0$, (f) $\Delta = 2.4$, (g) $\Delta = 3.0$, (h) $\Delta = 3.6$	62

Figura 22 –Relação de dispersão para $A = 1.00, A_2 = 0.20, A_3 = 0.04, B = 1.00, B_2 = 0.20, B_3 = 0.04$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.96$, (b) $\Delta = 1.00$, (c) $\Delta = 2.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.64$, (f) $\Delta = 5.00$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.04$	68
Figura 23 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.5, A_3 = 0.25, B = 1.0, B_2 = 0.6, B_3 = 0.25$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -3.00$, (b) $\Delta = -1.00$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 2.00$, (f) $\Delta = 3.00$, (g) $\Delta = 4.00$, (h) $\Delta = 5.00$	69
Figura 24 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.8, A_3 = 0.35, B = 1.0, B_2 = 1.0, B_3 = 0.35$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -4.60$, (b) $\Delta = -2.00$, (c) $\Delta = -1.00$, (d) $\Delta = 0.00$, (e) $\Delta = 1.00$, (f) $\Delta = 2.00$, (g) $\Delta = 4.00$, (h) $\Delta = 5.80$	70
Figura 25 –Relação de dispersão para $\Delta = 2.0, B = 1.0, B_2 = 0.20, A_2 = 0.2, B_3 = 0.04$ e oito diferentes valores para A_3 . (a) $A_3 = 0.05$, (b) $A_3 = 0.10$, (c) $A_3 = 0.20$, (d) $A_3 = 0.30$, (e) $A_3 = 0.50$, (f) $A_3 = 0.60$, (g) $A_3 = 0.80$, (h) $A_3 = 1.00$	71
Figura 26 –Relação de dispersão para $\Delta = 0.0, B = 1.0, A = 1.0, A_2 = 0.20, A_3 = 0.20$ e oito diferentes valores para B_3 . (a) $B_3 = 0.00$, (b) $B_3 = 0.20$, (c) $B_3 = 0.40$, (d) $B_3 = 0.50$, (e) $B_2 = 0.60$, (f) $B_2 = 0.70$, (g) $B_2 = 0.80$, (h) $B_2 = 1.00$	72
Figura 27 –Relação de dispersão para $B = 0.5, B_2 = 0.10, B_3 = 0.02, A = 1.5, A_2 = 0.9, A_3 = 0.63$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.48$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 0.50$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 2.00$, (f) $\Delta = 2.32$, (g) $\Delta = 3.00$, (h) $\Delta = 3.50$	73
Figura 28 –A relação de dispersão para diferentes valores de Δ , para $t_1 = 0.5, t_2 = 0.3, t_3 = 0.2, B = 1, B_2 = 0.4$ e $B_3 = 0.2$ a) $\Delta = 0.0$, b) $\Delta = 0.6, \Delta = 2.0, \Delta = 2.6$. [21]	74
Figura 29 –Fita finita em uma dimensão	75
Figura 30 –Relação de dispersão para $A = 1.0, B = 1.0$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = 0.00$, (b) $\Delta = 1.00$, (c) $\Delta = 3.00$, (d) $\Delta = 4.00$, (e) $\Delta = 5.00$, (f) $\Delta = 6.00$, (g) $\Delta = 7.00$, (h) $\Delta = 8.00$	78
Figura 31 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.2, B = 1.0, B_2 = 0.2$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.80$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.80$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.20$	83
Figura 32 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.3, B = 1.0, B_2 = 0.3$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.20$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 2.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 5.20$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.80$	84

Figura 33 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.4, B = 1.0, B_2 = 0.4$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.60$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 5.60$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.40$	85
Figura 34 –Sobreposições das relações de dispersão da energia nos pontos onde ocorrem as transições de fase.(a), (b), (c) e (d) transição de fase no ponto Γ , (e) e (f) transição de fase nos pontos X_1 e X_2 , (g) e (h) transição de fase no ponto M .	86
Figura 35 –Relação de dispersão para $A = 1.00, A_2 = 0.20, A_3 = 0.04, B = 1.00, B_2 = 0.20, B_3 = 0.04$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.96$, (b) $\Delta = 1.00$, (c) $\Delta = 2.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.64$, (f) $\Delta = 5.00$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.04$	91
Figura 36 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.3, A_3 = 0.09, B = 1.0, B_2 = 0.3, B_3 = 0.09$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.56$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 4.84$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.44$	92
Figura 37 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.4, A_3 = 0.16, B = 1.0, B_2 = 0.4, B_3 = 0.16$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -2.24$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 4.96$, (g) $\Delta = 5.50$, (h) $\Delta = 5.76$	93
Figura 38 –Sobreposições das relações de dispersão da energia nos pontos onde ocorrem as transições de fase. (a), (b), (c) e (d) transição de fase no ponto Γ , (e) e (f) transição de fase nos pontos X_1 e X_2 , (g) e (h) transição de fase no ponto M .	94
Figura 39 –Geometria de borda em zigzag [22].	95
Figura 40 –Relação de dispersão para $A = 1.0, B = 1.0$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = 0.00$, (b) $\Delta = 0.20$, (c) $\Delta = 0.80$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 3.20$, (f) $\Delta = 4.00$, (g) $\Delta = 6.50$, (h) $\Delta = 8.00$	98
Figura 41 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.2, B = 1.0, B_2 = 0.2$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.80$, (b) $\Delta = -0.60$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.80$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.20$	103
Figura 42 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.3, B = 1.0, B_2 = 0.3$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.20$, (b) $\Delta = -1.00$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 5.20$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.80$	104
Figura 43 –Relação de dispersão para $A = 1.0, A_2 = 0.40, B = 1.0, B_2 = 0.40$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.60$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 5.60$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.40$	105

Figura 44 – Sobreposições das relações de dispersão da energia nos pontos onde ocorrem as transições de fase. (a) e (b) transição de fase no Γ , (c) e (d) transição de fase no M	106
Figura 45 – Relação de dispersão para $A = 1.00$, $A_2 = 0.20$, $A_3 = 0.04$, $B = 1.00$, $B_2 = 0.20$, $B_3 = 0.04$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.96$, (b) $\Delta = -0.90$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.64$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.04$	112
Figura 46 – Relação de dispersão para $A = 1.00$, $A_2 = 0.30$, $A_3 = 0.09$, $B = 1.00$, $B_2 = 0.03$, $B_3 = 0.09$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.56$, (b) $\Delta = -1.46$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.84$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.44$	113
Figura 47 – Relação de dispersão para $A = 1.00$, $A_2 = 0.40$, $A_3 = 0.16$, $B = 1.00$, $B_2 = 0.4$, $B_3 = 0.16$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -2.24$, (b) $\Delta = -2.00$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.96$, (g) $\Delta = 5.50$, (h) $\Delta = 5.75$	114
Figura 48 – Sobreposições das relações de dispersão da energia nos pontos onde ocorrem as transições de fase. (a) e (b) transição de fase no Γ , (c) e (d) transição de fase no M	115
Figura 49 – Espectro de energia para uma tira com (a) e (b) $L = 60$ sítios, (c) e (d) $L = 30$ sítios (e) e (f) $L = 15$ sítios (f) $L = 5$ sítios, (g) e (h) $L = 5$ sítios	117
Figura 50 – Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y . Os parâmetros do material são os mesmos da Figura 26.	118
Figura 51 – Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = 0.2$, (b) $\Delta = 0.5$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$, (e) $\Delta = 2.5$, (f) $\Delta = 3.9$	119
Figura 52 – Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -0.7$, (b) $\Delta = 0.0$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$, (e) $\Delta = 2.8$, (f) $\Delta = 3.5$	122
Figura 53 – Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -1.5$, (b) $\Delta = 1.2$, (c) $\Delta = 0.0$, (d) $\Delta = 3.6$, (e) $\Delta = 4.2$, (f) $\Delta = 5.3$	123
Figura 54 – Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y . . .	124
Figura 55 – Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -0.95$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 3.70$, (f) $\Delta = 4.62$	127

Figura 56 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -2.23$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 3.90$, (f) $\Delta = 4.80$	128
Figura 57 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y . . .	129
Figura 58 –Sobreposições das relações de dispersão da energia, para diferentes valores do termo de acoplamento. (a) e (b) 60 linhas atômicas, (c) e (d) 15 linhas atômicas.	132
Figura 59 –Comportamento da energia do <i>gap</i> nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos os valores para Δ para valores próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase.	133
Figura 60 –Comportamento da energia do <i>gap</i> nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 1.0	133
Figura 61 –Comportamento da energia do <i>gap</i> nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 2.0.	134
Figura 62 –Comportamento da energia do <i>gap</i> nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos os valores para Δ para pontos próximos ao ponto X_1 da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase topológica.	134
Figura 63 –Comportamento da energia do <i>gap</i> nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 6.0.	135
Figura 64 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = 0.20$, (b) $\Delta = 0.50$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 2.50$, (f) $\Delta = 3.90$	138
Figura 65 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -1.50$, (b) $\Delta = 1.20$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 3.60$, (e) $\Delta = 4.20$, (f) $\Delta = 5.30$	139
Figura 66 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -2.13$, (b) $\Delta = -1.00$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.20$	140
Figura 67 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y . . .	141
Figura 68 –Sobreposição das relações de dispersão da energia, para diferentes valores do termo de acoplamento, com geometria de borda em <i>zigzag</i> . (a) e (b) 60 linhas atômicas, (c) e (d) 15 linhas atômicas.	144

Figura 69 –Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos os valores de Δ para valores próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase.	145
Figura 70 –Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 1.0.	145
Figura 71 –Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 2.0.	146
Figura 72 –Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos os valores de Δ para pontos próximos ao ponto X_1 da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase topológica.	146
Figura 73 –Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 6.0.	147
Figura 74 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para diferentes tipos de borda. Fixamos os valores de Δ para valores próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase.	148
Figura 75 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para diferentes tipos de borda. Fixamos o valor de Δ para 1.0	149
Figura 76 –Magnitude do <i>gap</i> de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para diferentes tipos de borda. Fixamos o valor de Δ para 2.0	150
Figura 77 –(a) Representação de uma rede quadrada infinta. (b)Representação das interações entre primeiros segundos e terceiros vizinhos numa rede quadrada infinta . . .	154

LISTA DE SIGLAS

IT	Isolantes Topológicos
FMC	Física da Matéria Condensada
EHQ	Efeito Hall Quântico
ISHQ	Isolante Spin Hall Quântico
TR	Reversão Temporal
TKNN	Thouless, Kohmoto, Nightingale e Den Nijs
EHQS	Estado Hall Quântico de Spin
EHQI	Estado Hall Quântico Inteiro
QSH	Quantum Spin Hall

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
2	INVARIANTES TOPOLÓGICOS	21
2.1	Fase de Berry	22
2.1.1	Formalismo Geral	22
2.1.2	Determinando uma Expressão Alternativa para Curvatura de Berry	23
2.2	Condutância Hall e o Número de Chern	25
2.3	Polarização Elétrica numa Evolução Adiabática Cíclica	28
2.4	Invariante Z_2	30
2.4.1	Simetria de Reversão Temporal	31
2.4.2	Correspondência entre o Interior e o Contorno do Material	31
2.4.3	Formulas para o Invariante Z_2	33
3	ESTRUTURA DE BANDA DO <i>BULK</i>	40
3.1	Orbitais e Paridade	40
3.2	Construção do Modelo <i>Tight-Binding</i> para uma Rede Quadrada	41
3.3	Hamiltoniana <i>Tight Binding</i> para um Isolante Topológico com um termo de Acoplamento devido as Interações entre Segundos Vizinhos	53
3.4	Hamiltoniana <i>Tight Binding</i> com um termo de Acoplamento entre Segundos e Terceiros Vizinhos	63
4	MODOS DE BORDA	75
4.1	Geometria de Fita com a Borda Reta para a Interação entre Primeiros Vizinhos	75
4.2	Geometria de Fita com a Borda Reta Devido o Termo de Acoplamento entre Segundos Vizinhos	79
4.3	Geometria de Fita com a Borda Reta Devido ao Termo de Acoplamento entre Segundos e Terceiros Vizinhos	87
4.4	Geometria de Borda em Zigzag	95
4.4.1	Geometria de Borda em Zigzag para Interação entre Primeiros Vizinhos	95
4.4.2	Geometria de Borda em Zigzag com o Termo de Acoplamento entre Segundos Vizinhos	99
4.4.3	Geometria de Borda em Zigzag com o Termo de Acoplamento entre Segundos e Terceiros Vizinhos	107
5	EFEITO DE TAMANHO FINITO EM ISOLANTES TOPOLÓGICOS	116

5.0.4	Efeito de Tamanho Finito em Isolantes Topológicos com o Termo de Acoplamento Devido as Interações entre Segundos Vizinhos	120
5.0.5	Efeito de Tamanho Finito em Isolantes Topológicos com o Termo de Acoplamento Devido as Interações entre Segundos e Terceiros Vizinhos	125
5.1	Efeito de Tamanho Finito em Isolantes Topológicos com a Geometria de Borda em <i>Zigzag</i>	135
6	CONCLUSÃO	151
	APÊNDICE A - DETERMINAÇÃO DOS TERMOS DA HAMILTONIANA <i>TIGHT BINDING</i> , DEVIDO AS INTERAÇÕES ENTRE PRIMEIRO, SEGUNDOS E TERCEIROS VIZINHOS	154
	REFERÊNCIAS	160

1 INTRODUÇÃO

A Física da Matéria Condensada (FMC) é a parte da Física que estuda sistemas de muitas partículas, nos estados condensados, sólidos ou líquidos. Quando se estuda sistemas de muitas partículas, novos conceitos físicos e novas leis físicas que governam o comportamento coletivo desses sistemas podem surgir. Aspectos que permitem entender como a ordem emerge em tais sistemas constituídos de simples partículas como íons, momentos magnéticos, átomos ou elétrons, como eles interagem uns com os outros são objetivos de estudo da FMC [1].

Os paradigmas de Landau são largamente utilizados em FMC: um deles é a teoria da quebra de simetria (transições de fase). A teoria da quebra de simetrias de Landau nos diz que a existência de diferentes fases da matéria está associada com a existência de diferentes simetrias em cada fase, sendo a transição de fase uma transição que muda a simetria. Assim a FMC descreve as diferentes fases da matéria por meio de suas simetrias, sejam elas quebradas ou não. Por exemplo, a cristalização da água em gelo quebra a simetria translacional, o ordenamento magnético de *spins* quebra a simetria rotacional e a fase supercondutora quebra a simetria de calibre. Essa teoria descreve quase todas as fases conhecidas da matéria tais como: sólida, superflúida, ferromagnética, antiferromagnética e supercondutora, bem como descreve todas as transições de fase entre elas [2].

Porém, no início dos anos 80, um novo estado da matéria conhecido como Efeito Hall Quântico (EHQ) (inteiro e fracional) foi descoberto e verificou-se que os paradigmas de Landau não se aplicavam a este novo sistema, ensinando-nos que há um novo princípio organizacional da matéria diferente dos discutidos acima chamado de ordem topológica.

O único estado topológico da matéria conhecido até 2005 era o EHQ, porém nos últimos anos foi proposto teoricamente que estados de borda condutores e protegidos topologicamente, poderiam ser encontrados no contorno de isolantes bidimensionais ou na superfície de isolantes tridimensionais com uma grande interação *spin*-órbita. Tais materiais foram chamados de Isolantes Topológicos (IT), pois possuem um interior (bulk) que é isolante e estados condutores em sua borda que são invariantes sob pequenas deformações do material. Nestes materiais a interação entre o *spin* dos elétrons e o campo magnético criado pelos átomos (interação *spin*-órbita) faz o papel de um campo magnético externo. Como resultado desta interação, elétrons com *spin* de sinal oposto propagam-se em sentidos contrários nas bordas do material. Estes estados da matéria são invariantes sob Reversão Temporal. Todos isolantes encontrados na natureza que são invariantes sob Reversão Temporal e com um estado fundamental não degenerado, se enquadram em duas classes topológicas distintas; uma trivial, onde os estados da superfície são isolantes, e uma topologicamente não trivial, onde o interior do material possui um gap, sendo

um isolante de banda, e os estados da superfície são condutores com um gap nulo. Neste caso o transporte realizado por férmions de Dirac, que são partículas cuja relação de dispersão é linear, sendo, portanto descritas por uma equação similar a equação de Dirac em uma ou duas dimensões. Note que em tais materiais a dinâmica dos portadores de carga superficiais não é governada pela equação de Schrodinger, mas sim por uma equação semelhante à equação de Dirac, que governa a dinâmica das partículas relativísticas [3, 4, 5].

Este novo estado da matéria foi primeiramente predito para ocorrer em poços quânticos de materiais bidimensionais onde ficou conhecido como Isolante Spin Hall Quântico (ISHQ). Posteriormente, os Isolantes Topológicos tridimensionais foram preditos teoricamente, como uma generalização do ISHQ e foram então detectados experimentalmente.

Nesta tese de doutorado é feito um estudo sobre o efeito do tamanho finito para Isolantes Topológicos através de uma Hamiltoniana *tight-binding* forjada numa rede quadrada, onde levaremos em consideração a perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos. A possível utilização dos Isolantes Topológicos na construção de um dispositivo eletrônico fará com que estes materiais estejam sujeitos a perturbações. Por isso, entender o comportamento dos Isolantes Topológicos quando sujeitos a estas perturbações é importante. Os principais objetivos dos trabalhos encontrados na literatura sobre Isolantes Topológicos é o estudo das propriedades físicas envolvidas e a possibilidade da aplicação destes materiais na spintrônica, e assim utilizá-los na construção de transistores baseados nessa tecnologia [7].

Este trabalho está organizado em 6 capítulos. No capítulo 2 discutimos alguns aspectos básicos sobre estrutura eletrônica e propriedades gerais dos Isolantes Topológicos. No capítulo 3, enfatizamos a construção da Hamiltoniana *tight-binding* aplicada a Isolantes Topológicos. No capítulo 4 ilustramos os modos de borda para dois tipos de geometrias de borda para materiais que se comportam como Isolantes Topológicos. E, por fim, no capítulo 5 utilizamos os conceitos adquiridos sobre a Hamiltoniana *tight-binding* que descreve um Isolante Topológico, vista nos capítulos anteriores e aplicamos no estudo do efeito de tamanho finito para uma rede quadrada com geometria de borda reta e *zigzag*.

2 INVARIANTES TOPOLÓGICOS

A quantização precisa da condutividade Hall é explicada pelo fato que ela é um invariante topológico: só pode assumir valores inteiros, em unidades de e^2/h , independente dos detalhes do material, como sua forma geométrica e tipo de átomos constituintes [6]. Os matemáticos introduziram o conceito de topologia e seus invariantes para classificar diferentes objetos em classes amplas onde os detalhes geométricos dos objetos não são importantes [8]. Por exemplo, superfícies bidimensionais são classificadas pelo número de buracos que elas possuem ou o seu genus. A superfície de uma esfera é topologicamente equivalente à superfície de um cubo ou um elipsoide, pois qualquer uma pode ser deformado suave e continuamente até assumir a forma de qualquer outra, sem criar buracos na superfície. Similarmente uma xícara de café é topologicamente equivalente a uma rosquinha com um furo no meio ou um toro, (figura 1), pois ambos podem ser deformados suavemente um no outro.

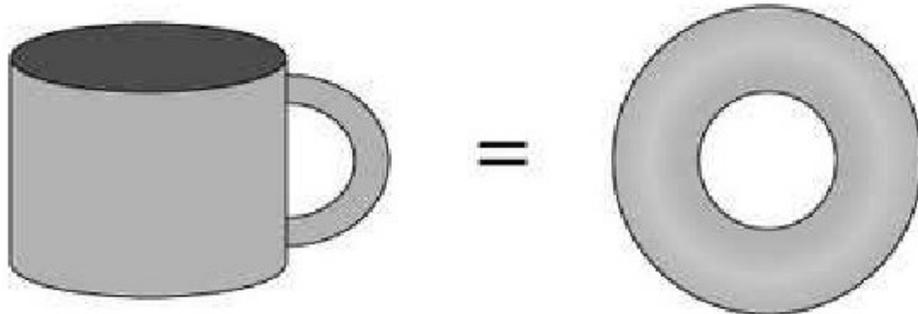


Figura 1: Uma xícara de café é topologicamente equivalente a um toro, pois ambos possuem o mesmo número de buracos (genus = 1) e podem ser deformados um no outro.

Do ponto de vista matemático, a classificação topológica foca em distinções fundamentais entre as formas e descarta pequenos detalhes, sendo a deformação suave do objeto (aquela que não rasga ou fura o objeto) o conceito fundamental para agrupá-lo de acordo com esta classificação. Já em Física, pode-se considerar, por exemplo, Hamiltonianas de sistemas de muitas partículas com um gap de energia entre o estado fundamental e os estados excitados, o conceito de deformação suave é definido como uma mudança adiabática na Hamiltoniana ou em algum parâmetro dela que não fecha o gap de energia [2].

2.1 Fase de Berry

Foi primeiramente descoberta por Michael Berry em 1984 [9], sendo uns dos mais importantes conceitos em teorias de bandas topológicas. A fase de Berry vem desempenhando um importante papel nos recentes anos devido à várias descobertas e redescobertas na qual essa fase ou desempenha o papel crucial ou oferece uma nova perspectiva. A fase de Berry é um processo holonômico (sistema que não retorna para o seu estado original depois de uma evolução cíclica). A fase de Berry surge devido a evolução adiabática de um sistema quântico. A evolução adiabática em mecânica quântica pode ser definida como um processo na qual nenhuma transição entre diferentes autoestados ocorrem. Essas evoluções adiabáticas são consideradas como uma suave variação dos campos (elétrico, magnético, tensão e etc), modificando assim a função de onda em outros termos do que justamente a fase dinâmica. A evolução cíclica da função de onda, concede ao estado original de um sistema físico, uma mudança em sua fase, e essa mudança em sua fase é a soma de uma fase dinâmica e de uma fase geométrica.

Logo a fase de Berry é uma fase geométrica invariante de gauge que é recolhida por uma função de onda quando traçamos uma curva fechada no parâmetro do espaço fornecendo uma variação que é adiabática. Essa curva fechada corresponde à condição $r(t_0) = r(t_0 + T)$.

2.1.1 Formalismo Geral

Vamos considerar um sistema físico com a sua Hamiltoniana dependente do tempo $H(\mathbf{R})$, a sua dependência do tempo é dada através de vários parâmetros (tais como campo magnético, campo elétrico, fluxo e tensão) classificados por um vetor $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3 \dots)$ onde $R_i = R_i(t)$. Estamos interessados na evolução adiabática do sistema ao longo de um caminho C no parâmetro do espaço.

Vamos introduzir uma base ortogonal instantânea dos autoestados $|n(\mathbf{R})\rangle$ de $H(\mathbf{R})$ em cada ponto \mathbf{R} , logo

$$H(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle. \quad (2.1)$$

Assumindo que o sistema esteja inicialmente no n -ésimo autoestado da Hamiltoniana H , $|\psi(\mathbf{R}(0))\rangle = |n(\mathbf{R}(0))\rangle$. O teorema adiabático afirma que se H varia adiabaticamente, $|\psi(\mathbf{R}(t))\rangle$, permanece no tempo evoluindo o n -ésimo autoestado de H . O sistema não realiza qualquer transição em outro autoestado, embora as autoenergias possam variar com o tempo [8]. A evolução lenta de H nos permite fazer um *ansatz*, $|\psi_n(\mathbf{R}(t))\rangle = c_n(t)|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ onde $c_n(t)$ são coeficientes dependentes do tempo.

A evolução do sistema é dada por,

$$H(\mathbf{R})|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = E_n(\mathbf{R}(t))|\psi(t)\rangle \quad (2.2)$$

e substituindo na equação (2.1) e projetando o resultado no autoestado de $\langle n(\mathbf{R}(t)) |$, temos:

$$\langle n(\mathbf{R}(t)) | i\hbar \frac{d}{dt} (c_n(t) |n(\mathbf{R}(t))\rangle) = \langle n(\mathbf{R}(t)) | E_n(\mathbf{R}(t)) c_n(t) |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (2.3)$$

$$\frac{d}{dt} c_n(t) = \left(-\langle n(\mathbf{R}(t)) | \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle - \frac{i}{\hbar} E_n(\mathbf{R}(t)) \right) c_n \quad (2.4)$$

$$\frac{d}{dt} c_n(t) = \left(-\langle n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_r |n(\mathbf{R}(t))\rangle \dot{r}(t) - \frac{i}{\hbar} E_n(\mathbf{R}(t)) \right) c_n \quad (2.5)$$

$$c_n(t) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [E_n(\mathbf{R}(t)) - i\hbar \langle n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_r |n(\mathbf{R}(t))\rangle \dot{r}(t)] dt' \right), \quad (2.6)$$

onde $\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_n(\mathbf{R}(t)) dt' \right)$ é conhecido como o fator de fase dinâmico.

O segundo termo da exponencial fica

$$i \int_c \langle n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_r |n(\mathbf{R}(t))\rangle d\mathbf{R}, \quad (2.7)$$

onde $\gamma_n = \int_c i \langle n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_r |n(\mathbf{R}(t))\rangle d\mathbf{R}$ é a fase de Berry. Conseqüentemente a função de onda evoluida no tempo é dada por,

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' \right) \exp[i\gamma_n(t)] |n(\mathbf{R}(t))\rangle, \quad (2.8)$$

onde $\exp[i\gamma_n(t)]$ é o fator de fase geométrico

Podemos observar que a fase de Berry é puramente uma fase geométrica i.e. ela depende somente do caminho sendo insensível à velocidade com que o caminho está sendo traçado adiabaticamente. Por analogia com o transporte de elétrons num campo magnético, nós podemos agora definir uma função vetorial chamada de conexão de Berry, ou potencial vetor de Berry, logo

$$\gamma_n = \oint_i \langle n(\mathbf{R}(t)) | \nabla_r |n(\mathbf{R}(t))\rangle d\mathbf{R} = \int_c A_n(\mathbf{R}) d\mathbf{R} = \int_s \vec{\nabla} \times A_n(\mathbf{R}) ds \quad (2.9)$$

onde $A_n(\mathbf{R})$ é a conexão de Berry e $\vec{\nabla} \times A_n(\mathbf{R})$ é a curvatura de Berry (Ω)

2.1.2 Determinando uma Expressão Alternativa para Curvatura de Berry

Sabendo que a curvatura de Berry é dada pela equação (2.10)

$$\Omega^n(\mathbf{R}) = \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}), \quad (2.10)$$

podemos definir um tensor campo de gauge em analogia com a eletrodinâmica, usando o potencial vetor de Berry,

$$\Omega_{\mu,\nu}^n(\mathbf{R}) = \frac{\partial}{\partial R^\mu} A_\nu^n(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial R^\nu} A_\mu^n(\mathbf{R}). \quad (2.11)$$

Substituindo o valor da conexão de Berry, temos

$$\Omega_{\mu,\nu}^n(\mathbf{R}) = [\langle \partial_\mu n(\mathbf{R}(t)) | \partial_\nu n(\mathbf{R}(t)) \rangle]. \quad (2.12)$$

Usando a seguinte relação de completeza,

$$\sum_n |n(\mathbf{R}(t))\rangle \langle n(\mathbf{R}(t))| = 1 \quad (2.13)$$

e a identidade

$$\langle m(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}(t)) \rangle = \frac{\langle m(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) | n(\mathbf{R}(t)) \rangle}{E_n - E_m}, \quad (2.14)$$

podemos observar que γ_n é real e $\langle m(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}(t)) \rangle$ é puramente imaginário, logo

$$\gamma_n(c) = -\text{Im} \oint_c \langle m(\mathbf{R}(t)) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}(t)) \rangle d\mathbf{R}. \quad (2.15)$$

Pelo teorema de Stokes temos

$$\gamma_n(c) = -\text{Im} \int \int_c d\mathbf{s} \cdot \langle \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t)) | \times | \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}(t)) \rangle. \quad (2.16)$$

Inserindo a relação de completeza $\sum_m |m\rangle \langle m|$ em $\varepsilon_{ijk} \langle \nabla_j n | \nabla_k n \rangle$, temos

$$\sum_m \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_j n | m \rangle \langle m | \nabla_k n \rangle = \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_j n | n \rangle \langle n | \nabla_k n \rangle + \sum_{m \neq n} \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_j n | m \rangle \langle m | \nabla_k n \rangle. \quad (2.17)$$

Observe que o primeiro termo do lado direito da equação não é levado em consideração porque ambos, $\langle \nabla_j n(\mathbf{R}) | n(\mathbf{R}) \rangle$ e $\langle n(\mathbf{R}) | \nabla_j n(\mathbf{R}) \rangle$ são imaginários e o produto é real, dando nenhuma contribuição para o vetor imaginário que é utilizado para calcular a fase de Berry. Portanto,

$$\gamma_n(c) = -\text{Im} \int \int_c d\mathbf{s}_i \sum_{m \neq n} \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_j n(\mathbf{R}(t)) | m \rangle \langle m | \nabla_k n(\mathbf{R}(t)) \rangle \quad (2.18)$$

$$= -\text{Im} \int \int_c d\mathbf{s} \cdot \sum_{m \neq n} \langle \nabla_j n(\mathbf{R}(t)) | m \rangle \times \langle m | \nabla_j n(\mathbf{R}(t)) \rangle. \quad (2.19)$$

Substituindo a equação (2.14) na (2.18), temos

$$\gamma_n(c) = -\text{Im} \int \int_c d\mathbf{s} \cdot \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(\mathbf{R}(t)) | \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} \hat{H}(\mathbf{R}(t)) | m(\mathbf{R}(t)) \rangle \times \langle m(\mathbf{R}(t)) | \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} \hat{H}(\mathbf{R}(t)) | n(\mathbf{R}(t)) \rangle}{(E_n^{\mathbf{R}} - E_m^{\mathbf{R}})^2} \quad (2.20)$$

onde

$$\vec{V}_n(\mathbf{R}) = Im \sum_{m \neq n} \frac{\langle n(\mathbf{R}(t)) | \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} \hat{H}(\mathbf{R}(t)) | m(\mathbf{R}(t)) \rangle \times \langle m(\mathbf{R}(t)) | \vec{\nabla}_{\mathbf{R}} \hat{H}(\mathbf{R}(t)) | n(\mathbf{R}(t)) \rangle}{(E_n^{\mathbf{R}} - E_m^{\mathbf{R}})^2}. \quad (2.21)$$

de tal forma que a fase de Berry é expressa como a integral de caminho

$$\gamma_n(c) = - \int_c \int_c d\mathbf{s} \cdot \vec{V}_n(\mathbf{R}). \quad (2.22)$$

Observe que a equação acima não depende do gauge, tendo, assim, vantagem sobre as equações que dependem do gauge tais como a curvatura de Berry.

Em bandas de Bloch a curvatura de Berry é definida como

$$\Omega^n(k) = \nabla_k \times \langle u_n(k) | i \nabla_k | u_n(k) \rangle, \quad (2.23)$$

onde os dois pontos k e $k + K$ na zona de Brillouin podem ser identificados como o mesmo ponto. Nesse caso a fase de Berry sobre a zona de Brillouin é

$$\gamma(c) = \int_{BZ} d\vec{k} \cdot \langle u_n(k) | i \nabla_k | u_n(k) \rangle. \quad (2.24)$$

2.2 Condutância Hall e o Número de Chern

Nessa seção nós mostraremos que a condutância Hall de um sistema é relacionada com a integral da curvatura de Berry. Para isso, inicialmente vamos considerar um gás de elétrons bidimensional sujeito a um campo magnético perpendicular e a um campo elétrico fraco no plano, de tal forma a termos resposta linear. Para não quebrar a periodicidade do potencial escalar vamos escolher um gauge dependente do tempo para o campo elétrico, no caso $E = \partial A_E / \partial t$, $A_E = -Et$. A Hamiltoniana é

$$H = \frac{(\vec{\Pi} - e\mathbf{E}t)^2}{2m} + V_l, \quad (2.25)$$

onde V_l é o potencial da rede e $\vec{\Pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}_0$ é o operador velocidade, sendo \mathbf{A}_0 o potencial vetor magnético.

Vamos usar a dependência em k na Hamiltoniana e a função periódica da célula u_{nk} , elas são relacionados pela seguinte expressão,

$$\hat{H} | u_{nk} \rangle = E_{nk} | u_{nk} \rangle. \quad (2.26)$$

O sistema pode ser resolvido com o conhecimento dos autovalores e autovetores de $\hat{H}_0 | u_{nk}^0 \rangle = E_{nk}^0 | u_{nk}^0 \rangle$. Observe que o campo elétrico pode ser tratado como uma perturbação.

Para uma aproximação da perturbação em primeira ordem temos,

$$|u_{nk}(t)\rangle = |n\rangle - i\hbar \sum_{n' \neq n} \frac{|n'\rangle \langle n' | \frac{\partial}{\partial t} |n\rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}}, \quad (2.27)$$

onde $|n\rangle = |u_{nk}^0(t)\rangle$, $\epsilon_n = E_{nk}^0(t)$ e $k(t) = k_0 - eEt/\hbar$, lembrando que a velocidade da partícula na n ésima banda é dada por

$$v_n(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial \mathbf{k}} = \langle u_{nk} | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{k}} | u_{nk} \rangle. \quad (2.28)$$

Substituindo a equação (2.28) na (2.27), temos

$$v_n k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \mathbf{k}} - i \sum_{n' \neq n} \left(\langle n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{k}} | n' \rangle \frac{\langle n' | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}} - c.h \right) \quad (2.29)$$

onde conservamos os termos até primeira ordem. Observe que o primeiro termo da equação (2.29) é a velocidade de grupo na ausência de perturbação.

Substituindo-se a identidade,

$$\langle n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{k}} | n' \rangle = (\epsilon_n - \epsilon_{n'}) \langle n | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | n' \rangle \quad (2.30)$$

na equação da velocidade temos,

$$v_n k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \mathbf{k}} - i \sum_{n' \neq n} \left((\epsilon_n - \epsilon_{n'}) \langle n | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | n' \rangle \frac{\langle n' | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}} - (\epsilon_n - \epsilon_{n'}) \frac{\langle n | \frac{\partial}{\partial t} | n' \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_{n'}} \langle n' | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | n \rangle \right) \quad (2.31)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \mathbf{k}} - i \left(\left\langle \frac{\partial n}{\partial \mathbf{k}} \middle| \frac{\partial n}{\partial t} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial n}{\partial t} \middle| \frac{\partial n}{\partial \mathbf{R}} \right\rangle \right) \quad (2.32)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \mathbf{k}} - \Omega_{q,t}^n, \quad (2.33)$$

onde $\Omega_{q,t}^n = i \langle \nabla_{\mathbf{k}} n | \partial_t n \rangle - \langle \partial_t n | \nabla_{\mathbf{k}} n \rangle$.

Assim, na presença de um campo elétrico um elétron pode adquirir uma velocidade transversa anômala proporcional a curvatura de Berry.

Observe que,

$$\mathbf{k}(t) = \overbrace{\mathbf{k}_0 - e \frac{\vec{E}t}{\hbar}}^{\text{transformação de gauge}}, \quad (2.34)$$

onde \vec{k} está relacionado com o campo elétrico pela expressão

$$\frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e \frac{\vec{E}}{\hbar}, \quad (2.35)$$

com $d\mathbf{k}_0/dt = 0$. Logo

$$\frac{d}{dt} = \frac{d}{dk} \frac{dk}{dt} = -e \frac{\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k \quad (2.36)$$

e substituindo na equação (2.33) da velocidade, temos

$$v_n k = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_n - \frac{e}{\hbar} (\vec{E} \times \Omega_n), \quad (2.37)$$

onde $\Omega_n = i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle \nabla_{\mathbf{k},\beta} n | \nabla_{\mathbf{k},\alpha} n \rangle$.

A corrente elétrica na presença de \vec{E} é dada por,

$$\vec{j} = -e \sum_n \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \vec{v}_n(k) f(k) \quad (2.38)$$

logo

$$\vec{j}_n = \sum_n \int_{BZ} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} (-e) \left(-\frac{e}{\hbar} (\vec{E} \times \Omega_n) \right) f(\mathbf{k}), \quad (2.39)$$

onde $f(\mathbf{k}) = 1$ para todas as bandas preenchidas.

Lembrando que $\Omega_n(\mathbf{k})$ é análogo ao campo \vec{B} , como no nosso caso $\vec{B} = B\hat{z}$, logo $\Omega_n(\mathbf{k}) = \Omega_n(\mathbf{k})\hat{z}$. Assim

$$\vec{j}_n = \sum_n \int_{BZ} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{e^2}{\hbar} \vec{E} \times \hat{z} \Omega_n(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{(2\pi)^2 \hbar} \vec{E} \times \hat{z} \sum_n \int_{BZ} d^2\mathbf{k} \Omega_n(\mathbf{k}), \quad (2.40)$$

lembrando que, para respostas lineares

$$j_\alpha = \sigma_H \varepsilon_{\alpha\beta} E_\beta, \quad (2.41)$$

e ao comparar as equações (2.40) e (2.41), temos

$$\sigma_H = \frac{e^2}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_n \int_{BZ} d^2\mathbf{k} \Omega_{k_x, k_y}^n \quad (2.42)$$

$$= \frac{e^2}{h} C_n, \quad (2.43)$$

onde C_n é o número de Chern.

Uma importante consequência da equação (2.42) é que a integral sobre a curvatura de Berry num caminho fechado é em $2d$ (tal como a zona de Brillouin $2d$) é um múltiplo de 2π que é igual ao número de vezes que $\hat{d}(k)$ circunda uma esfera como função de \mathbf{k} . Isso define um invariante topológico chamado número de Chern [10].

2.3 Polarização Elétrica numa Evolução Adiabática Cíclica

A polarização elétrica P de um sólido periódico é infinita, e geralmente não bem definida. A razão para isso acontecer, é porque num sólido periódico a polarização elétrica depende da escolha da célula unitária [11].

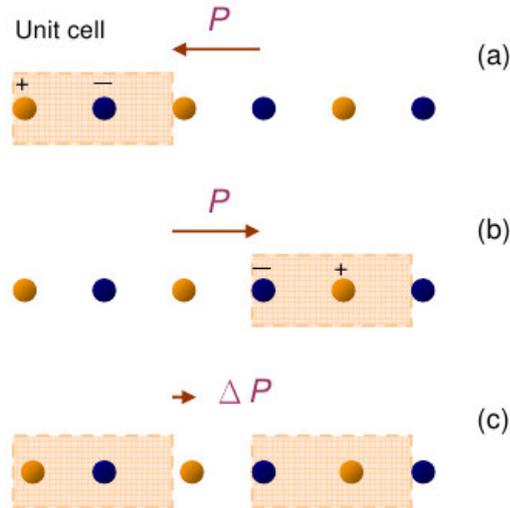


Figura 2: Sólido em $1d$ com, comprimento infinito. Diferentes escolhas da célula unitária levam à diferentes vetores de polarização elétrica (figuras a e b). Por outro lado a variação da polarização não depende da escolha da célula unitária [11].

A teoria da polarização elétrica em livros textos convencionais é aplicada somente em sólidos consistindo de cargas localizadas, tais como sólidos iônicos e moleculares.

Experimentalmente, variações na polarização elétrica dos sólidos podem ser induzidas por vários meios, incluindo a aplicação de uma tensão (piezoelectricidade) ou variações na temperatura (piezoelectricidade).

A nossa intenção é encontrar uma simples fórmula para calcular as variações finitas da polarização de um sólido cristalino. Para isso usaremos a equação de Maxwell

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho(t), \quad (2.44)$$

a equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (2.45)$$

na equação

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} - \mathbf{j} \right) = 0, \quad (2.46)$$

obtemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \mathbf{j} \Rightarrow \int d\mathbf{P} = \int \mathbf{j} dt, \quad (2.47)$$

ou seja

$$\Delta \mathbf{P} = \mathbf{P}(\Delta t) - \mathbf{P}(0) = \int_0^{\Delta t} dt \mathbf{j}. \quad (2.48)$$

onde temos a variação na polarização em termos da densidade de corrente. Essa equação é a base para a teoria moderna da polarização. Num processo adiabático temos,

$$\mathbf{j} = -e \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} v_n(\mathbf{k}) f(k), \quad (2.49)$$

e para todas as bandas preenchidas a distribuição de Fermi-Dirac é igual a um e $v_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E_n(\mathbf{k}) - \Omega_{k,t}^m$, logo

$$\mathbf{j} = e \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \Omega_{k,t}^m, \quad (2.50)$$

substituindo a densidade de corrente na equação (2.48), temos

$$\Delta P_\alpha = e \sum_n \int_0^t dt \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \Omega_{k_\alpha,t}^m. \quad (2.51)$$

Parametrizando a transformação por um escalar $\lambda(t)$, temos

$$\Delta P_\alpha = e \sum_n \int_{\lambda(0)}^{\lambda(t)} d\lambda \int_{BZ} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} \Omega_{k_\alpha,t}^m. \quad (2.52)$$

Numa evolução cíclica, $\lambda(\tau)$ e $\lambda(0)$ representam o mesmo estado onde a integral sobre \mathbf{k} se estende sobre qualquer célula primitiva do espaço recíproco.

Pela função de Bloch, nós podemos definir a função de Wannier associada com o vetor da rede,

$$|R, n\rangle = \frac{V}{(2\pi)^d} \int_{BZ} d\frac{d}{\mathbf{k}} \exp[-i\mathbf{k}(\mathbf{R} - \mathbf{r})] |u_n, \mathbf{k}\rangle. \quad (2.53)$$

Uma vez que temos as funções de Wannier, nós podemos localizar os centros de Wannier para uma célula unitária, onde $\mathbf{R} = 0$, assim

$$|0, n\rangle = \frac{V}{(2\pi)^d} \int_{BZ} d\frac{d}{\mathbf{k}} \exp[i\mathbf{k}\mathbf{r}] |u_n, \mathbf{k}\rangle, \quad (2.54)$$

sabendo que

$$P = \frac{-e}{V} \sum_n \langle R = 0, n | \mathbf{r} | R = 0, n \rangle, \quad (2.55)$$

onde $|\psi_{nk}\rangle = \sqrt{N} |u_n, \mathbf{k}\rangle \exp[i\mathbf{k}\mathbf{r}]$. Logo

$$|0, n\rangle = \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^d}} \int_{BZ} |\psi_{nk}\rangle d\mathbf{k}. \quad (2.56)$$

Aplicando o operador \mathbf{r} temos,

$$\mathbf{r}|0, n\rangle = \mathbf{r} \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^d}} \int_{BZ} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle d\mathbf{k} = \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^d}} \int_{BZ} \mathbf{r} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle d\mathbf{k}, \quad (2.57)$$

onde \mathbf{r} e \mathbf{k} são variáveis independentes, o gradiente do orbital de Bloch com respeito a \mathbf{k} é

$$\nabla_{\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle = i \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] \nabla_{\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle - i \nabla_{\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.58)$$

Substituindo na equação (2.57), temos

$$\mathbf{r}|0, n\rangle = \sqrt{\frac{V}{(2\pi)^3}} \int_{BZ} i \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] \nabla_{\mathbf{k}} |u_{n\mathbf{k}}\rangle d\mathbf{k}. \quad (2.59)$$

Multiplicando a equação (2.59) por $\langle 0, n|$ pela esquerda, temos o seguinte elemento de matriz

$$\langle 0, n | \mathbf{r} | 0, n \rangle = \frac{V}{(2\pi)^2} \int_{BZ} \langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.60)$$

e sabendo que $\langle u_{n\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle = \mathbf{A}(\mathbf{k})$, podemos escrever

$$\langle 0, n | \mathbf{r} | 0, n \rangle = \frac{V}{(2\pi)^2} \int_{BZ} \mathbf{A}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}. \quad (2.61)$$

Substituindo na equação (2.55), temos

$$P = -\frac{e}{V} \frac{V}{(2\pi)^d} \int_{BZ} \mathbf{A}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}. \quad (2.62)$$

Em 1d

$$P = -\frac{e}{2\pi} \oint \mathbf{A}(\mathbf{k}) d\mathbf{k}. \quad (2.63)$$

Obtendo assim uma expressão que relaciona a polarização elétrica e o potencial vetor magnético, para uma transformação adiabática cíclica. A equação (2.63) terá um importante papel para à classificação de um Isolante Topológico, que será visto a seguir.

2.4 Invariante Z_2

Nós temos até agora estabelecido que novas fase da matéria existem em isolantes invariantes a reversão temporal. A marca física desses estados é a presença de modos de borda contrapropagantes sem gap sobre cada borda da amostra. Esses modelos são protegidos pela abertura de um gap pela invariante a TR, se e somente se, existir um número ímpar de pares deles. Isto é, um número par de pares de estados de borda não são protegidos pela abertura de um gap. A discussão sobre os modos de borda sugere a existência de uma ordem tipo Z_2 no estado de um isolante topológico.

2.4.1 Simetria de Reversão Temporal

A chave para o entendimento dessas novas classes topológicas é examinar o papel da simetria ($\tau = \theta$) para partículas de *spin* 1/2. A simetria τ é representada por um operador antiunitário $\theta = \exp[i\pi S_y/\hbar]K$, onde S_y é um operador de *spin* e K é um complexo conjugado. Para elétrons de *spin* 1/2, θ tem a seguinte propriedade $\theta^2 = -1$. Isso leva-nos para uma importante restrição conhecida como teorema de Kramer [12, 13], isto é, todos os autoestados de uma Hamiltoniana invariante a τ são pelo menos duplamente degenerados. Isso acontece porque se um estado não degenerado $|\chi\rangle$ existir, então $\theta|\chi\rangle = |c||\chi\rangle$ para alguma constante c . Isso significa $\theta^2|\chi\rangle = |c|^2|\chi\rangle$ não é permitido porque $|c|^2 \neq 1$.

Na ausência da interação *spin*-órbita a degenerescência de Kramers é simplesmente a degenerescência entre as componentes *up* e *down* do *spin*, contudo quando há interação *spin*-órbita ela leva a consequências não triviais.

Uma Hamiltoniana de Bloch invariante a τ deve satisfazer

$$\theta H(\mathbf{k})\theta^{-1} = H(-\mathbf{k}), \quad (2.64)$$

pode-se classificar topologicamente todas as Hamiltonianas de Bloch que possuem esta simetria e um gap de energia em uma mesma classe topológica, que permite deformações sem que esse se feche. Para esta classe de Hamiltonianas o invariante TKNN (Thouless, Kohmoto, Nightingale e Den Nijs [6, 14] é zero, pois a condutividade Hall viola τ , contudo há outro invariante topológico que pode assumir dois possíveis valores $\nu = 0$ ou 1.

2.4.2 Correspondência entre o Interior e o Contorno do Material

A existência de duas classes topológicas pode ser entendida por meio da correspondência entre o interior e o contorno do material. Na Figura(3) é mostrado um esquema da estrutura de bandas da borda de um isolante de bandas bidimensional invariante sob τ . Apenas metade da zona de Brillouin é mostrada ($0 < k_x < \pi/a$), pois a invariância temporal impõe que a outra metade ($-\pi/a < k_x < 0$) seja o reflexo desta metade. Note o gap de energia entre as banda de condução e de valência no bulk do isolante. Nas bordas do material existem duas possibilidades. Dependendo dos detalhes da Hamiltoniana podem existir estados com energia no interior do gap do bulk.

Quando existem estados na borda com energia no interior do gap, eles são duplamente degenerados nos momentos que são invariantes sob τ , $k_x = 0$ e π/a . Estes são os valores do momento eletrônico que satisfazem a condições dadas na equação(2.64), pois devido a interação *spin*-órbita, apenas alguns valores discretos de k satisfazem esta condição. Estes pontos são designados por Γ_a e Γ_b na Figura (3) e longe destes pontos a interação *spin*-órbita

quebra a degenerescência de Krammers dos estados eletrônicos [13, 15, 16].

Os estados em $k_x = 0$ e $k_x = \pi/a$ podem se conectar de duas maneiras distintas. Primeiramente eles podem se conectar com um número par de estados entre eles, como mostrado na esquerda da Figura (3). Neste caso, estes estados podem ser eliminados por perturbações colocando-os fora do gap de energia. Isto ocorre quando a banda de energia cruza a superfície de Fermi um número par de vezes entre os estados $k_x = 0$ e π/a . Por outro lado, se a banda de energia cruza a superfície de Fermi um número ímpar de vezes, como mostrado na direita da Figura (3), estes estados de borda não podem ser eliminados por perturbações [16]. Qual das alternativas acima ocorre depende da correspondência entre o bulk e o contorno do material. Cada banda cruzando a energia de Fermi em k_x possui seu parceiro degenerado de Krammers em $-k_x$, a correspondência bulk-contorno relaciona o número de parceiros de Krammers que cruza a E_F da borda do material N_K , com a mudança do invariante Z_2 através da interface:

$$N_K = \Delta\nu \text{mod} 2 \quad (2.65)$$

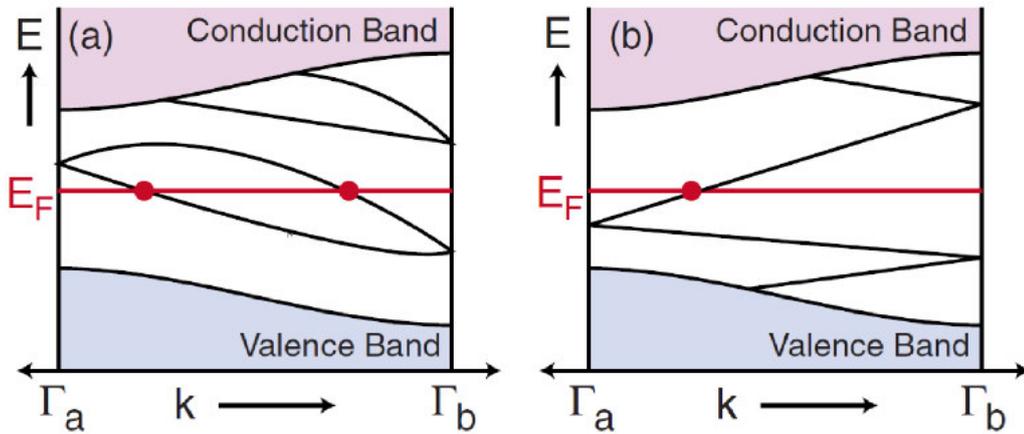


Figura 3: Dispersão eletrônica entre dois pontos na borda do Isolante Topológico que possuem degenerescência de Krammers. Em (a) o número de estados da superfície cruzando a E_F entre os pontos $\Gamma_a = 0$ e $\Gamma_b = \pi/a$ é par e em (b) ímpar. Quando um número ímpar de estados cruza a energia de Fermi existem estados metálicos topologicamente protegidos no contorno do material.

Se o isolante possui N_K par ($\nu = 0$), se encontra em uma fase topologicamente trivial, e se N_K for ímpar ($\nu = 1$), está no EHQS, que é um estado topologicamente não trivial e possui estados de borda topologicamente protegidos como aqueles do EHQI.

Em isolantes, a reorganização de átomos na superfície, ou a modificação de ligações químicas, pode introduzir estados superficiais que possuem sua energia no gap da banda, mas são restritos a se moverem em torno da superfície bidimensional. Estes estados geralmente

são frágeis e sua existência depende dos detalhes da geometria e da química da superfície. Em contraste a isto em um IT os estados de superfície são protegidos, isto é, sua existência não depende em como a superfície do material é organizada, não depende da sua geometria e a explicação para isto é matemática e se baseia no fato que a Hamiltoniana descrevendo os estados da superfícies, é invariante sob pequenas perturbações.

2.4.3 Formulas para o Invariante Z_2

Existem várias formulações matemáticas do invariante topológico ν . Uma interessante [18], que pode ser generalizada para três dimensões e que têm sido útil para identificar IT a partir da estrutura de bandas é baseado na matriz $w_{mn}(k) = \langle u_n(k) | \theta | u_m(-k) \rangle$ construída a partir das funções de Bloch dos estados ocupados $|u_m(k)\rangle$.

Já sabemos que pela, degenerescência de Kramers, os autoestados são pelo menos duplamente degenerados. Um par de bandas de energia $E_{2n-1}(k)$ e $E_{2n}(k)$ é chamada pares de Kramers (Observe que os valores de $E_{2n-1}(k)$ e $E_{2n}(k)$ só são iguais nos pontos invariantes sob reversão temporal).

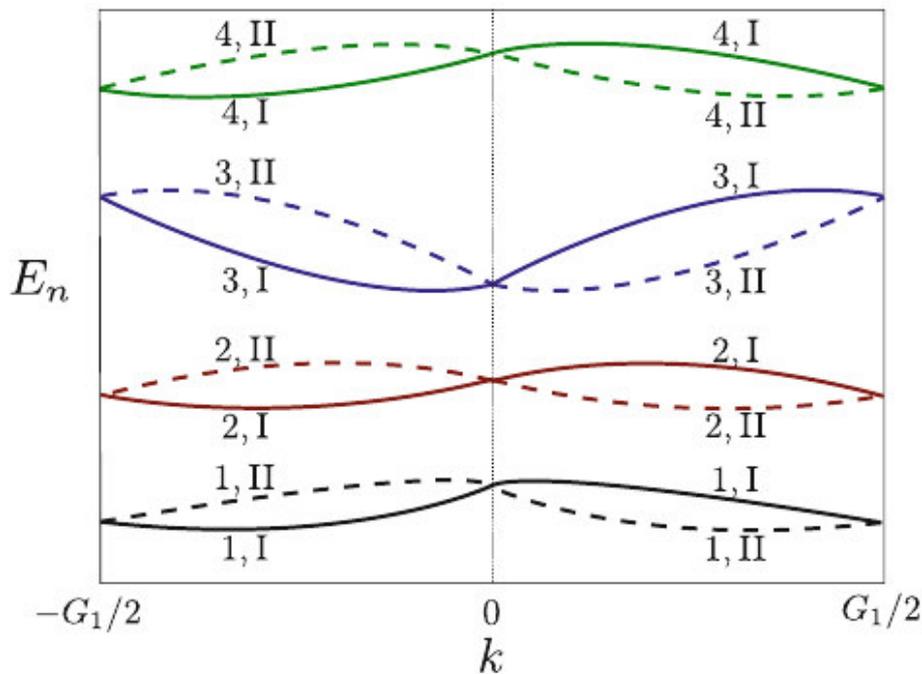


Figura 4: Esquema da estrutura de bandas de $E_n(k)$. Os pares de Kramers se cruzam nos pontos invariantes a reversão temporal

Essas duas bandas classificadas como n, I e n, II respectivamente, são relacionadas pelo operador reversão temporal acompanhado por um fator de fase. Seus pontos de cruzamento são invariantes sob reversão temporal e são protegidos pela simetria de reversão temporal. Se

um par de Kramer é isolado a partir de outro par de Kramer por um gap infinito, uma invariância topológica associada com esses pares pode ser definida.

Por simplicidade vamos considerar um sistema $1d$ e supor que não existe nenhuma degenerescência adicional. Portanto, a reversão temporal transforma autoestados de k da banda I em autoestados de $-k$ da banda II , e vice versa, mas somente por um fator de fase,

$$|u_n^I(-\mathbf{k})\rangle = -\exp[i\chi_{k,n}]\theta|u_n^{II}(\mathbf{k})\rangle. \quad (2.66)$$

Aplicando o operador reversão temporal no autoestado temos que,

$$\theta|u_n^I(-\mathbf{k})\rangle = -\exp[-i\chi_{k,n}]\theta^2|u_n^{II}(\mathbf{k})\rangle, \quad (2.67)$$

e para $\theta^2 = 1$ temos,

$$|u_n^{II}(\mathbf{k})\rangle = \exp[i\chi_{(-k),n}]\theta|u_n^I(-\mathbf{k})\rangle. \quad (2.68)$$

A polarização parcial associada com uma das categorias $s = I$ e II pode ser escrita como

$$P^s = \int_{BZ} \frac{dk}{2\pi} A_k^s, \quad (2.69)$$

onde $A_k^s = i \sum_n \langle u_n^s(k) | \nabla_k | u_n^s(k) \rangle$, sendo invariante (numa translação da rede) para mudança na fase de $|u_n^I(\mathbf{k})\rangle$ e $|u_n^{II}(\mathbf{k})\rangle$. Entretanto, eles parecem depender do escolha arbitrária dos índices I e II atribuído para cada banda. Para fazer essa invariância explicita para P^s , vamos separar a integral em duas partes,

$$P^I = \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A_k^I + \int_{-\pi}^0 \frac{dk}{2\pi} A_k^I \quad (2.70)$$

$$= \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A_k^I + \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A_{-k}^I \quad (2.71)$$

e daí, podemos relacionar A_{-k}^I para A_k^{II} , usando a reversão temporal

$$A_{-k}^I = -i \sum_n \langle u_n^I(-k) | \nabla_k | u_n^I(-k) \rangle \quad (2.72)$$

$$= -i \sum_n \langle \theta u_n^{II}(k) | (-) \exp[-i\chi_{k,n}] \nabla_k (-) \exp[i\chi_{k,n}] | \theta u_n^{II}(k) \rangle \quad (2.73)$$

$$= \sum_n \nabla_k \chi_{k,n} + i \sum_n \overbrace{\langle u_n^{II} | \nabla_k | u_n^{II} \rangle}^{A_k^{II}}, \quad (2.74)$$

logo,

$$A_{-k}^I = A_k^{II} + \sum_n \nabla_k \chi_{k,n}. \quad (2.75)$$

Ao substituir a equação (2.72), temos

$$P^I = \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A^I(k) + \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} \left(A^{II}(\mathbf{k}) + \sum_n \nabla_k \chi_{k,n} \right) \quad (2.76)$$

$$= \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} A(\mathbf{k}) + \frac{1}{2\pi} \sum_n \chi_{k,n}|_0^\pi, \quad (2.77)$$

onde $A(\mathbf{k}) = A^I(\mathbf{k}) + A^{II}(\mathbf{k})$. Assim temos,

$$P^I = \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^\pi A(\mathbf{k}) + \sum_n (\chi_{\pi,n} - \chi_{0,n}) \right). \quad (2.78)$$

O ultimo termo pode ser escrito numa maneira mais simples ao introduzir uma matriz costura, dada por

$$w_{mn}(\mathbf{k}) = \langle u_n(-\mathbf{k}) | \theta | u_n(-\mathbf{k}) \rangle, \quad (2.79)$$

onde a matriz unitária w relaciona os estados k e $-k$ através da reversão temporal, fazendo essa matriz costura, um dos mais importantes construções matemáticas na teoria dos Isolantes Topológicos.

Os termos não nulos da matriz unitária w são:

Primeiro termo,

$$\langle u_n^I(-\mathbf{k}) | \theta | u_n^{II}(\mathbf{k}) \rangle \quad (2.80)$$

onde $|u_n^{II}(\mathbf{k})\rangle = \exp[i\chi_{k,n}] \theta |u_n^I(-\mathbf{k})\rangle$ substituindo na equação (2.81) temos

$$\langle u_n^I(-\mathbf{k}) | \theta | u_n^{II}(\mathbf{k}) \rangle = \langle u_n^I(-\mathbf{k}) | \theta \exp[i\chi_{k,n}] \theta | u_n^I(-\mathbf{k}) \rangle \quad (2.81)$$

$$= \langle u_n^I(-\mathbf{k}) | - \exp[-i\chi_{k,n}] | u_n^I(-\mathbf{k}) \rangle \quad (2.82)$$

logo,

$$\langle u_n^I(-\mathbf{k}) | \theta | u_n^{II}(\mathbf{k}) \rangle = - \exp[-i\chi_{k,n}]. \quad (2.83)$$

Já o segundo termo,

$$\langle u_n^{II}(-\mathbf{k}) | \theta | u_n^I(\mathbf{k}) \rangle \quad (2.84)$$

onde $|u_n^I(\mathbf{k})\rangle = - \exp[i\chi_{(-k),n}] \theta |u_n^{II}(-\mathbf{k})\rangle$ substituindo na equação (2.85) temos

$$\langle u_n^{II}(-\mathbf{k}) | \theta | u_n^I(\mathbf{k}) \rangle = \langle u_n^{II}(-\mathbf{k}) | (-) \theta \exp[i\chi_{k,n}] \theta | u_n^{II}(-\mathbf{k}) \rangle \quad (2.85)$$

logo,

$$\langle u_n^{II}(-\mathbf{k}) | \theta | u_n^I(\mathbf{k}) \rangle = \exp[-i\chi_{(-k),n}]. \quad (2.86)$$

Ao usar as equações (2.83) e (2.87), temos

$$w_{m,n}^{II,I}(\mathbf{k}) = \langle u_m^{II}(-\mathbf{k}) | \theta | u_n^I(\mathbf{k}) \rangle = -\delta_{mn} \exp[-i\chi_{(-k),n}]. \quad (2.87)$$

A matriz $w_{m,n}^{II,I}$ é a matriz de costura entre os pares de Kramer das bandas I e II . Podem existir vários desses pares de Kramer indexados por $m = 1, 2, \dots, N$, mas a matriz de costura acopla os pares de Kramer somente dois a dois, de tal forma que a matriz w torna-se uma matriz bloco-diagonal de matrizes de sub-blocos

$$w_{m,n}^{II,I} = \begin{pmatrix} 0 & -\exp[-i\chi_{k,n}] \\ \exp[-i\chi_{(-k),n}] & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.88)$$

Portanto, em $k = 0$ e π , w é antissimétrica. Uma matriz antissimétrica pode ser caracterizada por um Pfaffian, cujo quadrado é igual ao determinante,

$$\text{Pf}[w(\mathbf{k})]^2 = \det(w(\mathbf{k})) \quad (2.89)$$

Para $k = \pi$ e $n = 1$, temos

$$w(\pi) = \begin{pmatrix} 0 & -\exp[-i\chi_{\pi,1}] \\ \exp[-i\chi_{\pi,1}] & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.90)$$

e o determinante de w é determinado por

$$\det[w(\pi)] = \begin{vmatrix} 0 & -\exp[-i\chi_{\pi,1}] \\ \exp[-i\chi_{\pi,1}] & 0 \end{vmatrix} = \exp[-i2\chi_{\pi,1}], \quad (2.91)$$

com $\text{Pf}[w(\pi)] = \exp[-i\chi_{\pi,1}]$.

Para $k = 0$ e $n = 1$, temos

$$w(0) = \begin{pmatrix} 0 & -\exp[-i\chi_{0,1}] \\ \exp[-i\chi_{0,1}] & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.92)$$

e o determinante de w é determinado por

$$\det[w(0)] = \begin{vmatrix} 0 & -\exp[-i\chi_{0,1}] \\ \exp[-i\chi_{0,1}] & 0 \end{vmatrix} = \exp[-i2\chi_{0,1}], \quad (2.93)$$

com $\text{Pf}[w(0)] = \exp[-i\chi_{0,1}]$.

Fazendo para todos os n termos temos que (sabendo que w é um produto direto de matrizes), obtemos

$$\text{Pf}[w(\pi)] = \exp[-i \sum_n \chi_{\pi,n}], \quad (2.94)$$

e

$$\text{Pf}[w(0)] = \exp\left[-i \sum_n \chi_{0,n}\right]. \quad (2.95)$$

Observamos que,

$$\frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} = \frac{\exp\left[-i \sum_n \chi_{\pi,n}\right]}{\exp\left[-i \sum_n \chi_{0,n}\right]} \quad (2.96)$$

$$= \exp\left[-i \sum_n (\chi_{\pi,n} - \chi_{0,n})\right]. \quad (2.97)$$

Tomando o logaritmo em ambos os lados da equação (2.97), temos

$$\sum_n (\chi_{\pi,n} - \chi_{0,n}) = i \ln \left[\frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right]. \quad (2.98)$$

Substituindo a equação (2.98) na (2.78), temos

$$P^I = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^\pi dk A_k + i \ln \left(\frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) \right]. \quad (2.99)$$

Adicionando a polarização das bandas I e II , nós obtemos a polarização total

$$P = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi dk A(k) = P^I + P^{II}. \quad (2.100)$$

A polarização sob reversão temporal é definida como a diferença entre as polarizações parciais,

$$P_\theta = P^I - P^{II}, \quad (2.101)$$

e para $P^{II} = P - P^I$, temos

$$P_\theta = 2P^I - P, \quad (2.102)$$

de tal forma que

$$P_\theta = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^\pi dk A(k) - \int_0^\pi dk A(-k) + 2i \ln \left(\frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) \right], \quad (2.103)$$

em termos da matriz w_{mn} , a equação acima pode ser escrita de uma forma mais compacta

$$P_\theta = \frac{1}{2\pi i} \left[\int_0^\pi dk (\text{Tr}[w^\dagger \nabla_k w]) - 2 \ln \left(\frac{\text{Pf}[w(\pi)]}{\text{Pf}[w(0)]} \right) \right]. \quad (2.104)$$

Usando a seguinte identidade $\text{Tr}[w^\dagger \nabla_k w] = \nabla_k \ln(\det[w(\mathbf{k})])$, na equação (2.104), temos

$$P_\theta = \frac{1}{\pi i} \left[\ln \left(\frac{\sqrt{\det[w(\pi)]} \text{Pf}[w(0)]}{\text{Pf}[w(\pi)] \sqrt{\det[w(0)]}} \right) \right], \quad (2.105)$$

tomando a função exponencial em ambos os lados da equação (2.105), temos

$$\exp[i\pi P_\theta] = \left[\left(\frac{\sqrt{\det[w(\pi)]}}{\text{Pf}[w(\pi)]} \frac{\text{Pf}[w(0)]}{\sqrt{\det[w(0)]}} \right) \right] \quad (2.106)$$

onde a $\exp[i\pi P_\theta] = \cos(\pi P_\theta) - i \sin(\pi P_\theta) = (-1)^{P_\theta}$, assim temos

$$(-1)^{P_\theta} = \left[\left(\frac{\sqrt{\det[w(0)]}}{\text{Pf}[w(0)]} \frac{\sqrt{\det[w(\pi)]}}{\text{Pf}[w(\pi)]} \right) \right], \quad (2.107)$$

o lado direito da equação é sempre 1 ou -1 .

Em geral para um processo cíclico, $H(t + T) = H(t)$, segue-se que

$$H(t_1^* = 0) = \theta H(0) \theta^{-1}, \quad (2.108)$$

e

$$H(t_1^* = T/2) = \theta H(T/2) \theta^{-1}. \quad (2.109)$$

Como a variação da polarização sob reversão temporal é invariante de gauge, temos

$$\nu = [P_\theta - P(0)] \text{mod} 2. \quad (2.110)$$

Essa diferença define um invariante topológico Z_2 .

Correspondentemente ν é definido como um inteiro modulo 2, que é 0 e 1. Da equação (2,110), temos que a polarização sob reversão temporal define apenas dois estados distintos de polarização: topologicamente trivial ($\nu = 0$) e não trivial ($\nu = 1$).

O EHQS pode ser visualizado como dois estados com *spin* opostos contra-propagam na borda do material. Nas regiões onde o invariante ν muda, como na interface entre o EHQS e o vácuo existem estados metálicos condutores (figura 5).

Tais estados, chamados de helicoidais [17, 18], em analogia com a correlação entre *spin* e momento das partículas com massa nula chamada de helicidade, formam um condutor unidimensional que é essencialmente metade de um condutor ordinário. Condutores ordinários possuem elétrons com *spin up* e *down* propagando em ambas as direções e são frágeis, pois os estados são susceptíveis a localização de Anderson mesmo na presença de desordem fraca. Em contraste a isto, no EHQS, os estados de borda não podem ser localizados na presença de desordem forte devido a simetria de Reversão Temporal do sistema (desde que a impureza seja não magnética).

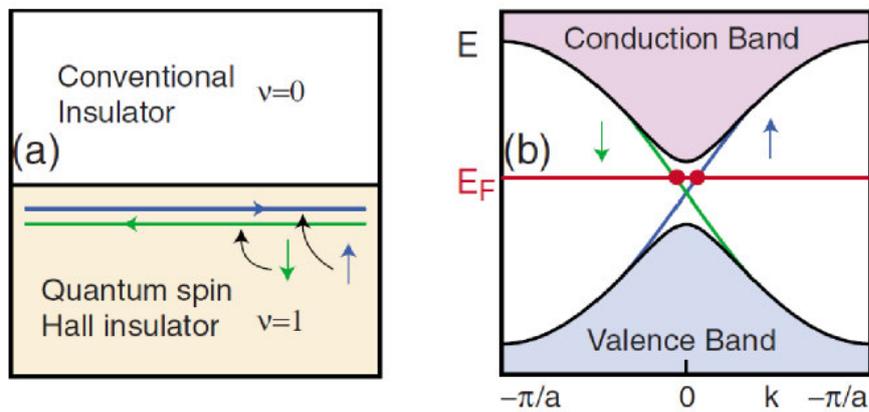


Figura 5: Estados de borda no EHQS. A esquerda interface entre um EHQS que possui $\nu = 1$ e o vácuo, $\nu = 0$. Existem estados de borda metálicos que são *spin* polarizados, isto é, partículas com diferentes componentes *up* e *down* do *spin* propagam em sentidos opostos sendo os dois “canais” de propagação conectados pela simetria de Reversão Temporal. A direita um esquema da estrutura de bandas onde o gap do bulk do material e os estados metálicos da borda *spin* polarizados são mostrados.

3 ESTRUTURA DE BANDA DO *BULK*

Neste capítulo mostramos um modelo simples para a estrutura de banda do *bulk* para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido às interações entre segundos e terceiros vizinhos. O modelo começa a partir da aproximação de ligação forte em uma rede quadrada com dois orbitais por sítio da rede, onde um dos orbitais tem paridade ímpar e o outro tem paridade par. O orbital com paridade ímpar tem energia mais elevada do que o orbital com paridade par. Esse modelo é uma simplificação do modelo Bernevig-Hughes-Zhang para poços quânticos que tem recentemente atraído muita atenção para realização de um isolante topológico bidimensional com estados protegidos de borda helicoidais [19].

3.1 Orbitais e Paridade

Antes de construir o modelo *tight binding*, há algumas coisas que têm de ser resolvidas. Os átomos que formam a rede devem ligar-se uns aos outros através de partilha dos orbitais s e p . Os elétrons por conseguinte, devem ser capazes de ocupar os orbitais s e p em cada sítio da rede. No entanto, uma vez que o sistema em estudo é bi-dimensional, o orbital p com $m = 0$ (definido como sendo o orbital no eixo perpendicular ao plano) terá o seu orbital apontado para fora do plano. Este orbital, portanto, é excluído da ligação. Os elétrons, portanto, ocupam apenas orbitais s e orbitais p com $m = \pm 1$. Além disso, a forte interação *spin*-órbita irá dividir os orbitais $m = \pm 1$ em dois níveis de energia diferentes, um com o *spin* do elétron paralelo com o momento angular, e um anti-paralelo. Destas duas possibilidades, apenas o paralelo é incluído nas ligações. Isto dá um total de dois orbitais s e dois orbitais p contribuindo para a ligação, ou seja, os dois *spins* para cima e para baixo, o *spin up* para $m = 1$ e o *spin down* para $m = -1$. O orbital s é esfericamente simétrico, e tem, portanto, paridade par. Mas os orbitais p são proporcionais a um fator $im\phi$ onde ϕ é a coordenada polar no plano x, y . Isto significa que a paridade do orbital p é ímpar. Para os nossos propósitos, os valores de $im\phi$ nos ângulos $0, \pi/2, \pi$ e $3\pi/2$ serão de interesse, porque estes são os ângulos em que as integrais de sobreposição entre os orbitais vizinhos serão avaliadas. Essas propriedades estão representadas na Figura (6).

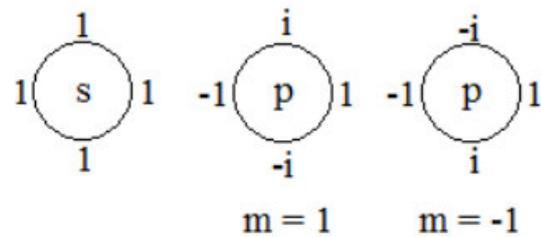


Figura 6: Os orbitais s e p têm paridade diferente. O orbital s é esfericamente simétrica, enquanto o orbital p tem uma dependência angular em $im\phi$.

3.2 Construção do Modelo *Tight-Binding* para uma Rede Quadrada

A aproximação *tight-binding* é usada para descrever a estrutura de bandas dos elétrons num sólido. A figura abaixo esquematiza a formação da rede *tight-binding*, a partir dos estados atômicos.

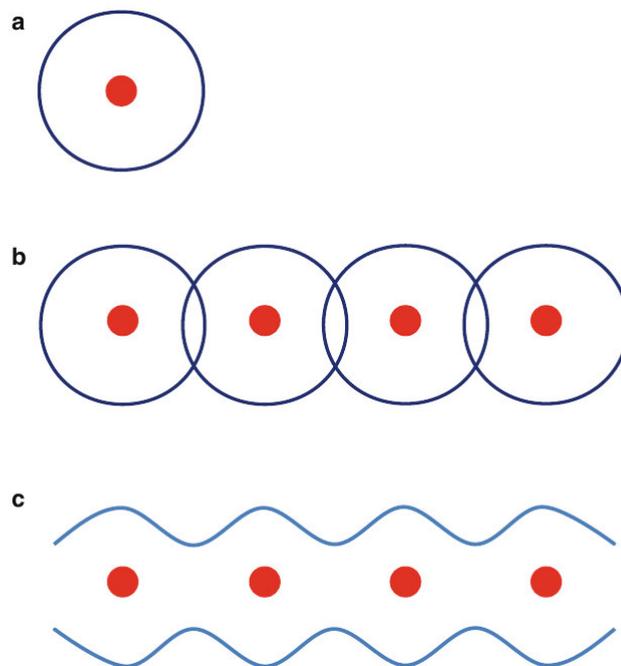


Figura 7: Um esquema que explica a aproximação *tight-binding*. (a) Um único átomo com órbitas discretas para os elétrons. (b) Quando os átomos se juntam para formar um sólido, as funções de onda de duas órbitas (preto) de átomos adjacentes sobrepõem-se no espaço. (c) Se a sobreposição das órbitas é pequena, os elétrons estão ainda a ser considerado quase localizados ao redor das órbitas originais, mas possuem uma pequena probabilidade de tunelamento para as órbitas adjacentes formando uma banda de energia [20].

Nós podemos por exemplo pensar que cada sítio comporta-se como um poço de potencial com o seu próprio conjunto de espectros de energia. Por simplicidade nós assumiremos que cada poço tem somente um nível de energia com energia ϵ_0 . Se um elétron ocupa um nível o sistema adquire uma energia ϵ_0 . Se não existir elétron no estado a energia do sistema é zero.

Esse tratamento pode ser transladado no linguajar da segunda quantização, usando a Hamiltoniana $H = \epsilon_0 c^\dagger c$, onde $c^\dagger c$ mede o número de elétrons no sítio i . A energia total então é dada por,

$$(\text{total energia}) = \sum_i (+\epsilon_0) \times (\text{número de elétron no sítio } i). \quad (3.1)$$

Observe que os poços de potenciais não são totalmente dissociados. Logo funções de onda localizadas em sítios adjacentes i e j têm algumas sobreposições não nulas, causando tunelamento entre níveis localizados. O tunelamento remove uma partícula desda posição i e a coloca na posição j , cruzando uma barreira. Na linguagem da segunda quantização esse fenômeno pode ser expresso pelo termo $-t(a_j^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j)$. Por exemplo, $a_j^\dagger a_i$ atua sobre o estado $|1\rangle_i |0\rangle_j$ (i =ocupado, j =vazio), resultando no autoestado $|0\rangle_i |1\rangle_j$.

A nova Hamiltoniana com efeito de tunelamento é dada por

$$H = \epsilon_0 \sum_i a_i^\dagger a_i - t \sum_i (a_{i+1}^\dagger a_i + a_i^\dagger a_{i+1}). \quad (3.2)$$

Essa *picture* pode ser generalizada para um modelo de rede consistindo de dois orbitais para cada sítio (Figura(8)). Na linguagem da segunda quantização, uma Hamiltoniana para esse modelo efetivo é escrita da seguinte forma:

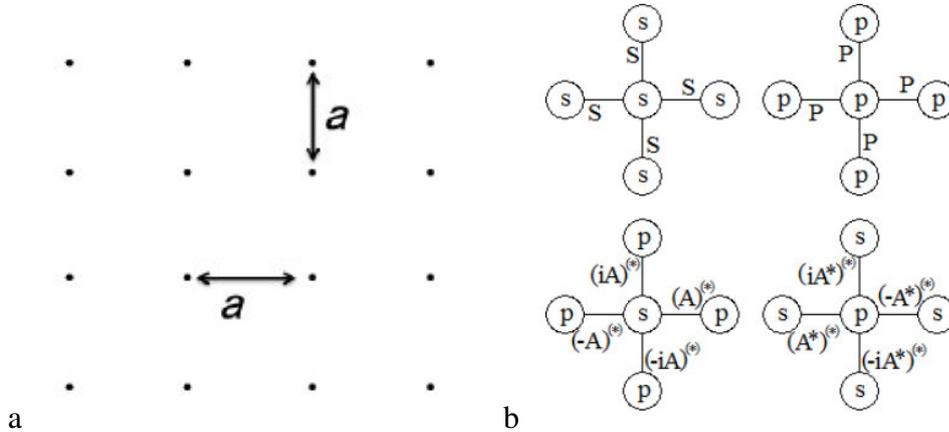


Figura 8: (a)Esquematização de uma rede quadrada em duas dimensões.(b)Amplitude de *hopping* entre sítios vizinhos de uma rede quadrada.

$$H = \epsilon_0^{(s)} \sum_i a_i^\dagger a_i - \frac{t_s}{2} \sum_{i,j} (a_i^\dagger a_j + H.c.) + \epsilon_0^{(p)} \sum_i b_i^\dagger b_i - \frac{t_p}{2} \sum_{i,j} (b_i^\dagger b_j + H.c.) + \sum_{i,j} (\exp(i\theta_{ij}) t_1 a_i^\dagger b_j + H.c.) \quad (3.3)$$

onde o somatório sobre i e j é executado sobre todos os sítios da rede. O operador $a_i^\dagger(a_i)$ cria (aniquila) um elétron no sítio i do orbital s , $b_i^\dagger(b_i)$ cria (aniquila) um elétron no sítio i do orbital p , t_s e t_p são os termos de *hopping* para os orbitais s e p , respectivamente, e possuem valores constantes. O termo $\exp(i\theta_{ij})t_1$ ($\exp(-i\theta_{ij})t_1^*$) depende da orientação da rede e θ_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede.

Vamos agora denotar a amplitude de probabilidade de um elétron no orbital s on site (x, y) como sendo $\phi_s(x, y)$ e no orbital p on site (x, y) como sendo $\phi_p(x, y)$. No limite $t_1 = 0$, a Hamiltoniana *tight binding* acima pode ser resolvida por soluções de onda plana tais como $\phi_{ks}(x, y) \propto \exp[i(k_x x + k_y y)]$ e $\phi_{kp}(x, y) \propto \exp[i(k_x x + k_y y)]$. As soluções seriam em outras palavras as soluções das bandas s e p . Quando t_1 é diferente de zero as bandas s e p tendem a se misturar. Para ver esta mistura explicitamente, o Hamiltoniana, pode ser reescrita numa base de onda plana. O resultado é

$$\begin{aligned}
H_k = \sum_k & \left(\epsilon_0^{(s)} a_{k,s}^\dagger a_{k,s} - t_s [\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a) + \exp(ik_y a) + \exp(-ik_y a)] a_{k,s}^\dagger a_{k,s} \right. \\
& + t_1 [\exp(ik_x a) - \exp(-ik_x a) + i \exp(ik_y a) - i \exp(-ik_y a)] a_{k,s}^\dagger b_{k,p} \\
& + \epsilon_0^{(p)} b_{k,p}^\dagger b_{k,p} - t_p [\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a) + \exp(ik_y a) + \exp(-ik_y a)] b_{k,p}^\dagger b_{k,p} \\
& \left. + t_1^* [-\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a) + i \exp(ik_y a) - i \exp(-ik_y a)] b_{k,p}^\dagger a_{k,s} \right). \tag{3.4}
\end{aligned}$$

A Hamiltoniana da equação (3.4) pode ser reescrita em uma forma mais compacta

$$\begin{aligned}
H_k = \sum_k & \left(\left(\epsilon_0^{(s)} - 2t_s (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \right) a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + 2it_1 [\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] a_{k,s}^\dagger b_{k,p} \right. \\
& \left. + \left(\epsilon_0^{(p)} - 2t_p (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \right) b_{k,p}^\dagger b_{k,p} + 2it_1^* [-\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] b_{k,p}^\dagger a_{k,s} \right) \tag{3.5}
\end{aligned}$$

e ao se fazer as seguintes substituições

$$\begin{cases} t_p - t_s = 2B, \\ \epsilon_0^{(s)} - \epsilon_0^{(p)} + 4t_p - 4t_s = 2\Delta, \\ A = 2it_1, \\ \epsilon(k) = \frac{\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_0^{(p)}}{2} - (t_s + t_p)(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \end{cases}$$

, a expressão então torna-se

$$\begin{aligned}
H_k = \sum_k & \left((\epsilon(k) + \Delta - 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a))) a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + A[\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] a_{k,s}^\dagger b_{k,p} \right. \\
& \left. + (\epsilon(k) - \Delta + 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a))) b_{k,p}^\dagger b_{k,p} - A^*[-\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] b_{k,p}^\dagger a_{k,s} \right) \tag{3.6}
\end{aligned}$$

Pela Hamiltoniana via *tight binding* para uma rede quadrada infinita dada acima, podemos determinar o espectro de energia do *bulk* para um Isolante Topológico na presença de interações entre primeiros vizinhos. A relação de dispersão é dada por

$$E = \sqrt{A^2(\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a) + (\Delta - 4B + 2B(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))))^2}, \tag{3.7}$$

a menos de uma constante.

O termo $\epsilon(k)$ foi omitido da relação de dispersão (3.7) por fornecer apenas uma mudança total de energia para todos os estados sem alterar os perfis das funções de onda, não alterando assim os pontos onde ocorrem as transições de fase e as propriedades topológicas do modelo. Observe que $\Delta - 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a))$ é a versão microscópica do termo de massa $M(k)$ do modelo original proposto por Bernevig-Hughes-Zhang para poços quânticos [19].

Na Figura (9) podemos observar a relação de dispersão para um isolante topológico inscrito numa rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos, para oito diferentes valores do Δ , os parâmetros A e B são mantidos fixos possuindo o mesmo valor, igual a 1.0. Nestas figuras podemos observar que o comportamento das bandas de energia variam sensivelmente com o valor de Δ . A variação do valor de Δ induz uma mudança na região onde acontece o *gap* direto do *bulk*, variando da região onde $k_x = 0$ e $k_y = 0$, Figura (9(a)), para $k_x = \pm\pi$ e $k_y = \pm\pi$, Figura (9(d)).

Pode ser observado também, na equação (3.7), da relação de dispersão, a existência de vários pontos críticos no espectro onde o *gap* entre as bandas de valência e de condução desaparece para vários valores de Δ/B . Os pontos onde as bandas se tocam, ou seja, em qual vetor de onda ocorre o *gap* zero na relação de dispersão são, determinados pelo seguinte conjunto de equações:

$$\sin^2(k_x a) = \sin^2(k_y a) = 0 \quad (3.8)$$

$$\Delta = 4B + 2(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (3.9)$$

A tabela abaixo mostra as combinações dos parâmetros que fornecem o valor para o *gap* zero nas bandas de energia. O *gap* encontra-se fechado em

BZ	k_x	k_y	Δ
Γ	0	0	0
$X1$	0	π	$4B$
$X2$	π	0	$4B$
M	π	π	$8B$

Tabela 1: As combinações dos vetores de onda e o Δ resultando num espectro *gapless* com os respectivos pontos na zona de Brillouin.

Os pontos de alta simetria da relação de dispersão são mostrados na Figura (10). Observe que os *gaps* ocorrem em diferentes pontos da zona de Brillouin, como por exemplo, o original cone de Dirac $\Gamma(0, 0)$ (o *gap* se fecha em $\Delta = 0$), para $X1(\pi, 0)$, $X2(0, \pi)$ e $M(\pi, \pi)$. O fechamento do *gap* em M ocorre em $\Delta = 8B$, enquanto o fechamento do *gap* em X_1 e X_2 ocorre simultaneamente em $\Delta = 4B$. Nesses pontos, X_1 e X_2 , ocorre uma transição de fase

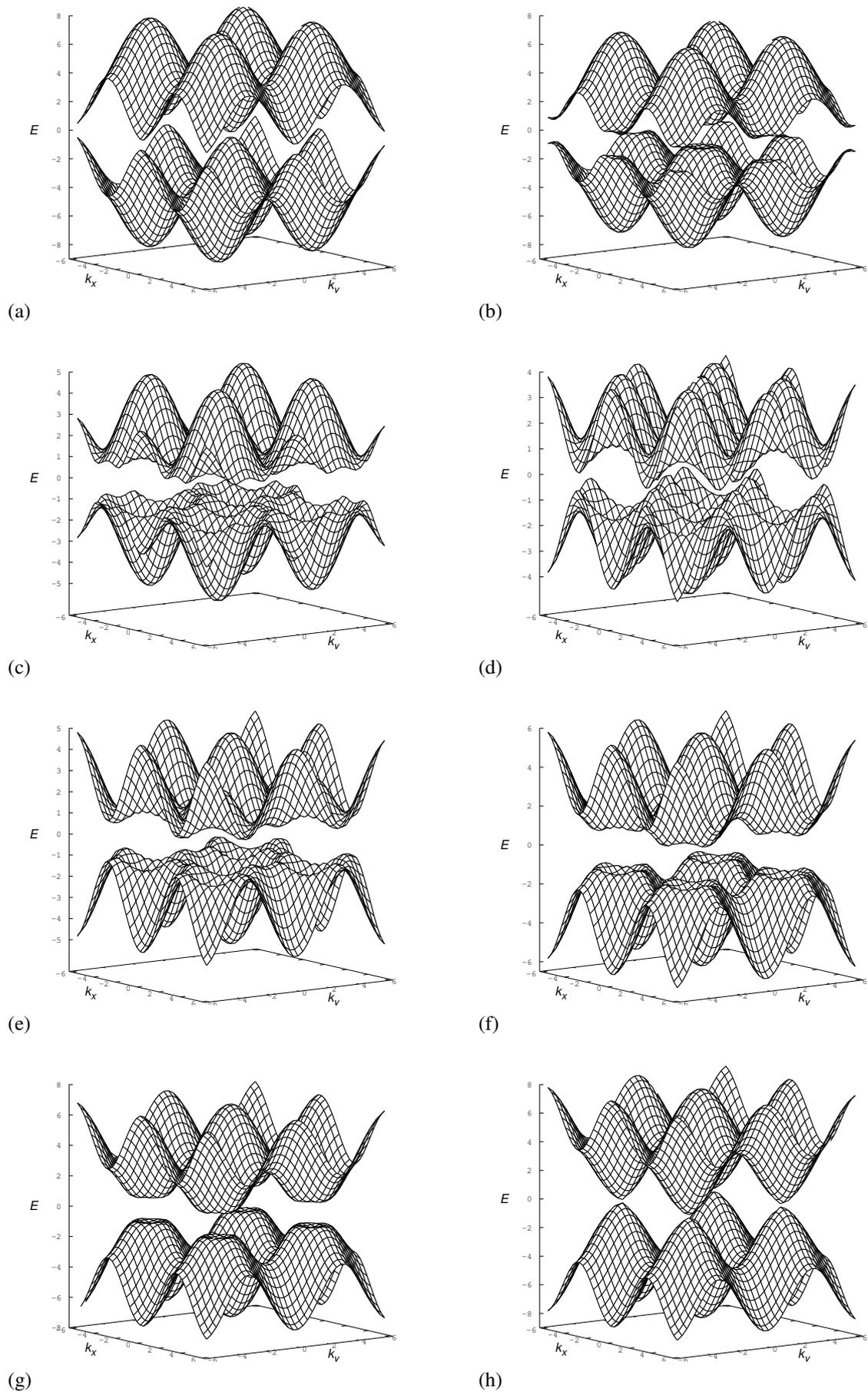


Figura 9: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $B = 1.0$, e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = 0.0$, (b) $\Delta = 1.0$, (c) $\Delta = 3.0$, (d) $\Delta = 4.0$, (e) $\Delta = 5.0$, (f) $\Delta = 6.0$, (g) $\Delta = 7.0$, (h) $\Delta = 8.0$.

topológica.

Vamos agora apresentar as figuras para a relação de dispersão (Equação (3.7)). A Figura (11) mostra as energias para um isolante topológico de uma rede quadrada simples, levando em conta somente as interações entre primeiros vizinhos. A Figura (11) mostra a relação de dispersão para um isolante topológico num gráfico de contorno para oito valores diferentes do parâmetro de *hopping* entre os orbitais. Na figura, as cores variam do azul até o vermelho. Como escolhemos os valores de $\Delta = 0.0$ e $B = 0.5$ o *gap* na energia ocorre somente no ponto Γ , observe que o aumento no valor do parâmetro de *hopping* (A) não varia a posição de onde se encontra o *gap*, ele apenas translada as bandas de energia. É importante notar que o gráfico mostra a simetria de uma rede quadrada. Para pequenos vetores de onda, notamos que as linhas de contorno são aproximadamente esféricas o que implica que a energia cresce da mesma forma em qualquer direção do vetor de onda. A medida que esse vetor de onda cresce, essa isotropia da energia é quebrada e ela cresce de forma diferenciada de acordo com a direção da zona de Brillouin.

Mostramos na Figura (10) a zona de Brillouin de uma rede quadrada para os pontos Γ , X , e M . Na Figura (12) mostramos a relação de dispersão ao longo dos caminhos Δ , Z , e Σ . É possível notar na figura os diferentes comportamentos das curvas para os diferentes caminhos tomados. Nesta figura também podemos observar que o parâmetro de *hopping* apenas translada as bandas de energia.

Na Figura (13) fixamos os valores dos parâmetros A e Δ em 1.5 e 0.0 respectivamente, para mostrar o gráfico de contorno para diferentes valores do parâmetro B . De acordo com a Tabela (1) para $B = 0$ o *gap* de energia se abre em todos os pontos de alta simetria da zona de Brillouin Γ , X_1 , X_2 e M , e com o aumento do parâmetro B o *gap* aparece somente no ponto Γ . A energia aumenta com o valor B (do azul para o vermelho), mas de uma maneira diferente em relação à Figura (11).

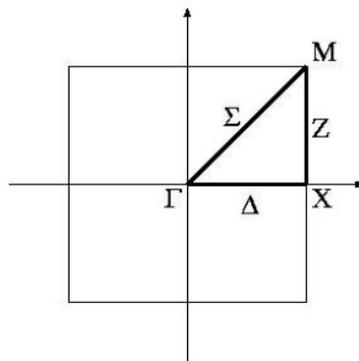


Figura 10: A zona de Brillouin para uma rede quadrada mostrando os pontos de maior simetria Γ , X e M .

Na Figura (14) é feito novamente o gráfico de contorno do parâmetro B em função de k_x , para três diferentes valores de k_y . Observe que o valor de k_y aumenta de cima para baixo. Para $k_y = 0$ a energia aumenta com valor de B para $k_x = \pm\pi$. Para $k_y = 0.5\pi$ existe nenhum estado de *zero-gap*, para $k_y = n\pi$ aparecem estados de *zero-gap* para $n = 1, 2, 3, \dots$

Na Figura (15) é mostrado o gráfico de contorno para diferentes valores do parâmetro Δ , para este caso os parâmetros A e B são mantidos fixos com os respectivos valores 1, 5 e 0.5. Como nas figuras anteriores a energia aumenta da cor azul para a vermelha. Na subfigura (a) é mostrado o ponto crítico onde o *gap* encontra-se fechado na relação de dispersão para o ponto Γ da zona de Brillouin. Na subfigura (d) acontece a transição de fase topológica quântica, nos pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin. Na subfigura (g) temos outra transição de fase, mas, neste caso, o sistema deixa de ser um isolante topológico passando a ser apenas um isolante comum.

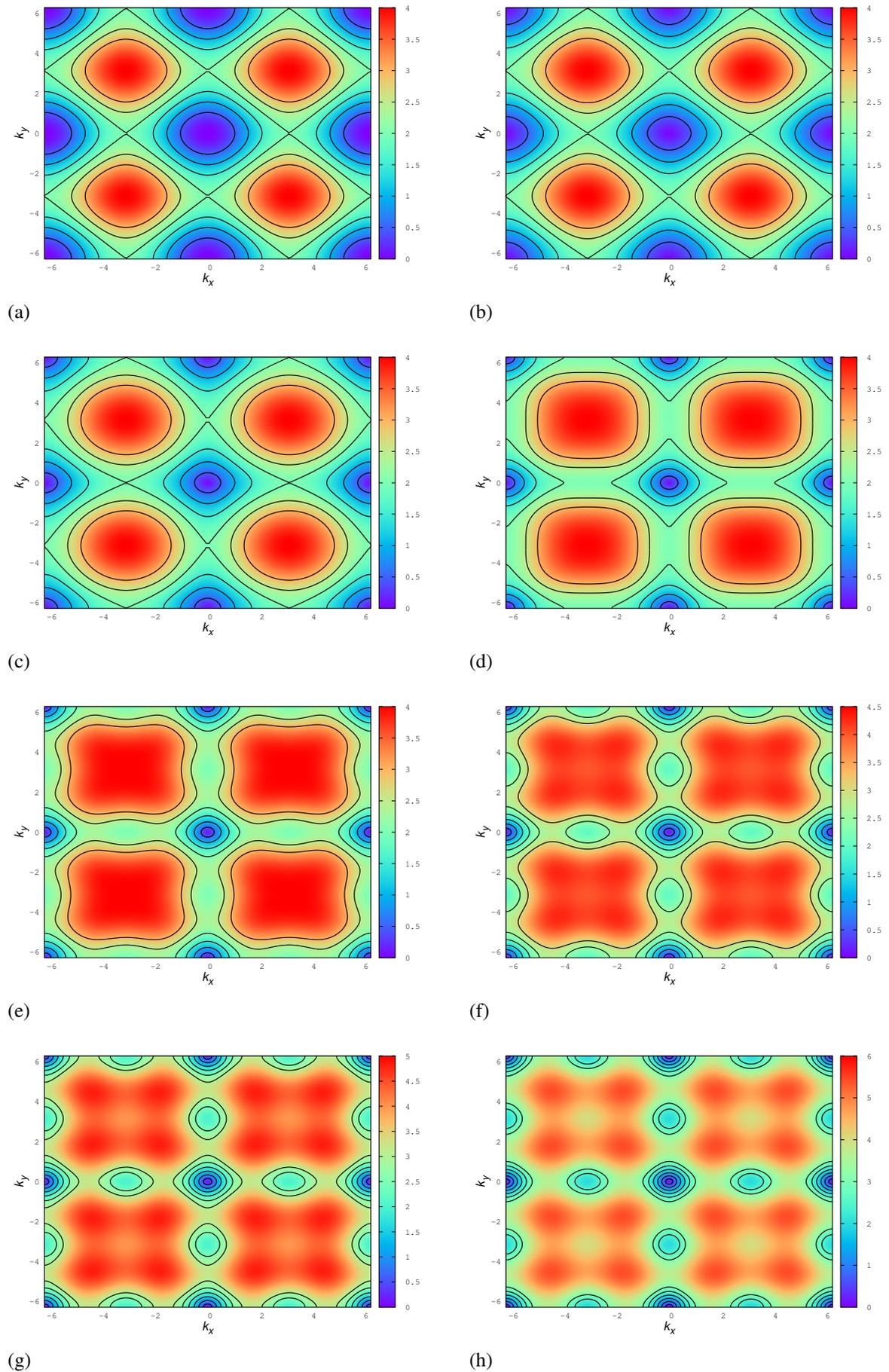


Figura 11: Relação de dispersão para $\Delta = 0$, $B = 0.5$, e oito diferentes valores para A . (a) $A = 0.0$, (b) $A = 0.5$, (c) $A = 1.0$, (d) $A = 1.5$, (e) $A = 2.0$, (f) $A = 2.5$, (g) $A = 3.0$, (h) $A = 3.5$.

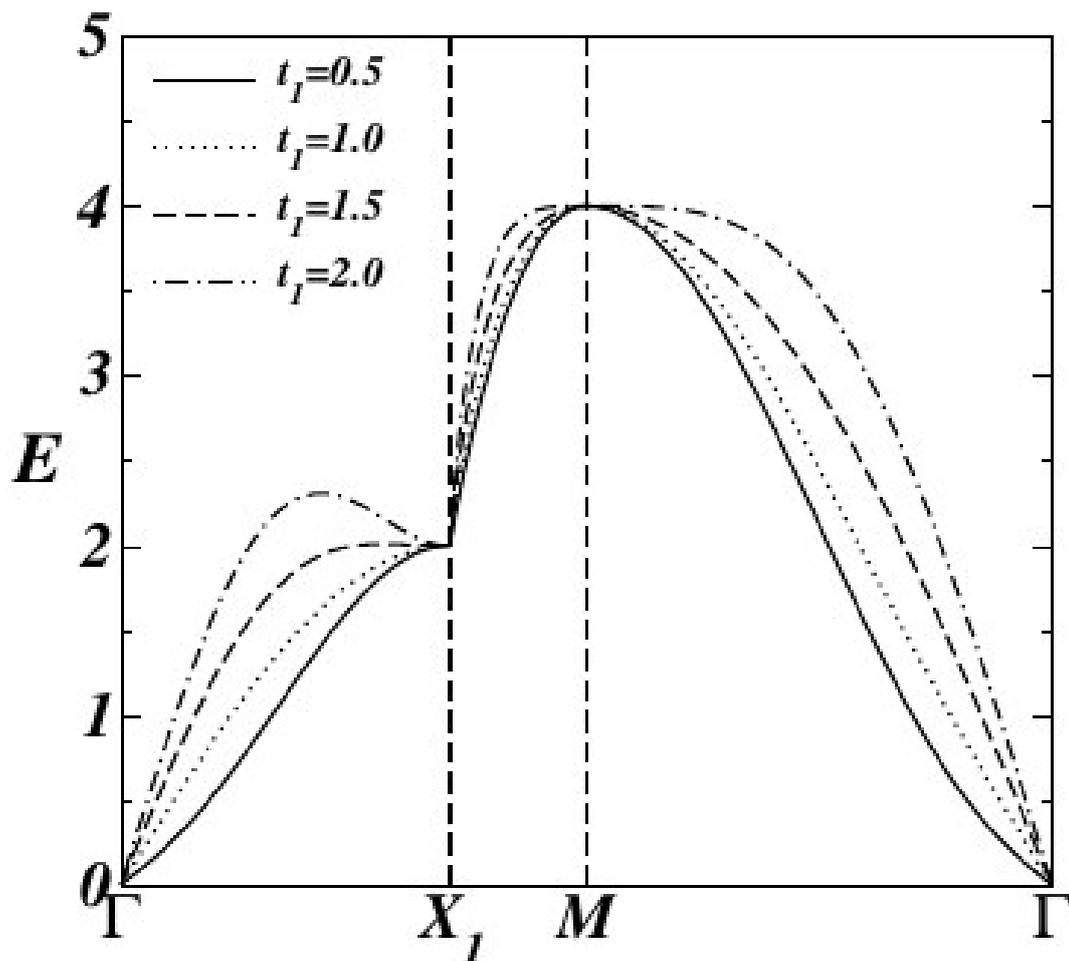
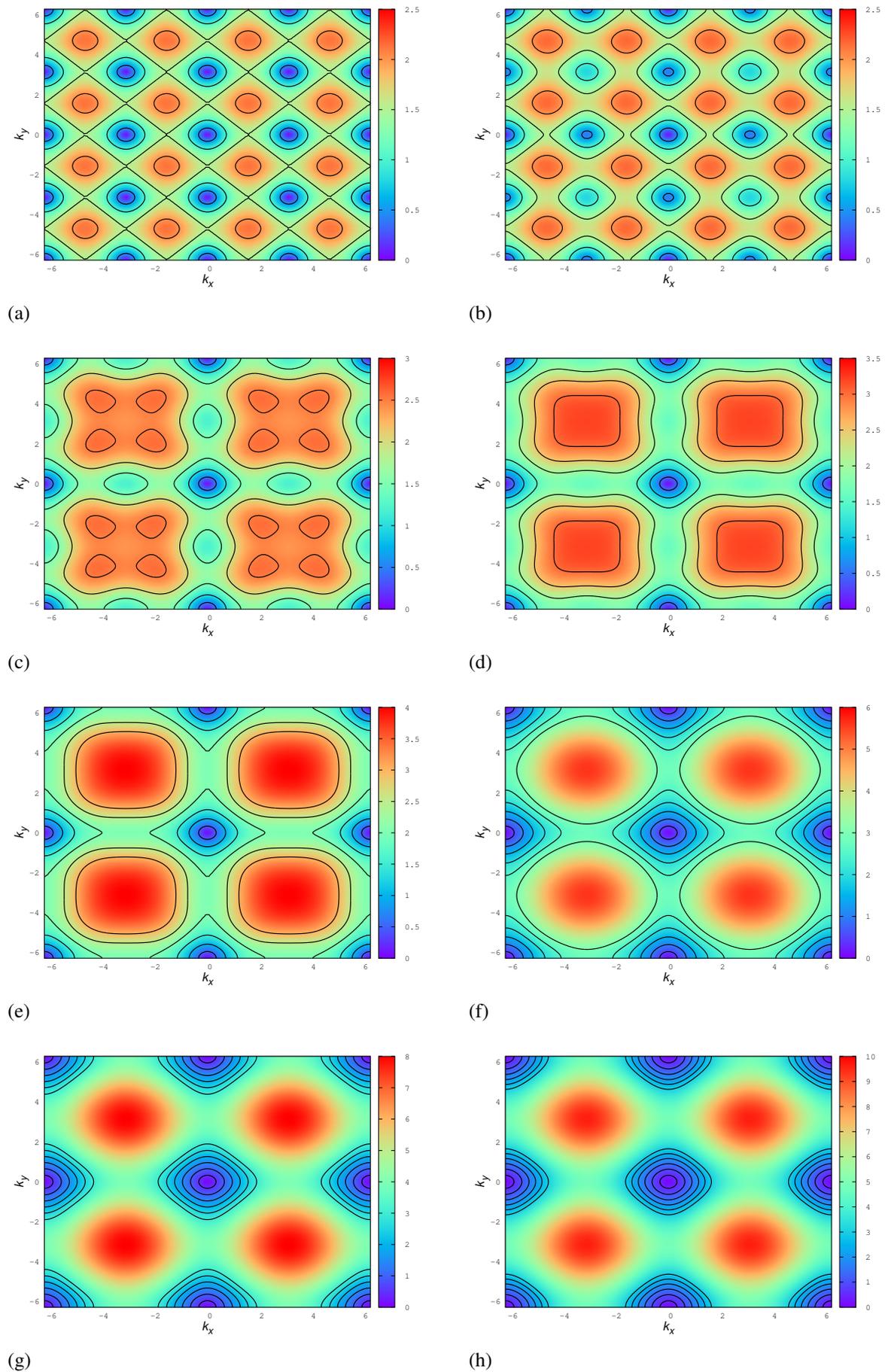


Figura 12: A relação de dispersão para $\Delta = 0.0$, $B = 2$ e quatro valores diferentes para t_1 . a) $t_1 = 0.5$, b) $t_1 = 1.0$, $t_1 = 1.5$, $t_1 = 2.0$. [21]



(g) (h)
 Figura 13: Relação de dispersão para $\Delta = 0.0$, $A = 1.5$, e oito diferentes valores para B .
 (a) $B = 0.0$, (b) $B = 0.1$, (c) $B = 0.3$, (d) $B = 0.4$, (e) $B = 0.5$, (f) $B = 0.7$, (g) $B = 1.0$,
 (h) $B = 1.2$.

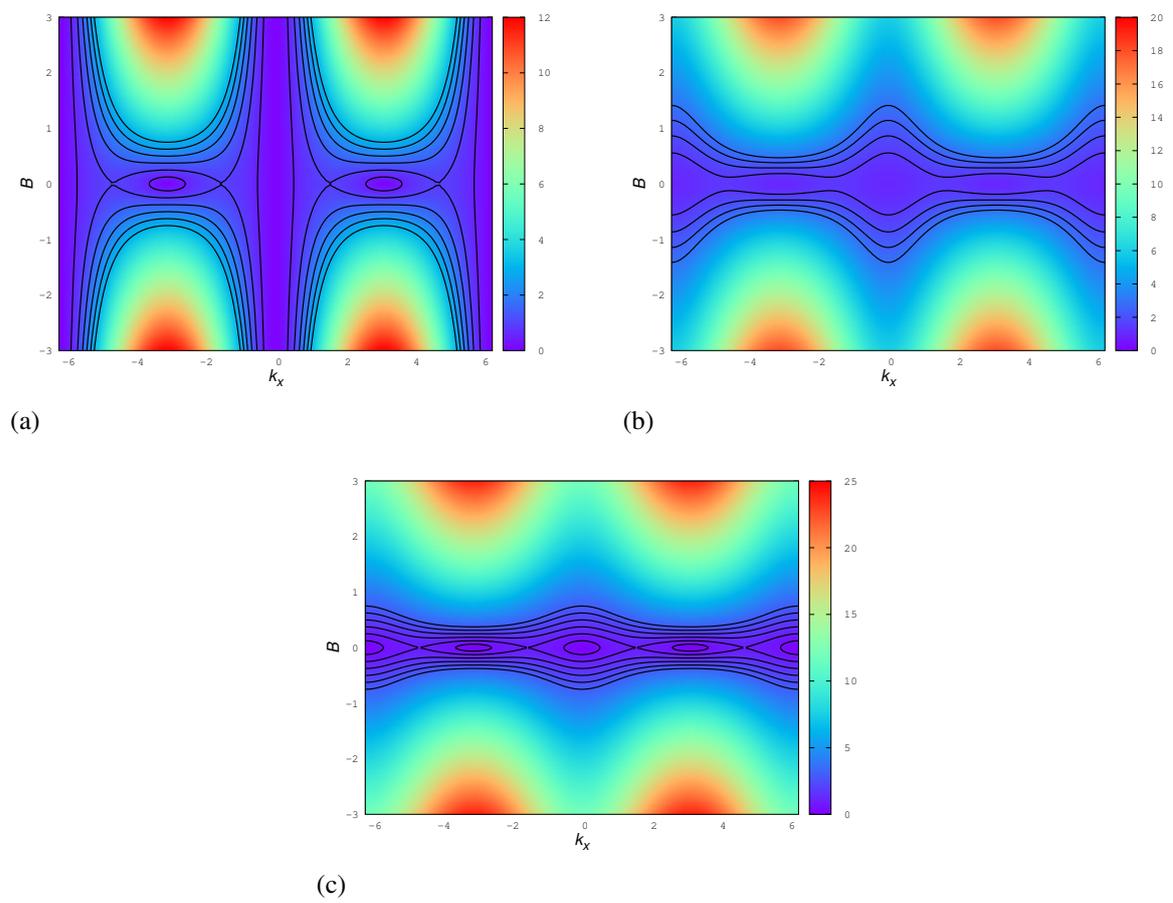


Figura 14: O comportamento da energia com B para $\Delta = 0$, $A = 2.0$ e para três diferentes valores de k_y . (a) $k_y = 0.0$, (b) $k_y = 0.5\pi$, (c) $k_y = \pi$

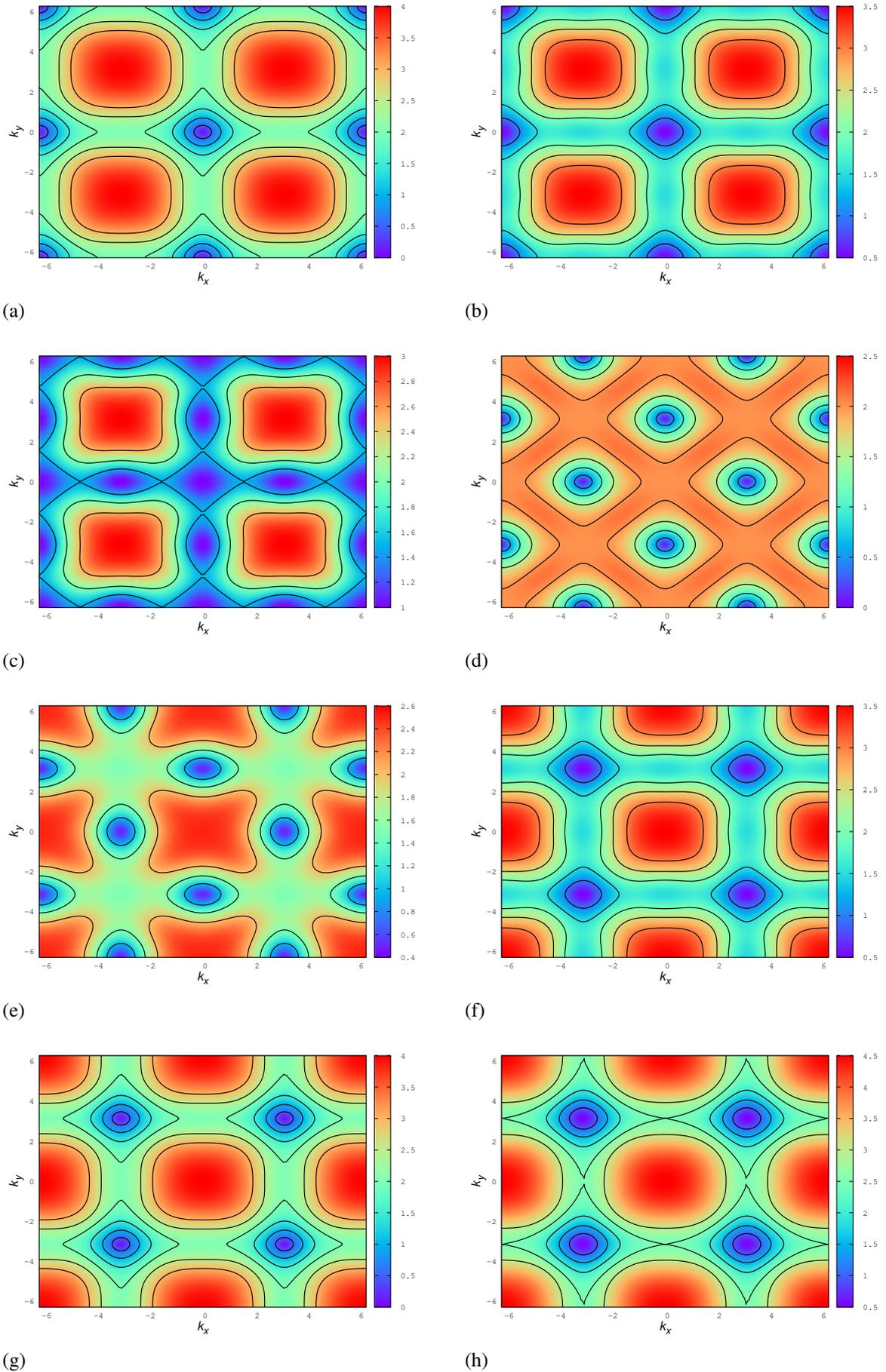


Figura 15: Relação de dispersão para $B = 0.5$, $A = 1.5$, e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = 0.0$, (b) $\Delta = 0.5$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$, (e) $\Delta = 2.5$, (f) $\Delta = 3.5$, (g) $\Delta = 4.0$, (h) $\Delta = 4.5$.

3.3 Hamiltoniana *Tight Binding* para um Isolante Topológico com um termo de Acoplamento devido as Interações entre Segundos Vizinhos

Nessa seção determinamos a Hamiltoniana *tight binding* para uma rede quadrada inserindo o termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos. Para a construção desta Hamiltoniana *tight binding* vamos levar em conta as interações entre primeiros vizinhos e a perturbação proporcionada pelo termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos.

A Hamiltoniana *tight binding* para um isolante topológico é descrita na equação (A.33) do apêndice (A), incluindo além das interações entre primeiros vizinhos é inserido na Hamiltoniana *tight binding* o termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos. Logo temos,

$$\begin{aligned}
H_k = \sum_k & \left(\left(\epsilon_0^{(s)} - 2t_s(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t_s^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} \right) a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + \right. \quad (3.10) \\
& + \left(2it_1[\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] + 2i\sqrt{2}t_2 (\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a)) \right) a_{k,s}^\dagger b_{k,p} + \\
& + \left(\epsilon_0^{(p)} - 2t_p(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t_p^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} \right) b_{k,p}^\dagger b_{k,p} + \\
& \left. + \left(2it_1^*[-\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] + 2i\sqrt{2}t_2^* (-\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a)) \right) b_{k,p}^\dagger a_{k,s} \right),
\end{aligned}$$

os termos de interação entre terceiros vizinhos não são levados em consideração na Hamiltoniana acima.

Fazendo as seguintes substituições,

$$\left\{ \begin{array}{l}
t_p - t_s = 2B, \\
t_p^{(2)} - t_s^{(2)} = 2B_2, \\
\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_0^{(p)} + 4t_p - 4t_s + 4t_p^{(2)} - 4t_s^{(2)} = 2\bar{\Delta}, \\
A = 2it_1, \\
A_2 = 2it_2, \\
\bar{\epsilon}(k) = \frac{\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_0^{(p)}}{2} - (t_s + t_p)(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 2(t_s^{(2)} + t_p^{(2)})(\cos(k_x a) \cos(k_y a)),
\end{array} \right.$$

a Hamiltoniana, torna-se

$$\begin{aligned}
H_k = \sum_k & \left((\bar{\epsilon}(k) + \bar{\Delta} - 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) - 2B_2(2 - 2 \cos(k_x a) \cos(k_y a))) a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + \right. \quad (3.11) \\
& + \left(A[\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] + A_2\sqrt{2} (\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a)) \right) a_{k,s}^\dagger b_{k,p} + \\
& + (\bar{\epsilon}(k) - \bar{\Delta} + 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) + 2B(2 - 2 \cos(k_x a) \cos(k_y a))) b_{k,p}^\dagger b_{k,p} \\
& \left. + (-A^*[-\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] - A_2^*\sqrt{2} (-\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a))) b_{k,p}^\dagger a_{k,s} \right).
\end{aligned}$$

A partir da equação (3.11), podemos determinar relação de dispersão da energia de um isolante topológico inscrito numa rede quadrada infinita, devido as interações entre primeiros vizinhos e com termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, que é escrita como

$$E = \sqrt{\mathcal{A}^2 + (\bar{\Delta} - 4B + 2B(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4B_2 + 4B_2(\cos(k_x a) \cos(k_y a)))^2}, \quad (3.12)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^2 = & A^2(\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a)) + 2\sqrt{2}AA_2(\sin^2(k_x a) \cos(k_y a) + \sin^2(k_y a) \cos(k_x a)) \quad (3.13) \\ & + 2A_2^2(\sin^2(k_x a) \cos^2(k_y a) + \sin^2(k_y a) \cos^2(k_x a)). \end{aligned}$$

Novamente negligenciamos o termo $\epsilon(k)$ da relação de dispersão (3.12) por fornecer apenas uma mudança total de energia para todos os estados sem alterar os perfis das funções de onda, não alterando, assim, os pontos onde ocorrem as transições de fase e as propriedades topológicas do modelo. Observe que $\bar{\Delta} - 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) - 2B_2(2 - 2\cos(k_x a) \cos(k_y a))$ é a versão microscópica modificada do termo de massa $M(k)$ do modelo original. A modificação do termo de massa é devido à perturbação causada pelo termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos.

Nas Figuras (16, 17 e 18) podemos observar a estrutura das bandas da energia para um Isolante Topológico inscrito numa rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos. Todas as figuras foram feitas para oito diferentes valores do Δ . Os parâmetros A e B são mantidos fixos, possuindo o mesmo valor igual a 1.0. Nestas figuras podemos observar que o comportamento das bandas de energia variam sensivelmente com o valor de Δ . A variação do valor de Δ induz uma mudança na região onde acontece o *gap* do *bulk*, variando da região onde $k_x = 0$ e $k_y = 0$, Figuras (16(a), 17(a) e 18(a)) e para $k_x = \pm\pi$ e $k_y = \pm\pi$, Figuras (16(h), 17(h) e 18(h)). Observamos que com o aumento cadenciado da intensidade dos segundos vizinhos, a relação de dispersão do Isolante Topológico sofre uma modificação gradual, onde aumentam as energias para os vetores de onda maiores

Pode ser observado também que na equação (3.12) da relação de dispersão existem vários pontos críticos no espectro onde o *gap* entre as bandas de valência e condução se tocam para vários valores de Δ/B . Os vetores de onda para o *gap* zero na relação de dispersão são determinados pelo seguinte equação:

$$\Delta = 4B - 2B(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) + 2B_2(2 - 2\cos(k_x a) \cos(k_y a)) - 4B_2. \quad (3.14)$$

A tabela abaixo mostra as combinações dos parâmetros que fornecem o valor para o *gap* zero nas bandas de energia. O *gap* encontra-se fechado em

BZ	k_x	k_y	Δ
Γ	0	0	$-4B_2$
$X1$	0	π	$4(B + B_2)$
$X2$	π	0	$4(B + B_2)$
M	π	π	$8B - 4B_2$

Tabela 2: As combinações dos vetores de onda e o Δ resultando num espectro *gapless* com os respectivos pontos na zona de Brillouin.

Observe que os *gaps* ocorrem em diferentes pontos da zona de Brillouin desdo do cone original de Dirac em $\Gamma(0, 0)$ para $X1(\pi, 0)$, $X2(0, \pi)$ e $M(\pi, \pi)$. O fechamento do *gap* em M ocorre em $\Delta = 8B - 4B_2$, enquanto o fechamento do *gap* em X_1 e X_2 ocorre simultaneamente em $\Delta = 4(B + B_2)$. Nesses pontos ocorre uma transição de fase topológica quântica.

Consideramos agora o efeito dos segundos vizinhos no sistema descrito acima. Em geral, a interação entre segundos vizinhos é bem menor que a interação entre primeiros vizinhos. Aqui para fazermos um estudo mais completo vamos analisar o sistema para vários valores dos parâmetros de interação entre segundos vizinhos. A Figura (19), mostra a relação de dispersão para um isolante topológico num gráfico de contorno para oito valores diferentes do parâmetro de *hopping* devido o termo de acoplamento relacionado com a interação *spin-órbita*. Na figura, a energia aumenta da cor azul para a vermelha, nós escolhemos os seguintes valores para $\Delta = 2.0$, $B = 1.0$, $A = 1.0$ e $B_2 = 0.2$, observe que o aumento no valor do parâmetro de *hopping* devido ao termo de acoplamento (A_2) não varia a posição de onde se encontra o *gap* entre as bandas de energia de um isolante topológico, ele apenas translada as bandas de energia.

Na Figura (20) fixamos os valores dos parâmetros $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.2$ e $\Delta = 0.0$, para mostrar o gráfico de curvas de nível para diferentes valores do parâmetro B_2 . De acordo com a Tabela (2) para $B_2 = 0$ o *gap* de energia se fecha apenas no ponto Γ da zona de Brillouin, diferentemente do resultado encontrado para estrutura de bandas de um isolante topológico com somente interações entre primeiros vizinhos onde *gap* se fecha em todos os pontos de alta simetria da zona de Brillouin. Com o aumento do valor do parâmetro B_2 podemos notar que o ponto Γ da zona de Brillouin é transladado de $\Delta = 0.0$, para um novo ponto que, depende do valor do parâmetro B_2 como é observado na Tabela (2). A energia aumenta com o valor B_2 (do azul para o vermelho).

Na Figura (21) é mostrado o gráfico de contorno para diferentes valores do parâmetro Δ , para este caso os parâmetros A , B , A_2 e B_2 são mantidos fixos com os respectivos valores 1, 5, 0.5, 0.9 e 0.10. Como nas figuras anteriores a energia aumenta da cor azul para a verme-

lha. Na subfigura (a) é mostrado o ponto crítico onde *gap* encontra-se fechado na relação de dispersão para o ponto Γ da zona de Brillouin. Na subfigura (f) acontece a transição de fase topológica quântica, nos pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin. Na subfigura (h) temos outra transição de fase, mas, neste caso, o sistema deixa de ser um Isolante Topológico, passando a ser apenas um isolante comum. Observe que as energias das bandas mudam significativamente à medida que o valor de Δ é aumentado. Quando comparamos o caso das interações entre primeiros vizinhos, com o caso das interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, observamos que as interações com o termo de acoplamento fornecem muito mais possibilidades da existência de pontos de transição de fase.

Portanto, pelas Figuras (16, 17 e 18), é observado que o aumento gradual dos parâmetros de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos produzem uma mudança total da energia para todos os estados e modificam as regiões topológicas dos pontos onde ocorrem os *gaps* nulos correspondendo as transições de fase do modelo variando, assim, o *range* onde o material se comporta como isolante topológico.

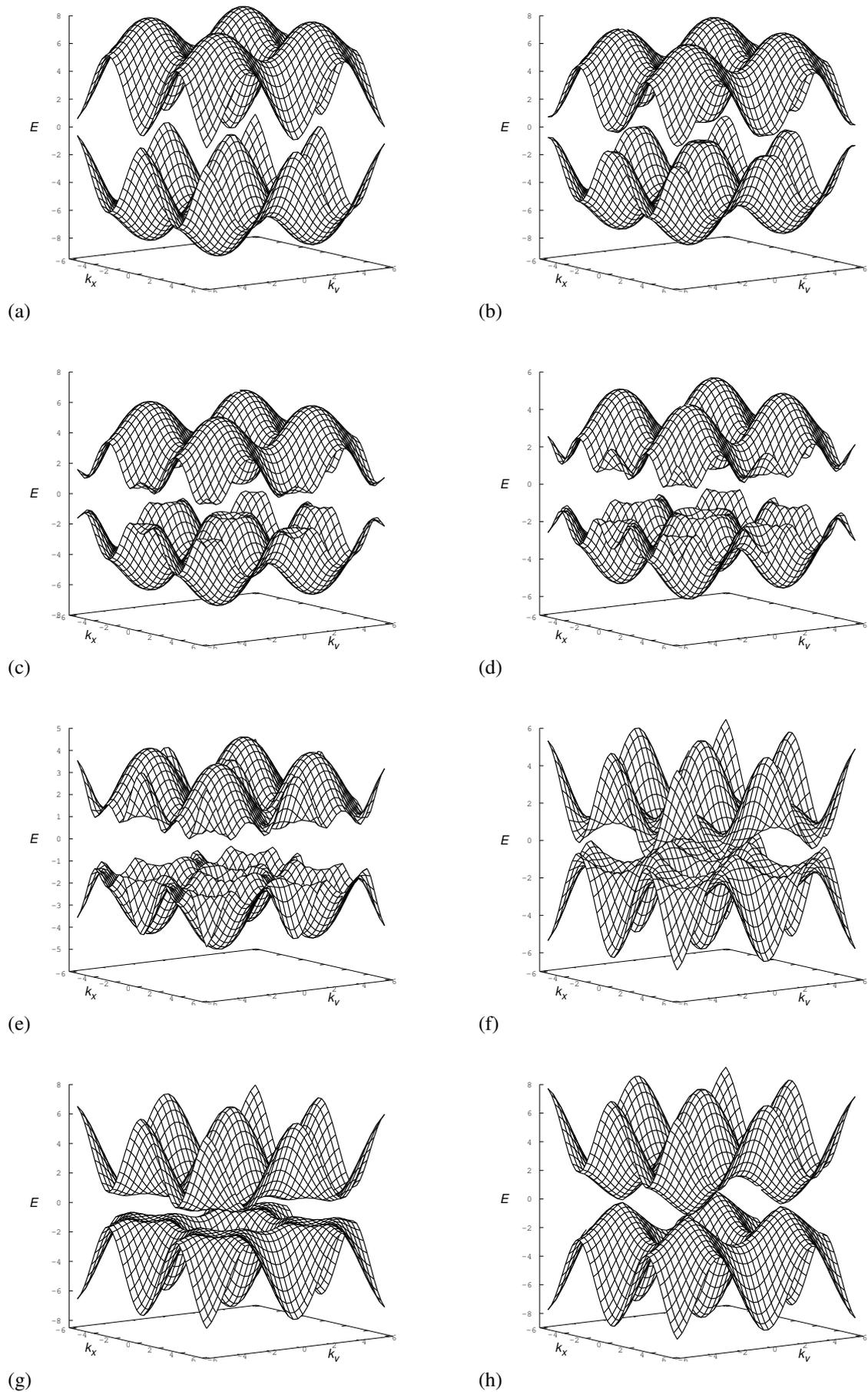


Figura 16: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.2$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.2$, e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.80$, (b) $\Delta = 0.0$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$, (e) $\Delta = 3.0$, (f) $\Delta = 4.8$, (g) $\Delta = 6.0$, (h) $\Delta = 7.2$.

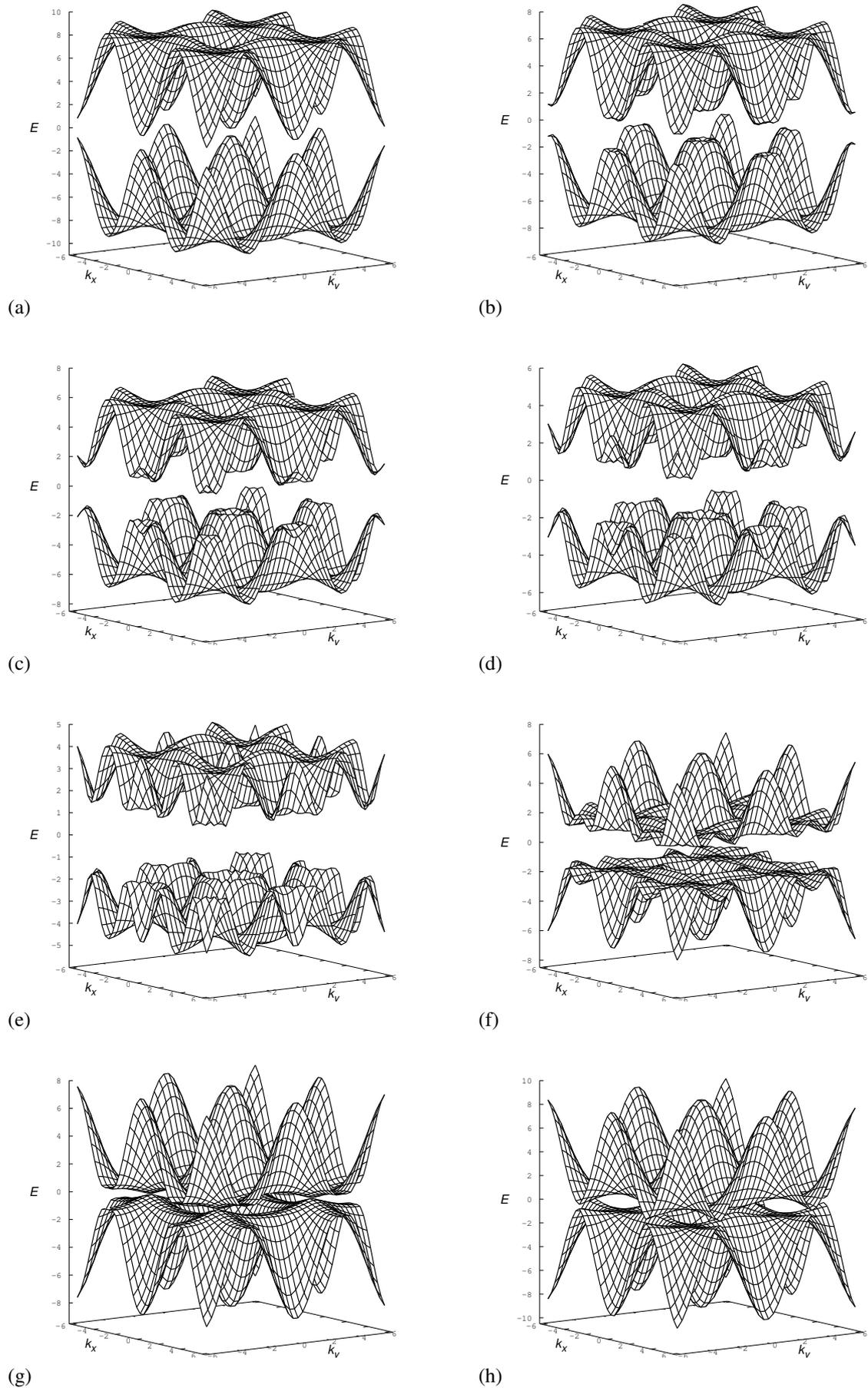


Figura 17: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.6$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.6$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -2.4$, (b) $\Delta = -1.0$, (c) $\Delta = 0.0$, (d) $\Delta = 1.0$, (e) $\Delta = 2.0$, (f) $\Delta = 4.0$, (g) $\Delta = 5.6$, (h) $\Delta = 6.4$.

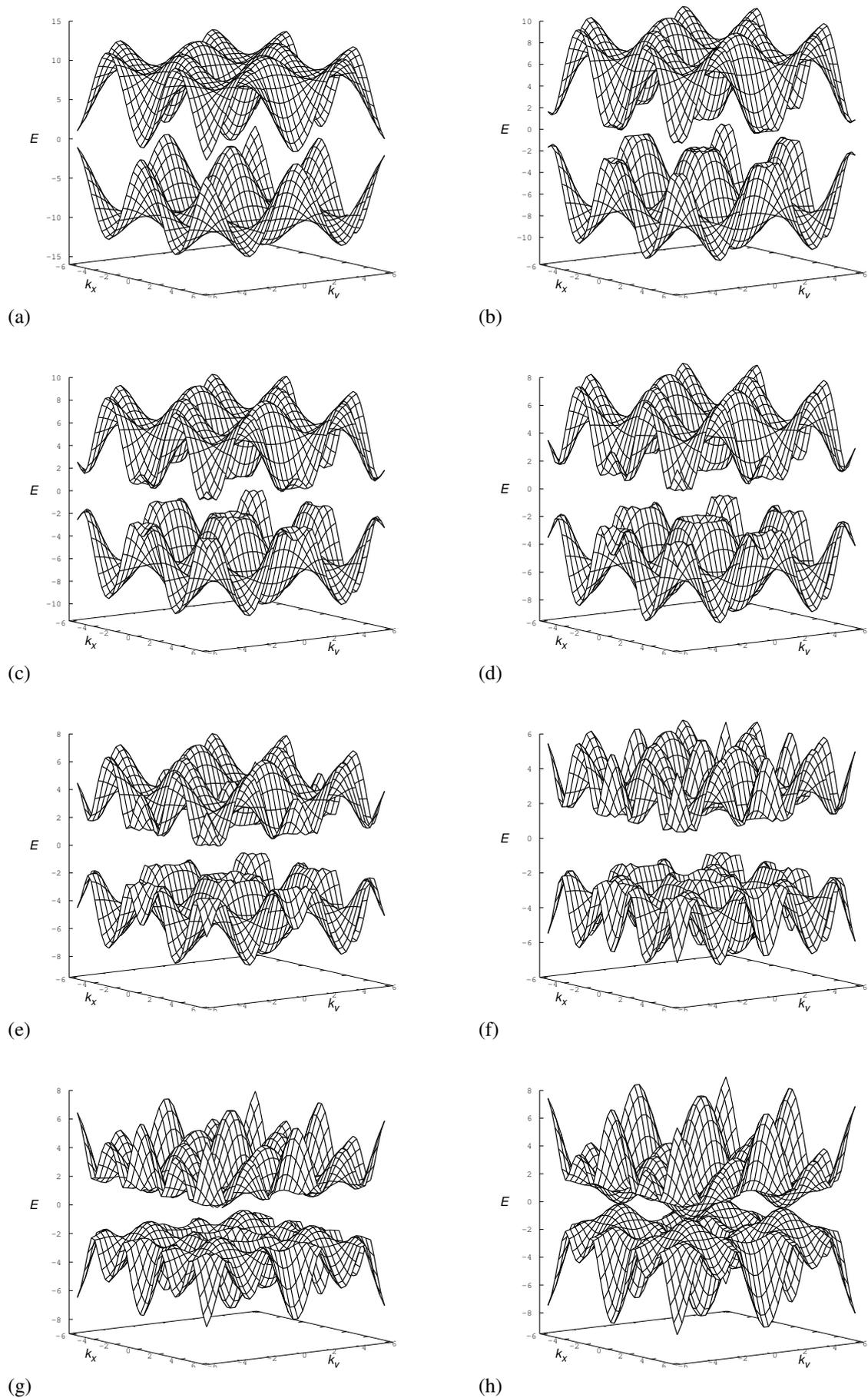


Figura 18: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 1.0$, $B = 1.0$, $B_2 = 1.0$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -4.0$, (b) $\Delta = -2.0$, (c) $\Delta = -1.0$, (d) $\Delta = 0.0$, (e) $\Delta = 1.0$, (f) $\Delta = 2.0$, (g) $\Delta = 3.0$, (h) $\Delta = 8.0$.

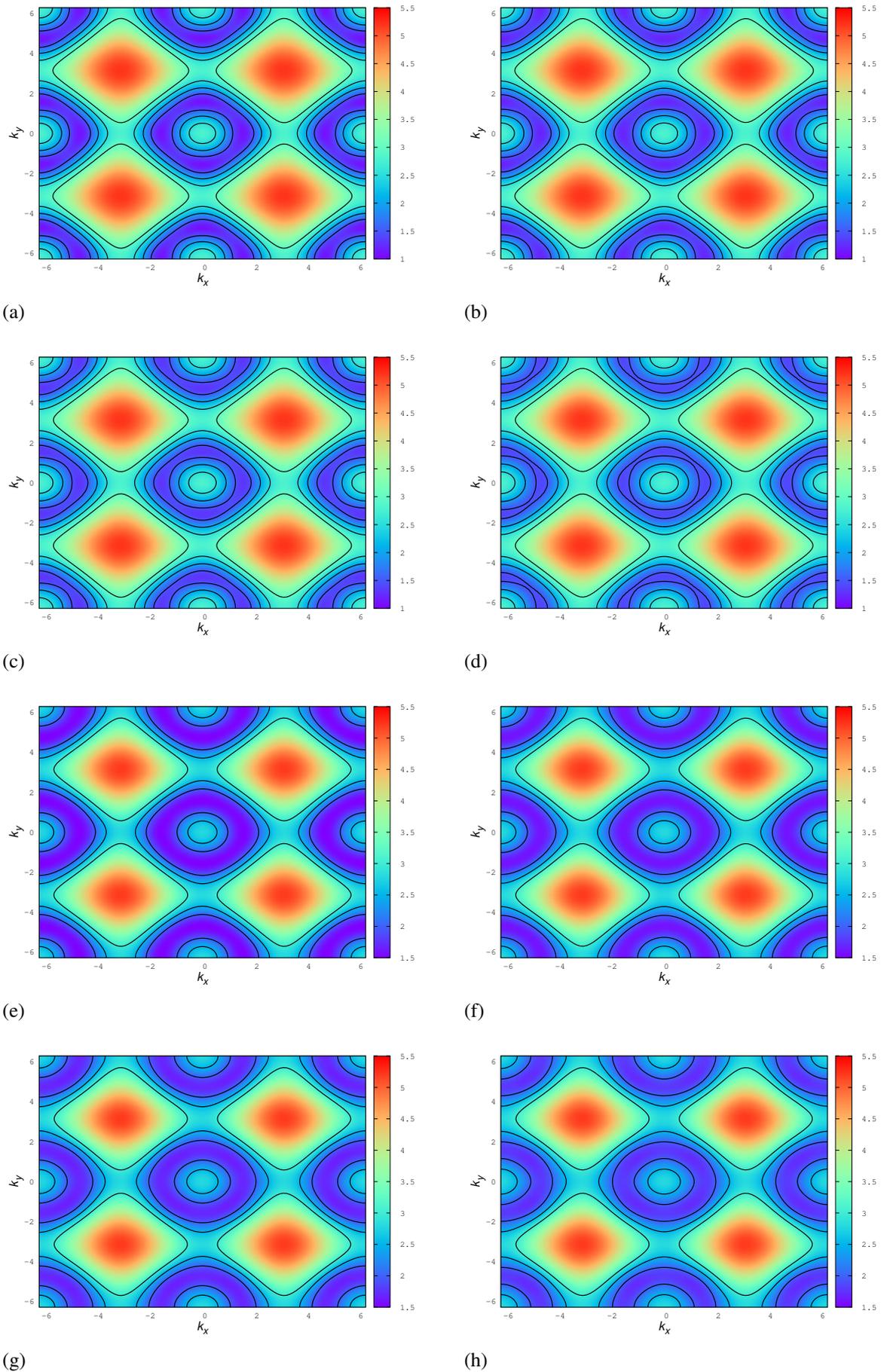


Figura 19: Relação de dispersão para $\Delta = 2.0$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.20$ e $A = 1.0$, e oito diferentes valores para A_2 . (a) $A_2 = 0.10$, (b) $A_2 = 0.20$, (c) $A_2 = 0.30$, (d) $A_2 = 0.40$, (e) $A_2 = 0.50$, (f) $A_2 = 0.60$, (g) $A_2 = 0.70$, (h) $A_2 = 0.80$.

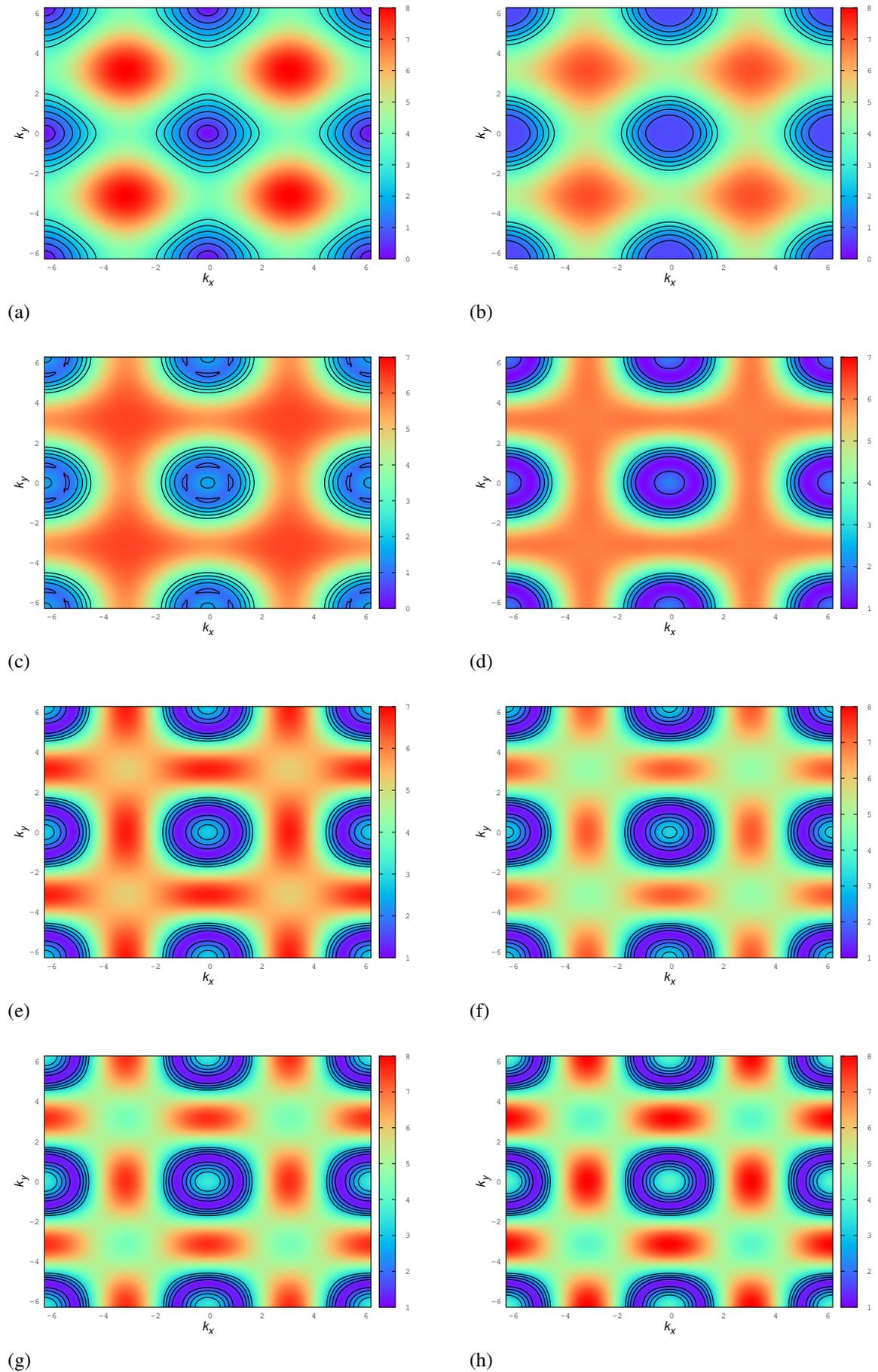
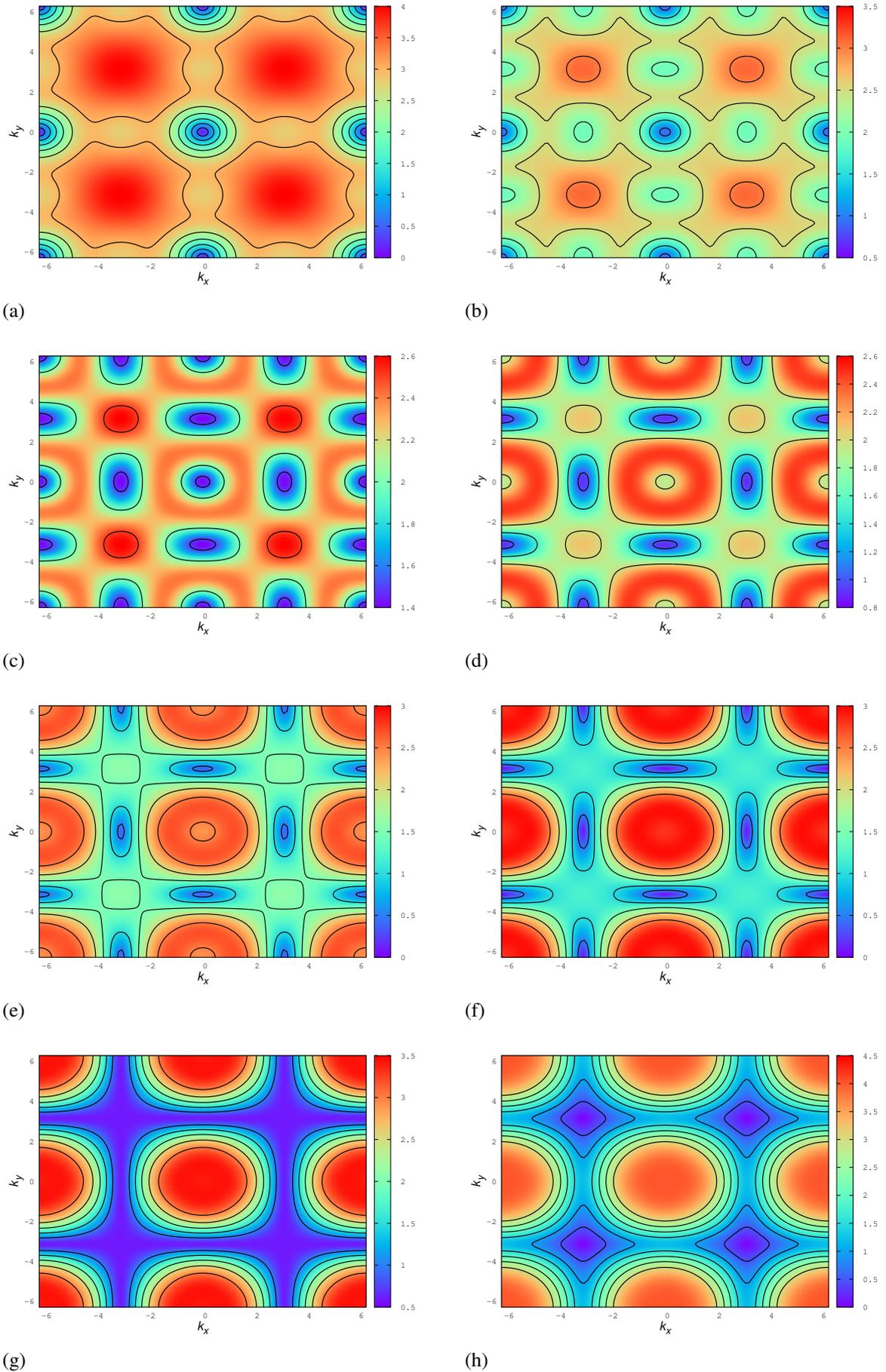


Figura 20: Relação de dispersão para $\Delta = 0.0$, $B = 1.0$, $A = 1.0$, $A_2 = 0.20$, e oito diferentes valores para B_2 . (a) $B_2 = 0.00$, (b) $B_2 = 0.20$, (c) $B_2 = 0.40$, (d) $B_2 = 0.50$, (e) $B_2 = 0.70$, (f) $B_2 = 0.80$, (g) $B_2 = 0.90$, (h) $B_2 = 1.00$.



(g) (h)
 Figura 21: Relação de dispersão para $B = 0.5$, $B_2 = 0.10$, $A = 1.5$, $A_2 = 0.9$, e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.40$, (b) $\Delta = 0.0$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 1.5$, (e) $\Delta = 2.0$, (f) $\Delta = 2.4$, (g) $\Delta = 3.0$, (h) $\Delta = 3.6$.

3.4 Hamiltoniana *Tight Binding* com um termo de Acoplamento entre Segundos e Terceiros Vizinhos

Nessa seção, determinamos a Hamiltoniana *tight binding* para uma rede quadrada inserindo o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos. Para a construção desta Hamiltoniana *tight binding* vamos levar em conta as interações entre primeiros vizinhos e a perturbação proporcionada pelo termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos.

A Hamiltoniana *tight binding* para um isolante topológico é descrita na equação (A.33) do apêndice (A), incluindo além das interações entre primeiros vizinhos é inserido na Hamiltoniana *tight binding* o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos. Logo temos,

$$\begin{aligned}
H_k = \sum_k & \left(\left(\epsilon_0^{(s)} - 2t_s(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t_s^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} \right. \right. & (3.15) \\
& - 2t_s^{(3)}(\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)) \left. \right) a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + (A_1(k) + A_2(k) + A_3(k)) a_{k,s}^\dagger b_{k,p} \\
& + \left(\epsilon_0^{(p)} - 2t_p(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t_p^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} - 2t_p^{(3)}(\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)) \right) b_{k,p}^\dagger b_{kp} \\
& + (A_1^*(k) + A_2^*(k) + A_3^*(k)) b_{k,p}^\dagger a_{k,s},
\end{aligned}$$

onde $A_1(k) = 2it_1[\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)]$, $A_2(k) = 2i\sqrt{2}t_2(\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a))$ e $A_3(k) = 2it_1^3[\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)]$.

Fazendo as seguintes substituições, na equação (3.15)

$$\left\{ \begin{array}{l}
t_p - t_s = 2B, \\
t_p^{(2)} - t_s^{(2)} = 2B_2, \\
t_p^{(3)} - t_s^{(3)} = 2B_3, \\
\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_0^{(p)} + 4t_p - 4t_s + 4t_p^{(2)} - 4t_s^{(2)} + 4t_p^{(3)} - 4t_s^{(3)} = 2\bar{\Delta}, \\
A = 2it_1, \\
A_2 = 2it_2, \\
A_3 = 2it_3, \\
\bar{\epsilon}(k) = \frac{\epsilon_0^{(s)} - \epsilon_0^{(p)}}{2} - (t_s + t_p)(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 2(t_s^{(2)} + t_p^{(2)})(\cos(k_x a) \cos(k_y a)) \\
- (t_s^{(3)} + t_p^{(3)})(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)),
\end{array} \right.$$

a expressão então torna-se

$$\begin{aligned}
H_k = \sum_k & \left((\bar{\epsilon}(k) + \bar{\Delta} - 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) - 2B_2(2 - 2\cos(k_x a) \cos(k_y a)) \right. & (3.16) \\
& \left. - 2B_3(2 - \cos(2k_x a) - \cos(2k_y a))) a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + (A(\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)) \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + A_2 \sqrt{2} (\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a)) + A_3 (\sin(2k_x a) + i \sin(2k_y a)) \Big) a_{k,s}^\dagger b_{k,p} + \\
& + (\bar{\epsilon}(k) - \bar{\Delta} + 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) + 2B_2(2 - 2 \cos(k_x a) \cos(k_y a)) \\
& + 2B_3(2 - \cos(2k_x a) - \cos(2k_y a))) b_{k,p}^\dagger b_{k,p} + (-A^*(-\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)) \\
& - A_2^* \sqrt{2} (-\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a)) - A_3^*(-\sin(2k_x a) + i \sin(2k_y a)) \Big) b_{k,p}^\dagger a_{k,s}
\end{aligned}$$

A partir da equação (3.16) podemos determinar a relação de dispersão da energia para as interações entre primeiros vizinhos com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos. Assim temos

$$E = \sqrt{\mathcal{A}^2 + (\bar{\Delta} - \mathcal{D})^2}, \quad (3.17)$$

onde $\mathcal{D} = 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) + 2B_2(2 - 2 \cos(k_x a) \cos(k_y a)) + 2B_3(2 - \cos(2k_x a) - \cos(2k_y a))$ e

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}^2 = & A^2(\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a)) + 2AA_2(\sin^2(k_x a) \cos(k_y a) + \sin^2(k_y a) \cos(k_x a)) + \\
& 2AA_3(\sin(k_x a) \sin(2k_x a) + \sin(k_y a) \sin(2k_y a)) + A_2^2(\sin^2(k_x a) \cos^2(k_y a) + \sin^2(k_y a) \cos^2(k_x a)) + \\
& 2A_2A_3(\sin(2k_x a) \sin(k_x a) \cos(k_y a) + \sin(2k_y a) \sin(k_y a) \cos(k_x a)) + A_3^2(\sin^2(2k_x a) + \sin^2(2k_y a)).
\end{aligned} \quad (3.18)$$

Novamente negligenciamos o termo $\epsilon(k)$ da relação de dispersão (3.17) por fornecer apenas uma mudança total de energia para todos os estados sem alterar os perfis das funções de onda, não alterando, assim, os pontos onde ocorrem as transições de fase e as propriedades topológicas do modelo. Observe que $\bar{\Delta} - 2B(2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)) - 2B_2(2 - 2 \cos(k_x a) \cos(k_y a)) - 2B_3(2 - \cos(2k_x a) - \cos(2k_y a))$ é a microscópica versão modificada do termo de massa $M(k)$, do modelo original. A modificação do termo de massa é devido à perturbação causada pelo termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos.

Nas Figuras (22, 23 e 24) podemos observar a estrutura das bandas de energia para um isolante topológico inscrito numa rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos. Todas as figuras foram feitas para oito diferentes valores do Δ , os parâmetros A e B são mantidos fixos, possuindo o mesmo valor igual a 1.0, enquanto os parâmetros relacionados com as interações entre segundos e terceiros vizinhos são modificados para cada figura. Nestas figuras podemos observar que o comportamento das bandas de energia variam sensivelmente com o valor de Δ . A variação do valor de Δ induz uma mudança na região onde acontece o *gap* do *bulk*, variando da região onde $k_x = 0$ e $k_y = 0$ como visto nas Figuras (22(a), 23(a), e 24(a)) e para $k_x = \pm\pi$ e $k_y = \pm\pi$ Figura (22(h), 23(h) e 24(h)). Observe que, o aumento gradual da intensidade dos parâmetros de interação dos segundos vizinhos e dos terceiros vizinhos, faz com que à

relação de dispersão do isolante topológico sofra uma modificação gradual, as quais trazem contribuições ao espectro que aumentam as suas energias para os vetores de onda maiores.

Pode ser observado também que na equação (3.17) da relação de dispersão existem vários pontos críticos no espectro onde o *gap* entre as bandas de valência e condução se tocam para vários valores de Δ/B . Os vetores de onda para *gap* zero na relação de dispersão são determinados pela seguinte equação:

$$\Delta = 4B - 2B(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) + 2B_2(2 - 2\cos(k_x a)\cos(k_y a)) + 2B_3(2 - \cos(2k_x a) - \cos(2k_y a)) - 4B_2 - 4B_3. \quad (3.19)$$

A tabela abaixo mostra as combinações dos parâmetros que fornecem o valor para o *gap* zero nas bandas de energia. O *gap* encontra-se fechado em

BZ	k_x	k_y	Δ
Γ	0	0	$-4(B_2 + B_3)$
$X1$	0	π	$4(B + B_2 - B_3)$
$X2$	π	0	$4(B + B_2 - B_3)$
M	π	π	$8B - 4(B_2 + B_3)$

Tabela 3: As combinações dos vetores de onda e o Δ resultando num espectro *gapless* com os respectivos pontos na zona de Brillouin.

Observe que os *gap* ocorrem em diferentes pontos da zona de Brillouin, desde do cone original de Dirac em $\Gamma(0, 0)$ para $X1(\pi, 0)$, $X2(0, \pi)$ e $M(\pi, \pi)$. O fechamento do *gap* em M ocorre em $\Delta = B - 4(B_2 + B_3)$, enquanto o fechamento do *gap* em X_1 e X_2 ocorre simultaneamente em $\Delta = 4(B + B_2 - B_3)$. Nesses pontos ocorre uma transição de fase topológica quântica.

Consideramos agora o efeito dos terceiros vizinhos no sistema descrito acima. Em geral a interação entre terceiros vizinhos é bem menor que a interação entre primeiros e segundos vizinhos. Como nos casos anteriores para fazermos um estudo mais completo vamos analisar o sistema para vários valores dos parâmetros de interação entre terceiros vizinhos. A Figura (25) mostra a relação de dispersão para um isolante topológico num gráfico de contorno para oito valores diferentes do parâmetro de *hopping* devido ao termo de acoplamento *spin*-órbita relacionado com as interações entre terceiros vizinhos, na figura, a energia aumenta da cor azul para a vermelha, nós escolhemos os seguintes valores para $\Delta = 2.0$, $B = 1.0$, $A = 1.0$, $A_2 = 0.2$, $B_2 = 0.2$ e $B_3 = 0.04$ observe que o aumento no valor do parâmetro de *hopping* devido ao termo de acoplamento entre terceiros vizinhos (A_3) não varia a posição de onde se encontra o *gap* entre as bandas de energia de um isolante topológico, ele apenas dá um *shifts* na energia.

Na Figura (26) fixamos os valores dos parâmetros $A = 1.0$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.2$, $A_2 = 0.2$, $A_3 = 0.2$ e $\Delta = 0.0$, para mostrar o gráfico de contorno para diferentes valores do parâmetro B_3 . De acordo com a Tabela (3) para $B_3 = 0.0$ o ponto onde ocorre a transição de fase no ponto Γ da zona de Brillouin, encontra-se em $\Delta = -0,8$, sendo transladado da sua posição original, diferentemente do resultado encontrado para estrutura de bandas de um isolante topológico com somente interações entre primeiros vizinhos onde *gap* se fecha em todos os pontos da zona de Brillouin, com o aumento do valor do parâmetro B_3 podemos novamente transladar o ponto Γ da zona de Brillouin. Caso semelhante aconteceu quando analisamos o papel do parâmetro B_2 na Figura (20) e em ambos os casos o novo ponto para essa transição de fase, depende do valor dos parâmetros B_3 e B_2 como é observado na tabela (3). A energia aumenta com o valor B_3 (do azul para o vermelho), mas de uma maneira diferente em relação à Figura (25).

Na Figura (27) é mostrado o gráfico de contorno para diferentes valores do parâmetro Δ , para este caso os parâmetros A , B , A_2 , B_2 , A_3 e B_3 são mantidos fixos com os respectivos valores 1, 5, 0.5, 0.9, 0.10, 0.63 e 0.02. Como nas figuras anteriores a energia aumenta da cor azul para a vermelha. Na subfigura (a) é mostrado o ponto crítico onde *gap* encontra se fechado na relação de dispersão para o ponto Γ da zona de Brillouin. Na subfigura (f) acontece a transição de fase topológica quântica, nos pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin. Na subfigura (h) temos outra transição de fase, mas neste caso, o sistema deixa de ser um isolante topológico passando a ser apenas um isolante comum. Observe que as energias das bandas mudam significativamente à medida que o valor de Δ é aumentado. Quando comparamos o caso das interações entre primeiros vizinhos, com o caso das interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, observamos que as interações com o termo de acoplamento fornecem muito mais possibilidades da existência de pontos de transição de fase.

Na Figura (28) é mostrado a energia para cada ponto da zona de Brillouin, claramente podemos observar que, para $\Delta = 0.0$ não existe nenhum estado de *zero-gap*, isto é devido à adição do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos ao modelo com somente interações entre primeiros vizinhos. O *gap* encontra-se fechado em diferentes pontos quando Δ é variado. É interessante observar como as Figuras (12) e (28) mostram diferentes comportamentos para os espectros de energia.

Nós temos estudado teoricamente o efeito da perturbação causada pelos termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos sobre isolante topológicos usando um modelo *tight-binding*. Verificou-se que a banda de energia varia drasticamente em função dos parâmetros de *hopping* relacionados com as interações entre segundos e terceiros vizinhos. Portanto, pelas Figuras (22, 23 e 24) é observado que o aumento cadenci-

ado dos parâmetros de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos produzem uma mudança total da energia para todos os estados e modificam os pontos onde ocorrem as transições de fase do modelo variando, assim, o *range* onde o material se comporta como isolante topológico.

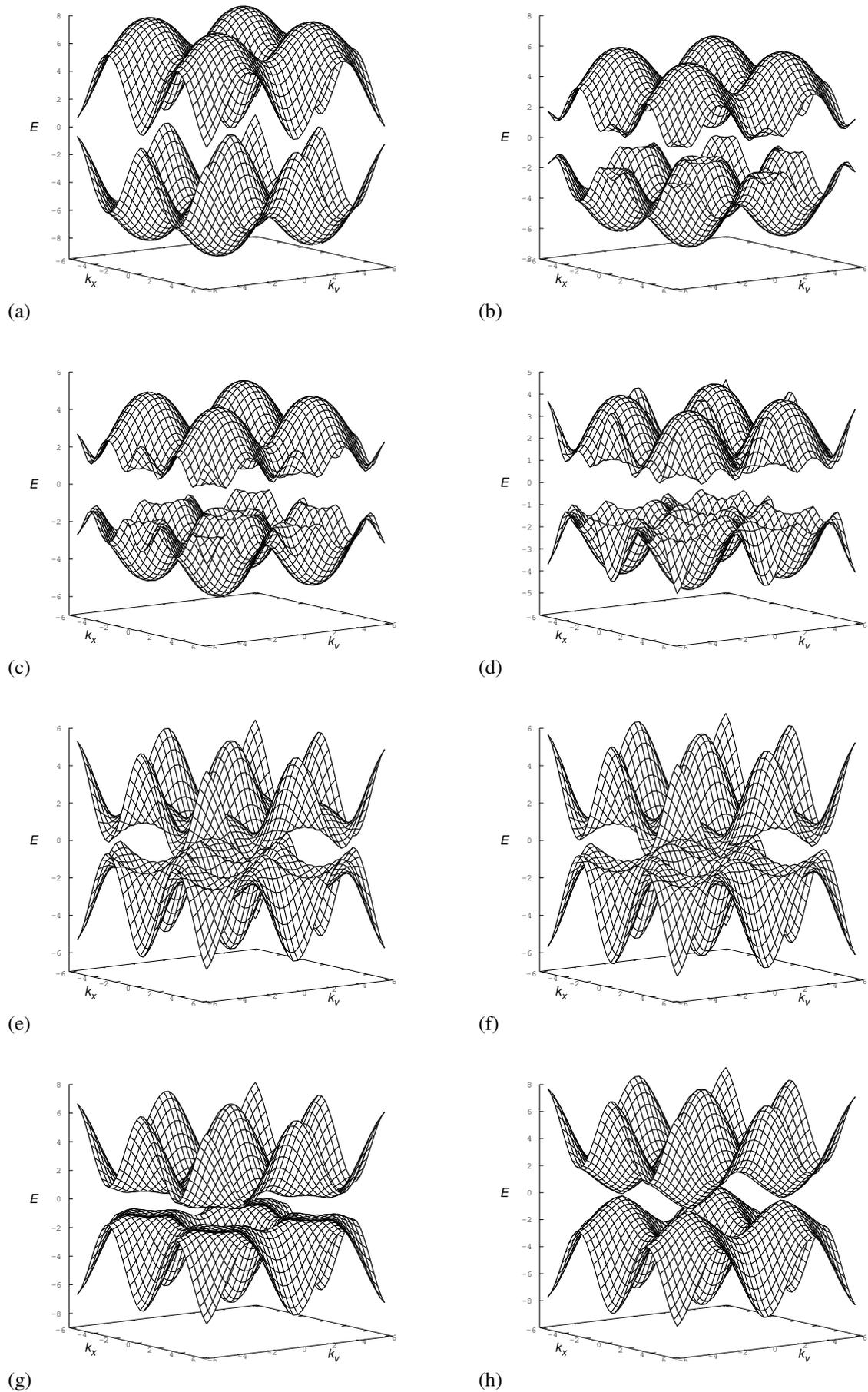


Figura 22: Relação de dispersão para $A = 1.00$, $A_2 = 0.20$, $A_3 = 0.04$, $B = 1.00$, $B_2 = 0.20$, $B_3 = 0.04$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.96$, (b) $\Delta = 1.00$, (c) $\Delta = 2.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.64$, (f) $\Delta = 5.00$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.04$.

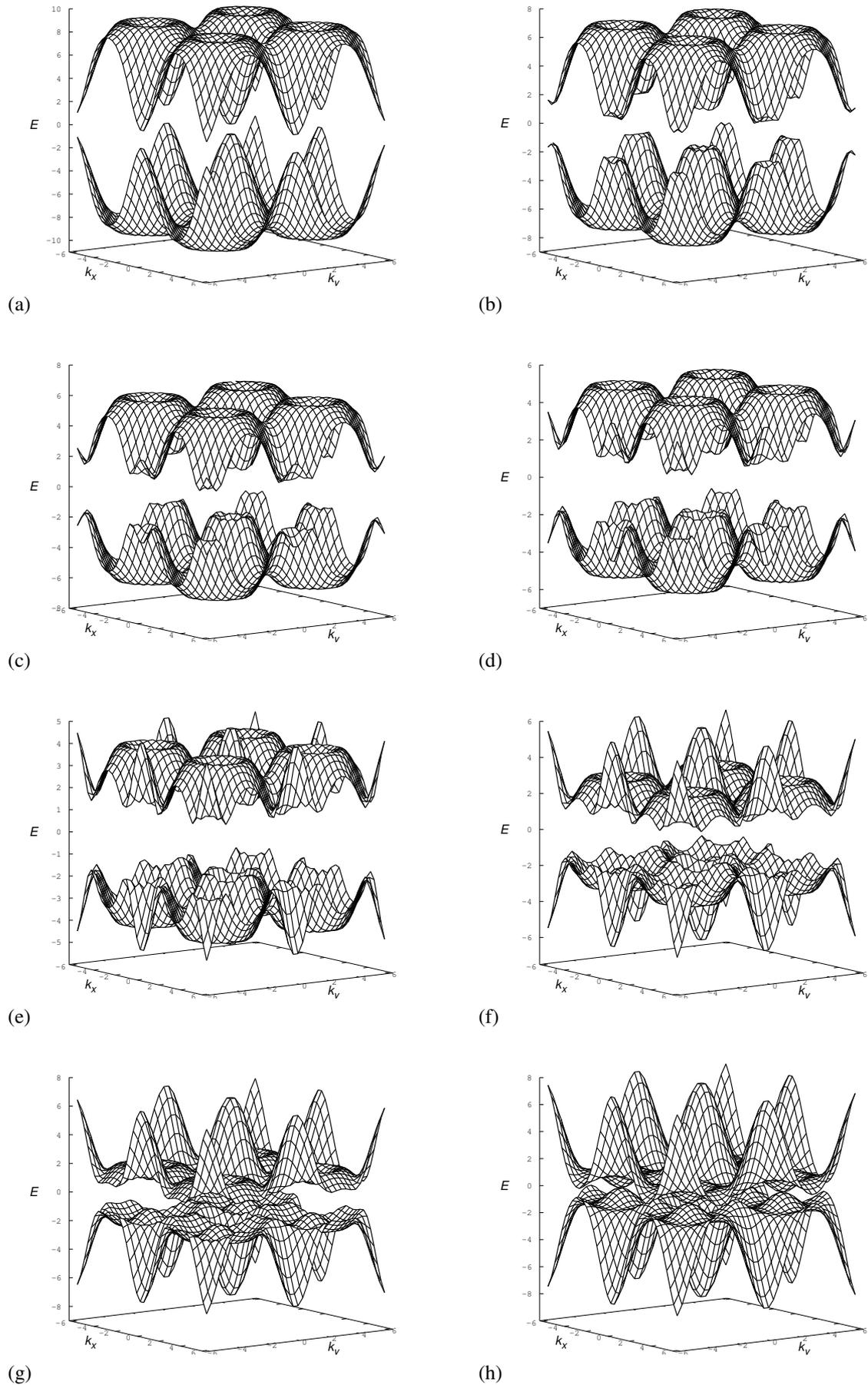


Figura 23: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.5$, $A_3 = 0.25$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.6$, $B_3 = 0.25$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -3.00$, (b) $\Delta = -1.00$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 2.00$, (f) $\Delta = 3.00$, (g) $\Delta = 4.00$, (h) $\Delta = 5.00$.

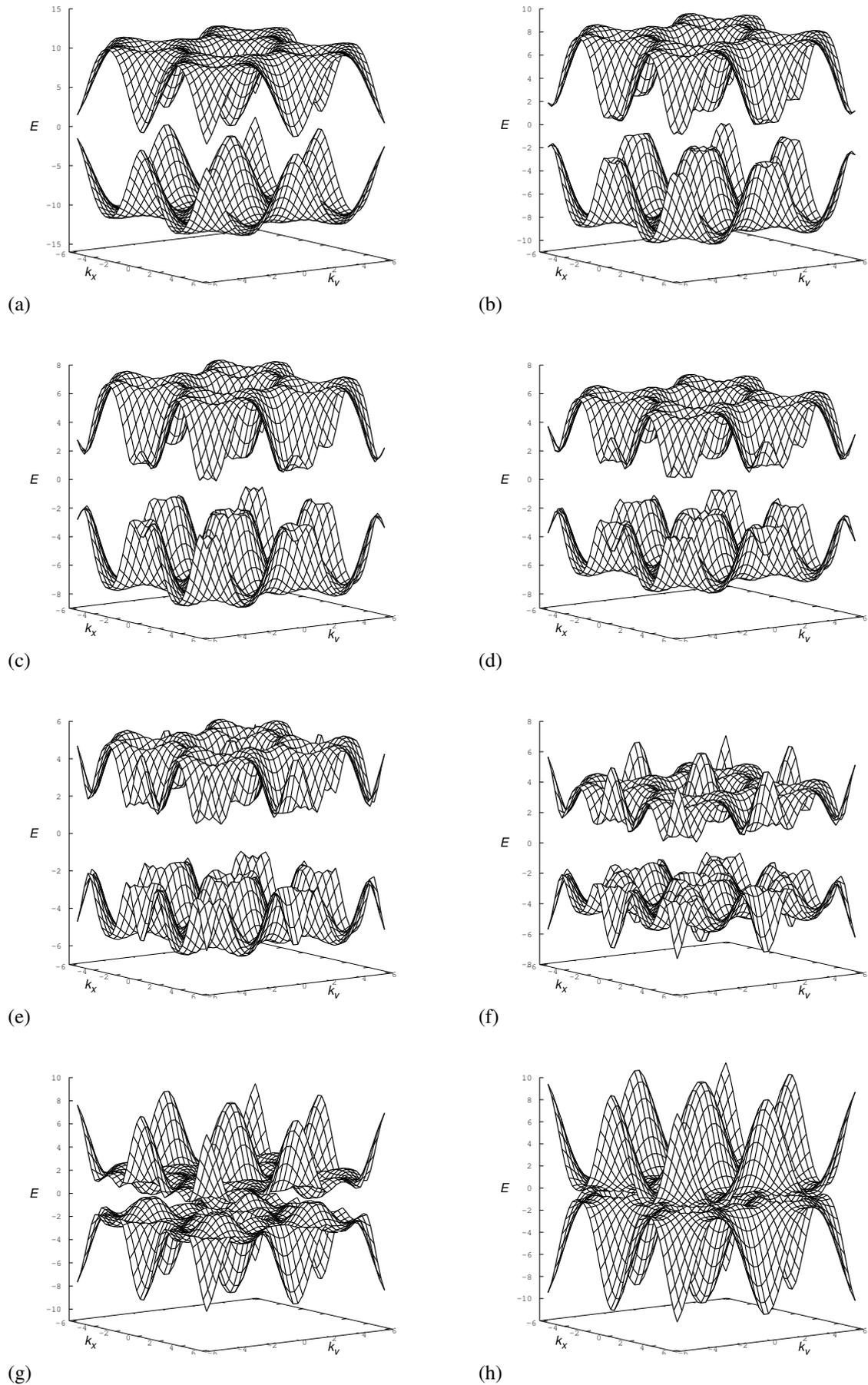


Figura 24: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.8$, $A_3 = 0.35$, $B = 1.0$, $B_2 = 1.0$, $B_3 = 0.35$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -4.60$, (b) $\Delta = -2.00$, (c) $\Delta = -1.00$, (d) $\Delta = 0.00$, (e) $\Delta = 1.00$, (f) $\Delta = 2.00$, (g) $\Delta = 4.00$, (h) $\Delta = 5.80$.

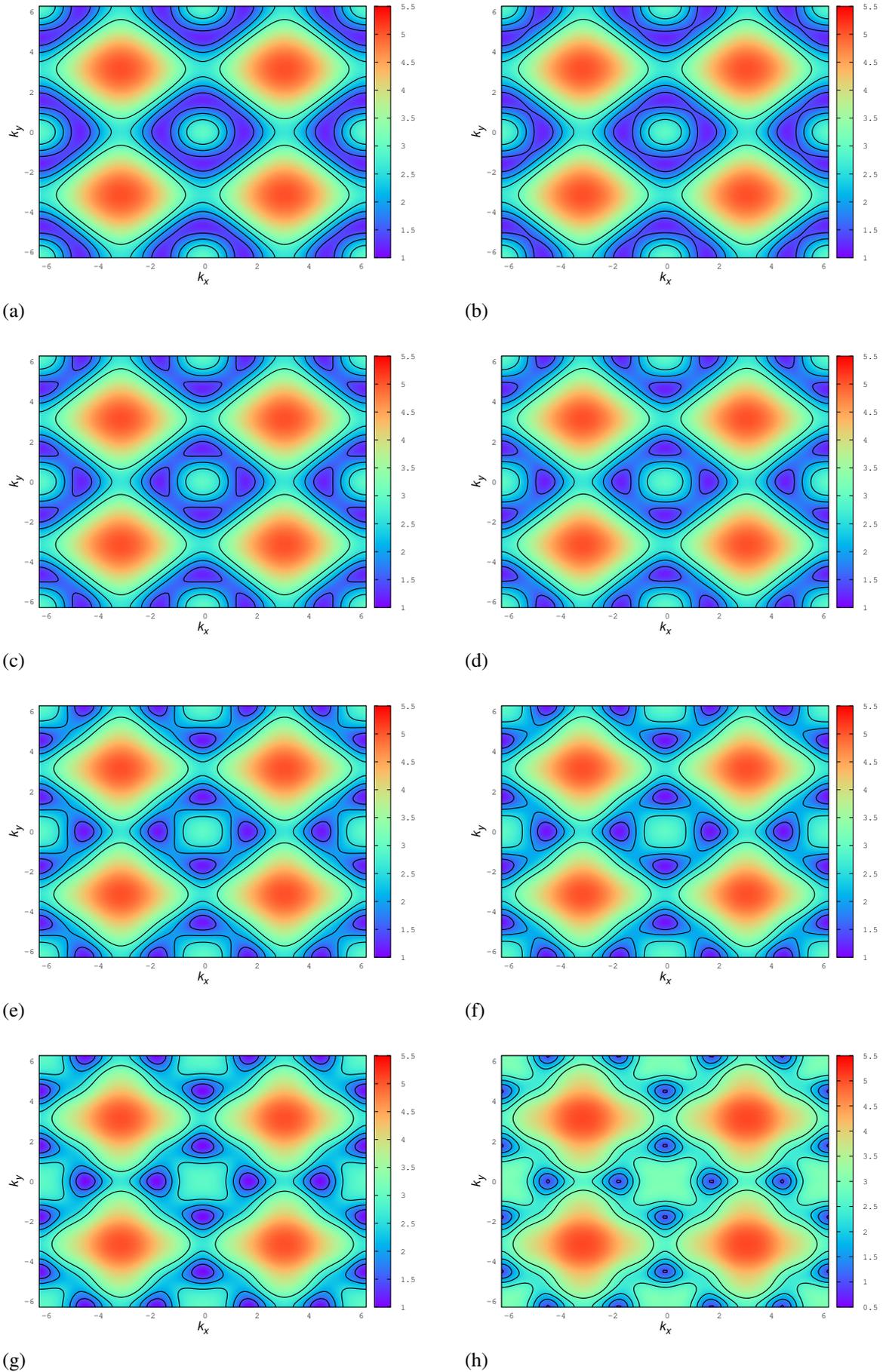


Figura 25: Relação de dispersão para $\Delta = 2.0$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.20$, $A_2 = 0.2$, $B_3 = 0.04$ e oito diferentes valores para A_3 . (a) $A_3 = 0.05$, (b) $A_3 = 0.10$, (c) $A_3 = 0.20$, (d) $A_3 = 0.30$, (e) $A_3 = 0.50$, (f) $A_3 = 0.60$, (g) $A_3 = 0.80$, (h) $A_3 = 1.00$.

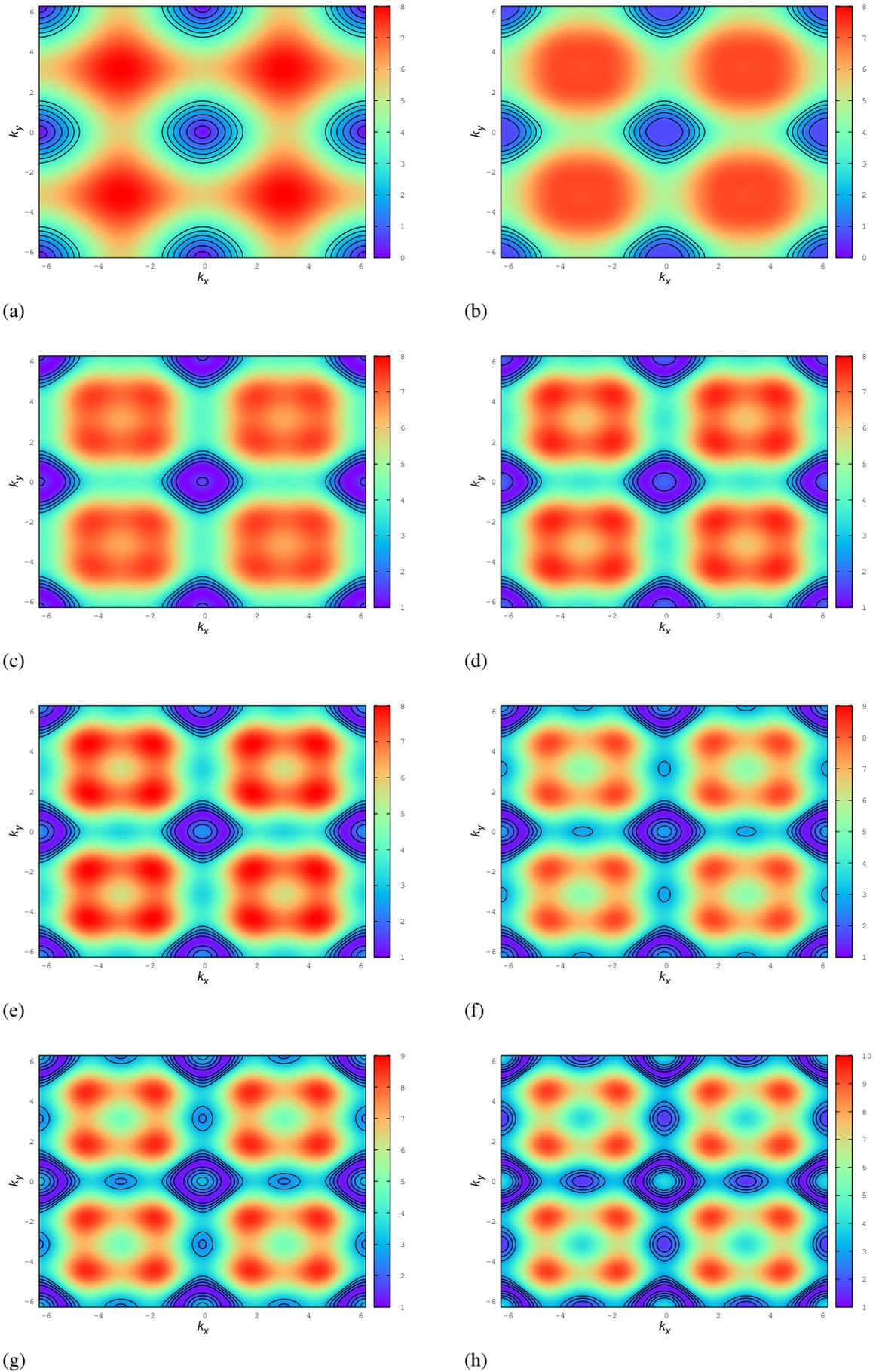


Figura 26: Relação de dispersão para $\Delta = 0.0$, $B = 1.0$, $A = 1.0$, $A_2 = 0.20$, $A_3 = 0.20$ e oito diferentes valores para B_3 . (a) $B_3 = 0.00$, (b) $B_3 = 0.20$, (c) $B_3 = 0.40$, (d) $B_3 = 0.50$, (e) $B_2 = 0.60$, (f) $B_2 = 0.70$, (g) $B_2 = 0.80$, (h) $B_2 = 1.00$.

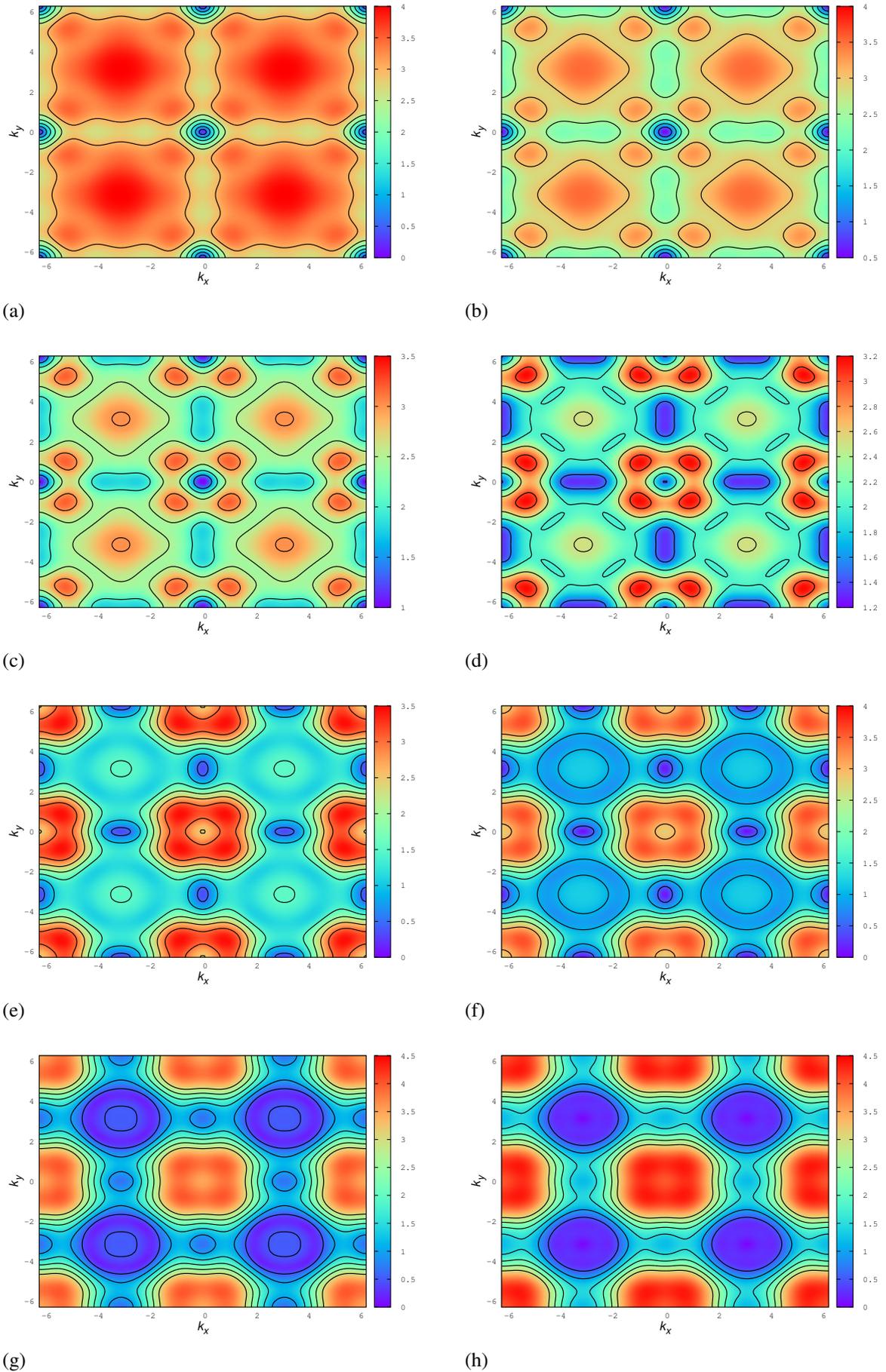


Figura 27: Relação de dispersão para $B = 0.5$, $B_2 = 0.10$, $B_3 = 0.02$, $A = 1.5$, $A_2 = 0.9$, $A_3 = 0$, $\mu = 0.63$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.48$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 0.50$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 2.00$, (f) $\Delta = 2.32$, (g) $\Delta = 3.00$, (h) $\Delta = 3.50$.

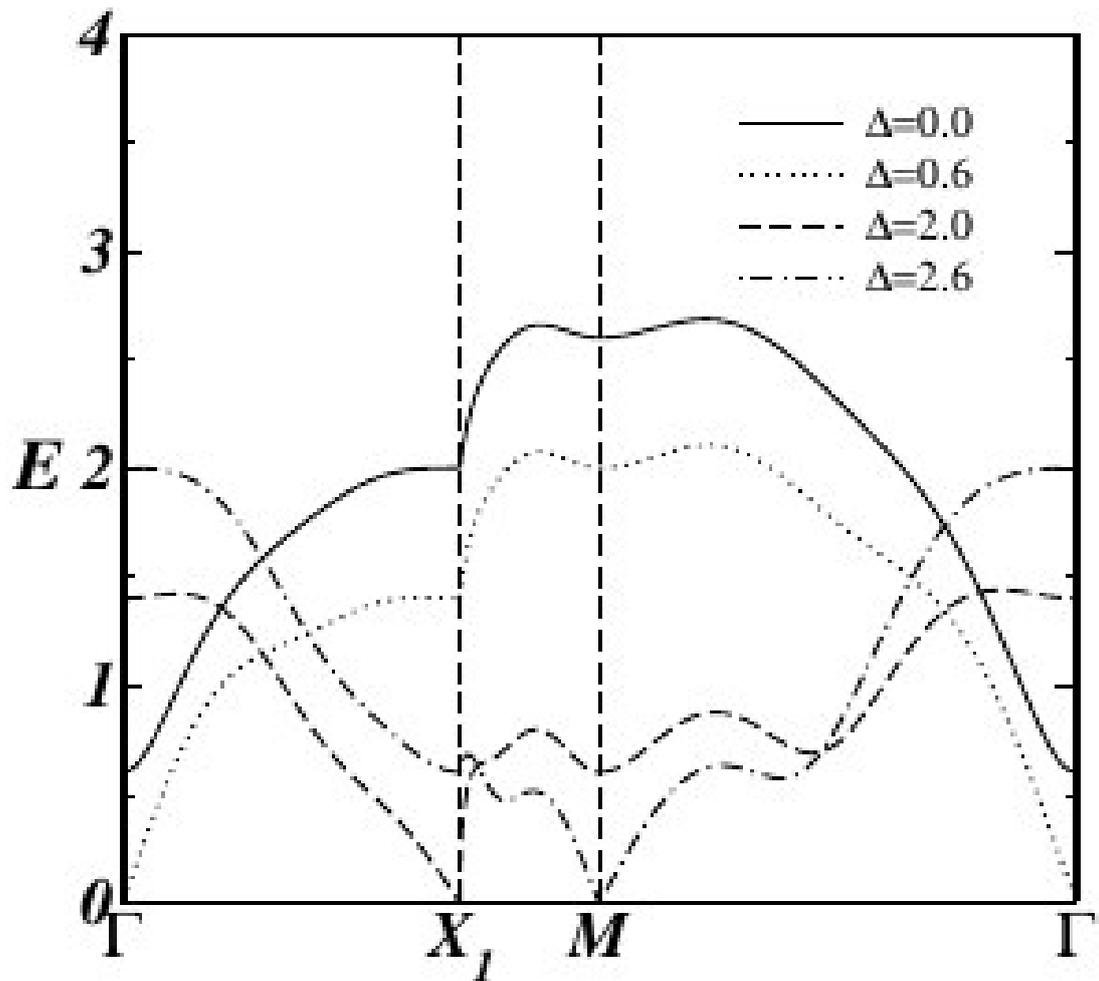


Figura 28: A relação de dispersão para diferentes valores de Δ , para $t_1 = 0.5$, $t_2 = 0.3$, $t_3 = 0.2$, $B = 1$, $B_2 = 0.4$ e $B_3 = 0.2$ a) $\Delta = 0.0$, b) $\Delta = 0.6$, $\Delta = 2.0$, $\Delta = 2.6$. [21]

4 MODOS DE BORDA

Até agora, nós desenvolvemos um modelo simples para estudar as propriedades das estruturas de bandas do *bulk* de um isolante topológico Z_2 , baseado numa Hamiltoniana *tight-binding* inscrita numa rede quadrada infinita com interações entre primeiros vizinhos e sobre o efeito de uma perturbação causada pelo termo de acoplamento que relaciona as interações entre segundos e terceiros vizinhos

Vamos agora calcular o espectro das bandas de energia para um Isolante Topológico numa rede quadrada finita, para mostrar explicitamente a existência de estados protegidos de borda para um regime topológico não trivial. A introdução dos estados de borda leva à quebra da invariância translacional, induzindo o acoplamento entre os cones de Dirac. Na descrição do sistema em questão, dizemos que a fita está localizada no plano (xy), garantindo a periodicidade da rede na direção x ($-\infty < x < \infty$) e limitando o número de linhas atômicas em N na direção y ($n = 1, 2, 3, \dots$), como mostra a Figura (29) [22, 23].

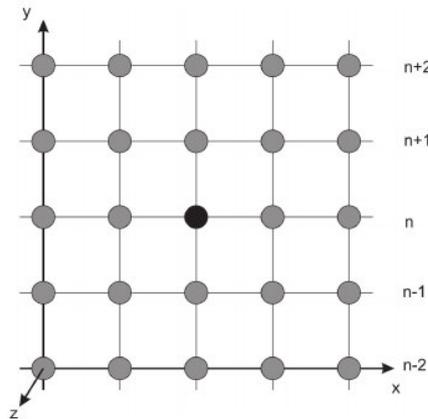


Figura 29: Fita finita em uma dimensão

4.1 Geometria de Fita com a Borda Reta para a Interação entre Primeiros Vizinhos

Na geometria de fita com a borda reta mostrada na Figura (29) os elétrons estão confinados dentro de uma tira entre as linhas $y = a$ e $y = Na$. A invariância translacional ao longo do eixo x é ainda mantida, permitindo, assim, a construção do estado de Bloch em $1D$ com o momento do cristal sendo k_x , onde k_x é medido em unidades de $1/a$ com a sendo o parâmetro da rede. Para introduzir os estados de borda vamos reescrever a nossa Hamiltoniana *tight-binding* com somente interações entre primeiros vizinhos em termos dos parâmetro de *hopping* entre as linhas vizinhas. Vamos inicialmente considerar a Hamiltoniana *tight-binding* no espaço das configurações. A Hamiltoniana a ser utilizada já foi calculada no Capítulo 3, veja

a equação (3.3), e é dada por,

$$H(k) = \epsilon_0^{(s)} \sum_i a_{i,s}^\dagger a_{i,s} - \frac{t_s}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) + \epsilon_0^{(p)} \sum_i a_{i,p}^\dagger a_{i,p} - \frac{t_p}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) + \sum_{i,j} (\exp(i\theta_{ij}) t_1 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.), \quad (4.1)$$

onde o somatório sobre i e j é executado sobre todos os sítios da rede. O termo $a_{i,\sigma}^\dagger(a_{i,\sigma})$ cria (aniquila) um elétron no sítio i do orbital σ , onde σ está representando o orbital s ou p . t_s e t_p são os termos de *hopping* para o mesmo orbital e possuem valores constantes. O termo $\exp(i\theta_{ij})t_1$ ($\exp(-i\theta_{ij})t_1^*$) depende da orientação da rede e θ_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede ($\theta_{ij} = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$).

Devido à periodicidade que a rede manifesta devemos pesquisar a dinâmica dos efeitos das interações no espaço dos momentos. Então a simetria translacional em uma direção, nos permite usar a transformada de Fourier nos operadores a_i^\dagger e a_i expresso nas coordenadas dos sítios da rede. Definimos os operadores $a_{k,n}^\dagger$ e $a_{k,n}$ em função do vetor de onda, através das definições abaixo,

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n}^\dagger \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}_i] \quad (4.2)$$

e

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i], \quad (4.3)$$

onde \vec{r}_i indica o vetor do sítio i , e N é o número dos sítios na rede e $n = 1, 2, 3, \dots, N_0$, sendo N_0 o número total de linhas atômicas na direção finita. Aplicando as transformações obtemos,

$$H(k) = \sum_{k_x,j} \left((\epsilon_0^{(s)} + 2t_s \cos(k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,s} + 2it_1 \sin(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,p} \right. \\ + t_s (a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+a,s} + a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-a,s} + it_1 (a_{k_x,j,s}^\dagger c_{k_x,j+a,p} - a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-a,p})) \\ (\epsilon_0^{(p)} + 2t_p \cos(k_x a)) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,p} - 2it_1^* \sin(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,s} \\ \left. + t_p (a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+a,p} + a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-a,p} + it_1^* (a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+a,s} - a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-a,s})) \right). \quad (4.4)$$

A Hamiltoniana *tight-binding* para um Isolante Topológico com interações entre primeiros vizinhos descrita acima pode ser escrita na forma matricial, ou seja,

$$H = \begin{pmatrix} Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & 0 & \cdots \\ \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & \cdots \\ 0 & \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & \cdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

onde

$$Z = \begin{pmatrix} \epsilon_0^{(s)} + 2t_s \cos(k_x a) & A \sin(k_x a) \\ A \sin(k_x a) & \epsilon_0^{(p)} + 2t_p \cos(k_x a) \end{pmatrix} \Gamma_1 = \begin{pmatrix} t_s & -A/2 \\ A/2 & t_p \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

$$\Gamma_1^\dagger = \begin{pmatrix} t_s & A/2 \\ -A/2 & t_p \end{pmatrix}.$$

Vamos agora mostrar a relação de dispersão para um isolante topológico para uma rede quadrada finita com $N = 30$ linhas atômicas. Em todos os nossos resultados mostrados aqui usamos $A = 1.0$ e $B = 1.0$. A Figura (30) mostra o espectro de energia (borda + *bulk*) para diferentes valores de Δ , observe que a localização dos modos de borda se movem da região central $\Delta < 4B$ para os limites da figura $\Delta > 4B$. Assim, a velocidade de grupo que se intercepta com o nível de Fermi inverte seu sinal, refletindo à mudança de sinal de σ_{xy}^s no *bulk*. Isto pode ser considerado como a expressão concreta da correspondência *bulk*/borda no presente caso.

Pela Tabela (1) do Capítulo (3), podemos encontrar os valores associados ao parâmetro Δ responsáveis pelos pontos onde ocorrem as transições de fase topológicas como podem ser vistos nas subfiguras (a, d e h) da Figura (30). Na subfigura (a) podemos observar o ponto Γ da zona de Brillouin, neste ponto o *gap* entre as bandas de condução e de valência se fecham, fazendo com que o material deixe de ser um isolante trivial passando a ser um Isolante Topológico. Na subfigura (d) podemos observar os pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin, nestes pontos ocorre o fechamento dos *gaps* entre as bandas de condução e de valência. Nesses pontos o material sofre uma transição de fase topológica invertendo o sinal do valor da condutividade Hall. Na subfigura (h) podemos observar o ponto M da zona de Brillouin, neste ponto o material deixa de ser um Isolante Topológico passando a ser um isolante trivial.

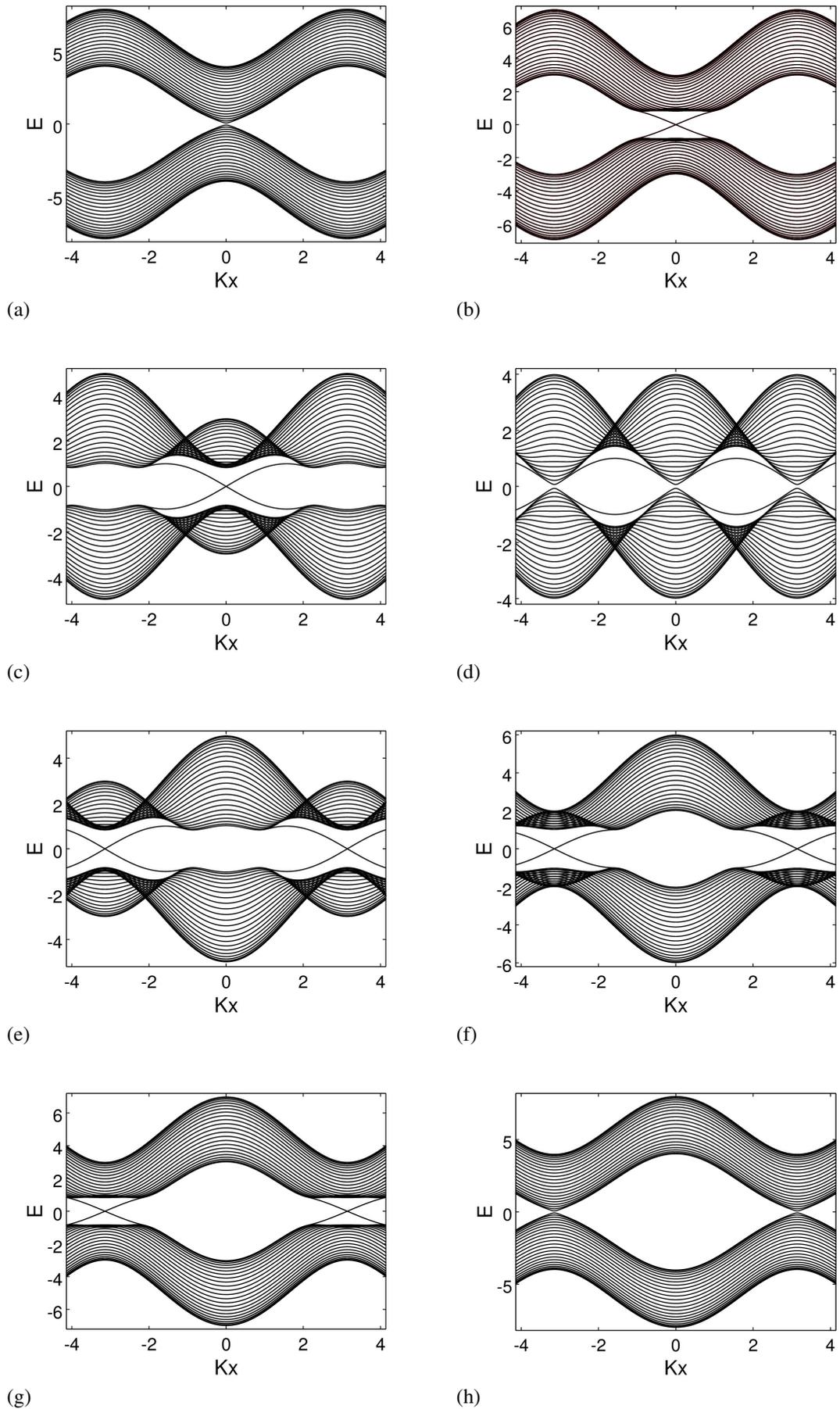


Figura 30: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $B = 1.0$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = 0.00$, (b) $\Delta = 1.00$, (c) $\Delta = 3.00$, (d) $\Delta = 4.00$, (e) $\Delta = 5.00$, (f) $\Delta = 6.00$, (g) $\Delta = 7.00$, (h) $\Delta = 8.00$.

4.2 Geometria de Fita com a Borda Reta Devido o Termo de Acoplamento entre Segundos Vizinhos

Vamos agora analisar a Hamiltoniana *tight-binding* para o caso de um fita finita com interações entre primeiros vizinhos e sobre o efeito da perturbação oriunda do termo de acoplamento devido as interações entre os segundos vizinhos. Para introduzir os estados de borda vamos reescrever a nossa Hamiltoniana *tight-binding* com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos em termos dos parâmetros de *hopping* entre as linhas vizinhas. Vamos inicialmente considerar a Hamiltoniana *tight-binding* no espaço das configurações, a Hamiltoniana a ser utilizada já foi calculada no Capítulo 3 e é dado pela equação (3.10),

$$\begin{aligned}
 H(k) = & \epsilon_0^{(s)} \sum_i a_{i,s}^\dagger a_{i,s} - \frac{t_s}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) + \epsilon_0^{(p)} \sum_i a_{i,p}^\dagger a_{i,p} - \frac{t_p}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) + \\
 & + \sum_{i,j} (\exp(i\theta_{ij}) t_1 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.) - \frac{t_s^{(2)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) - \frac{t_p^{(2)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
 & + \sum_{i,j} (\exp(i\theta'_{ij}) t_2 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.),
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

onde o somatório sobre i e j é executado sobre todos os sítios da rede, $a_{i,\sigma}^\dagger$ ($a_{i,\sigma}$) cria (aniquila) um elétron no sítio i do orbital σ , onde σ representa o orbital s ou p . t_s , t_p , $t_s^{(2)}$ e $t_p^{(2)}$ são os termos de *hopping* para o mesmo orbital e possuem valores constantes. Os termos $\exp(i\theta_{ij})t_1$ ($\exp(-i\theta_{ij})t_1^*$) e $\exp(i\theta_{ij})t_2$, ($\exp(-i\theta'_{ij})t_2^*$) dependem da orientação da rede, onde θ_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação às ligações entre primeiros vizinhos ($\theta_{ij} = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$). θ'_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre segundos vizinhos ($\theta'_{ij} = \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$). Devido a periodicidade da rede na direção x , vamos novamente pesquisar a dinâmica dos efeitos das interações no espaço dos momentos. Então a simetria translacional em uma direção, nos permite usar a transformada de Fourier nos operadores a_i^\dagger e a_i expresso nas coordenadas dos sítios da rede. Definimos os operadores $a_{k,n}^\dagger$ e $a_{k,n}$ em função do vetor de onda, através das definições abaixo,

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n}^\dagger \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}_i] \tag{4.8}$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i], \tag{4.9}$$

onde \vec{r}_i indica o vetor do sítio i , e N é o número dos sítios na rede e $n = 1, 2, 3, \dots, N_0$, seja N_0 o número total de linhas atômicas na direção finita. Aplicando as transformações obtemos,

$$\begin{aligned}
H(k) = \sum_{k_x, j} & \left(\epsilon_0^{(s)} a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j, s} + t_s^{(2)} (2 \cos(k_x a) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j+a, s} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j-a, s}) \right. \\
& 2t_s \cos(k_x a) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j, s} + 2it_1 \sin(k_x a) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j, p} \\
& + t_s (a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j+a, s} + a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j-a, s}) + it_1 (a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j+a, p} - a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j-a, p}) \\
& \frac{t_2}{\sqrt{2}} (2i \sin(k_x a) + 2i \cos(k_x a)) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j+a, p} + \frac{t_2}{\sqrt{2}} (2i \sin(k_x a) - 2i \cos(k_x a)) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j-a, p} \\
& \epsilon_0^{(p)} a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j, p} + t_p^{(2)} (2 \cos(k_x a) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j+a, p} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j-a, p}) \\
& + 2t_p \cos(k_x a) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j, p} - 2it_1^* \sin(k_x a) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j, s} \\
& + t_p (a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j+a, p} + a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j-a, p}) + it_1^* (a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j+a, s} - a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j-a, s}) \\
& \left. + \frac{t_2^*}{\sqrt{2}} (-2i \sin(k_x a) + 2i \cos(k_x a)) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j+a, s} + \frac{t_2^*}{\sqrt{2}} (-2i \sin(k_x a) - 2i \cos(k_x a)) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j-a, s} \right).
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Colocando a Hamiltoniana *tight-binding* para um Isolante Topológico com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, na forma matricial, logo temos;

$$\begin{pmatrix}
Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & 0 & \dots \\
\Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & \dots \\
0 & \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & \dots \\
& & \ddots & \ddots & \ddots
\end{pmatrix}, \tag{4.11}$$

onde

$$\begin{aligned}
Z &= \begin{pmatrix} \epsilon_0^{(s)} + 2t_s \cos(k_x a) & A \sin(k_x a) \\ A \sin(k_x a) & \epsilon_0^{(p)} + 2t_p \cos(k_x a) \end{pmatrix} \\
\Gamma_1 &= \begin{pmatrix} t_s + 2t_s^{(2)} \cos(k_x a) & -A/2 + A_2/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) \\ A/2 + A_2/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) & t_p + 2t_p^{(2)} \cos(k_x a) \end{pmatrix} \\
\Gamma_1^\dagger &= \begin{pmatrix} t_s + 2t_s^{(2)} \cos(k_x a) & A/2 + A_2/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) \\ -A/2 + A_2/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) & t_p + 2t_p^{(2)} \cos(k_x a) \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Vamos agora mostrar a relação de dispersão para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos e com um termo de acoplamento entre segundos vizinhos para uma rede quadrada finita com $N = 30$ linhas atômicas. Em todos os nossos resultados aqui vamos usar $A = 1$ e $B = 1$. As Figuras (31, 32 e 33) mostram o espectro de energia (borda + *bulk*) para diferentes valores de Δ , observe que a localização dos modos de borda se movem da região

central $\Delta < 4(B + B_2)$ para os limites da figura $\Delta > 4(B + B_2)$. Novamente observamos que, a velocidade do grupo que se intercepta com o nível de Fermi inverte seu sinal, refletindo a mudança de sinal de σ_{xy}^s no *bulk*. Isto pode ser considerado como a expressão concreta da correspondência *bulk*/borda para este caso.

Pela Tabela (2) do Capítulo (3), podemos encontrar os valores associados ao parâmetro Δ responsáveis pelos pontos onde ocorrem as transições de fase topológica como pode ser visto nas subfiguras (a, f e h) das Figuras (31, 32 e 33). Nas subfiguras (a) podemos observar o ponto Γ da zona de Brillouin, neste ponto o *gap* entre as bandas de condução e de valência se fecham, fazendo com que o material deixe de ser um isolante trivial passando a ser um Isolante Topológico. Nas subfiguras (d) podemos observar os pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin, nestes pontos ocorre o fechamento simultaneamente dos *gap* entre as bandas de condução e de valência, nesses pontos o material sofre uma transição de fase topológica invertendo o sinal do valor da condutividade Hall. Nas subfiguras (h) podemos observar o ponto M da zona de Brillouin, neste ponto o material deixa de ser um Isolante Topológico passando a ser um isolante trivial.

A Figuras (34) mostra como a interação do termo de acoplamento entre segundos vizinhos altera o espectro de bandas do *bulk*, podemos observar na subfiguras (a e c) à sobreposição dos espectros de bandas de energia no ponto Γ da zona de Brillouin, o espectro de banda da cor preta representa o descrição mais simples de um isolante topológico onde levamos em conta somente as interações entre primeiros vizinhos, o espectro de banda nas cores verde, roxa e azul claro representam o nosso modelo para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos sob o efeito do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, os valores dos parâmetros de *hopping* para as interações entre segundos vizinhos são; $B_2 = 0.2$, $A_2 = 0.2$, (estrutura de banda da cor verde) $B_2 = 0.3$, $A_2 = 0.3$, (estrutura de banda da cor roxa) $B_2 = 0.4$ e $A_2 = 0.2$ (estrutura de banda da cor azul claro). Os parâmetros A e B são mantidos constante e com respectivos valores iguais a 1.0. Notamos que, com o aumento da intensidade dos parâmetro relacionados com as interações entre segundos vizinhos, a relação de dispersão para um isolante topológico sofre uma gradual modificação, as quais trazem contribuições ao espectro que aumentam as energias para vetores de onda maiores. Nas subfiguras (b e d), podemos observar o efeito causado pela perturbação oriunda do termo de acoplamento entre segundos vizinhos durante a primeira fase topológica do material, nessa fase topológica o valor atribuído a condutividade Hall é positivo, essa fase se estende entre $-4B_2 < \Delta < 4(B + B_2)$. Como pode ser observado a perturbação associada as interações entre segundos vizinhos provoca o aumento do tamanho do *gap* direto no *bulk* do material

Na subfiguras (e), podemos observar à sobreposição dos espectros de bandas de energia nos pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin, neste pontos podemos perceber uma inversão

do efeito da perturbação causado pelas interações entre segundos vizinhos em relação ao descrito na primeira fase topológica. Nas subfiguras (f e h), podemos observar o efeito causado pela perturbação oriunda do termo de acoplamento entre segundos vizinhos durante a segunda fase topológica do material, nessa fase topológica o valor atribuído a condutividade Hall é negativo, essa fase se estende entre $4(B + B_2) < \Delta < 8B - 4B_2$. Como pode ser observado a perturbação associada as interações entre segundos vizinhos provoca uma diminuição do tamanho do *gap* direto no *bulk* do material

Portanto o efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos depende da fase topológica do material, para $-4B_2 < \Delta < 4(B + B_2)$ a perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz o aumento do tamanho do *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico, e para $4(B + B_2) < \Delta < 8B - 4B_2$ o efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz a diminuição do *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico.

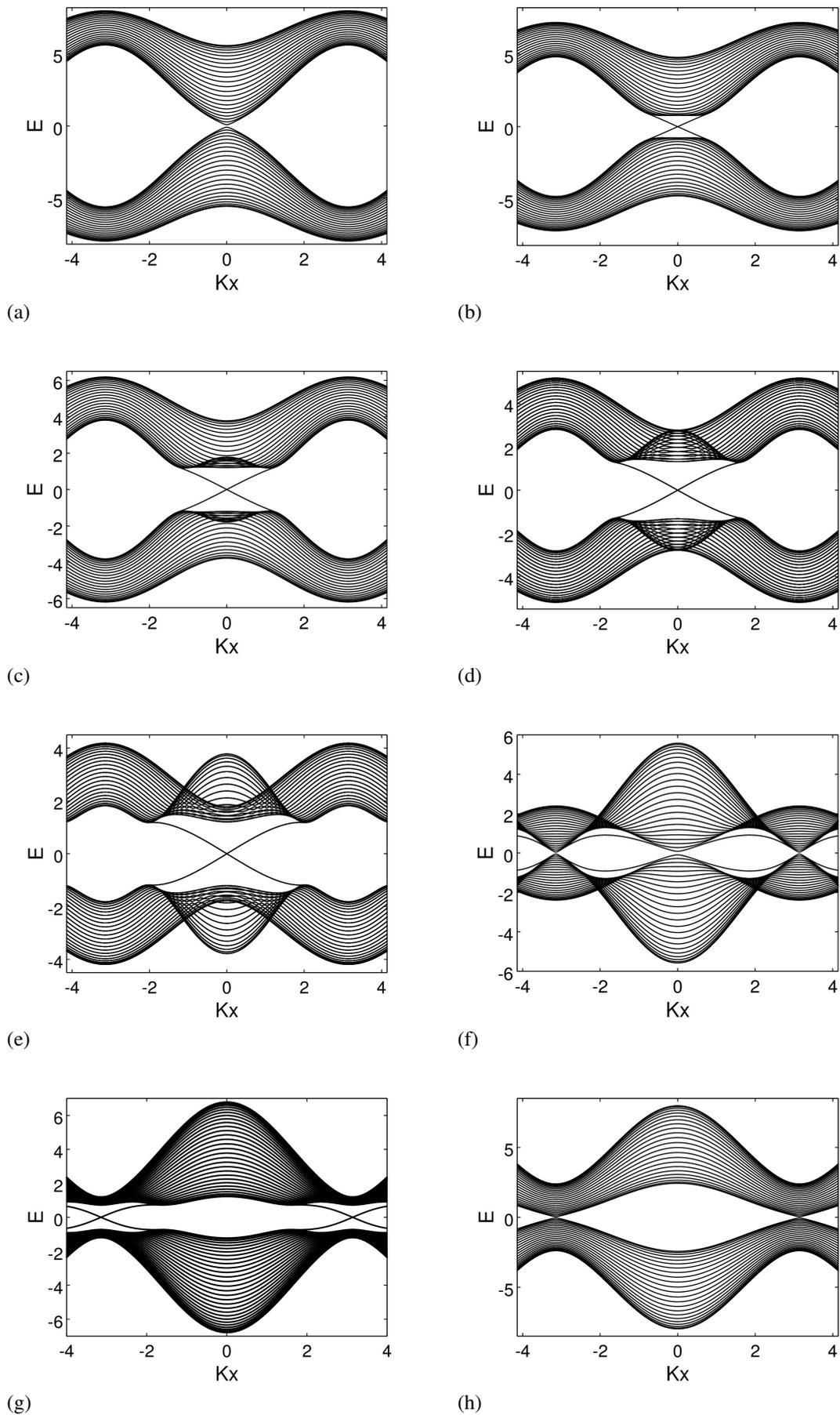


Figura 31: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.2$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.2$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.80$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.80$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.20$.

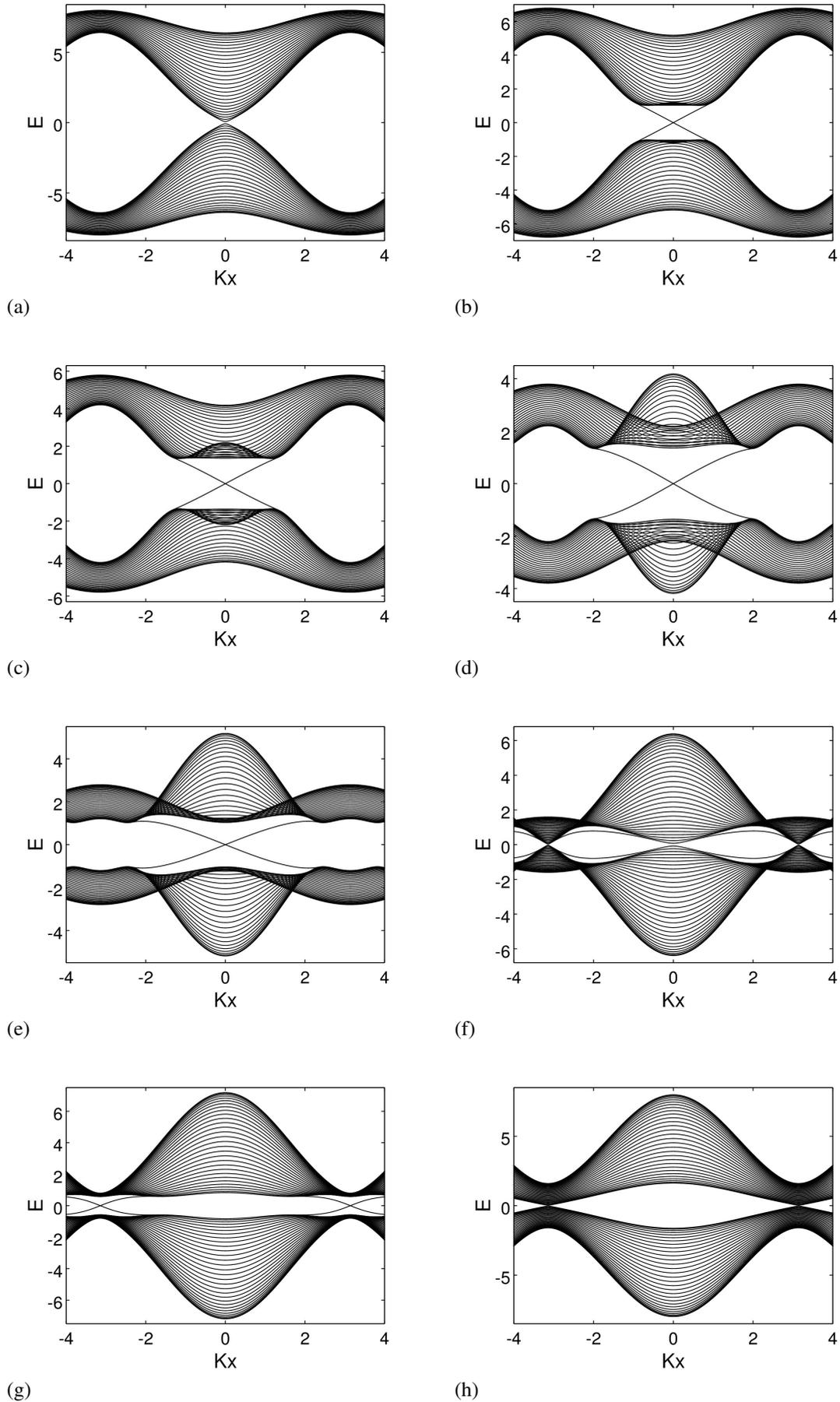


Figura 32: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.3$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.3$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.20$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 2.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 5.20$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.80$.

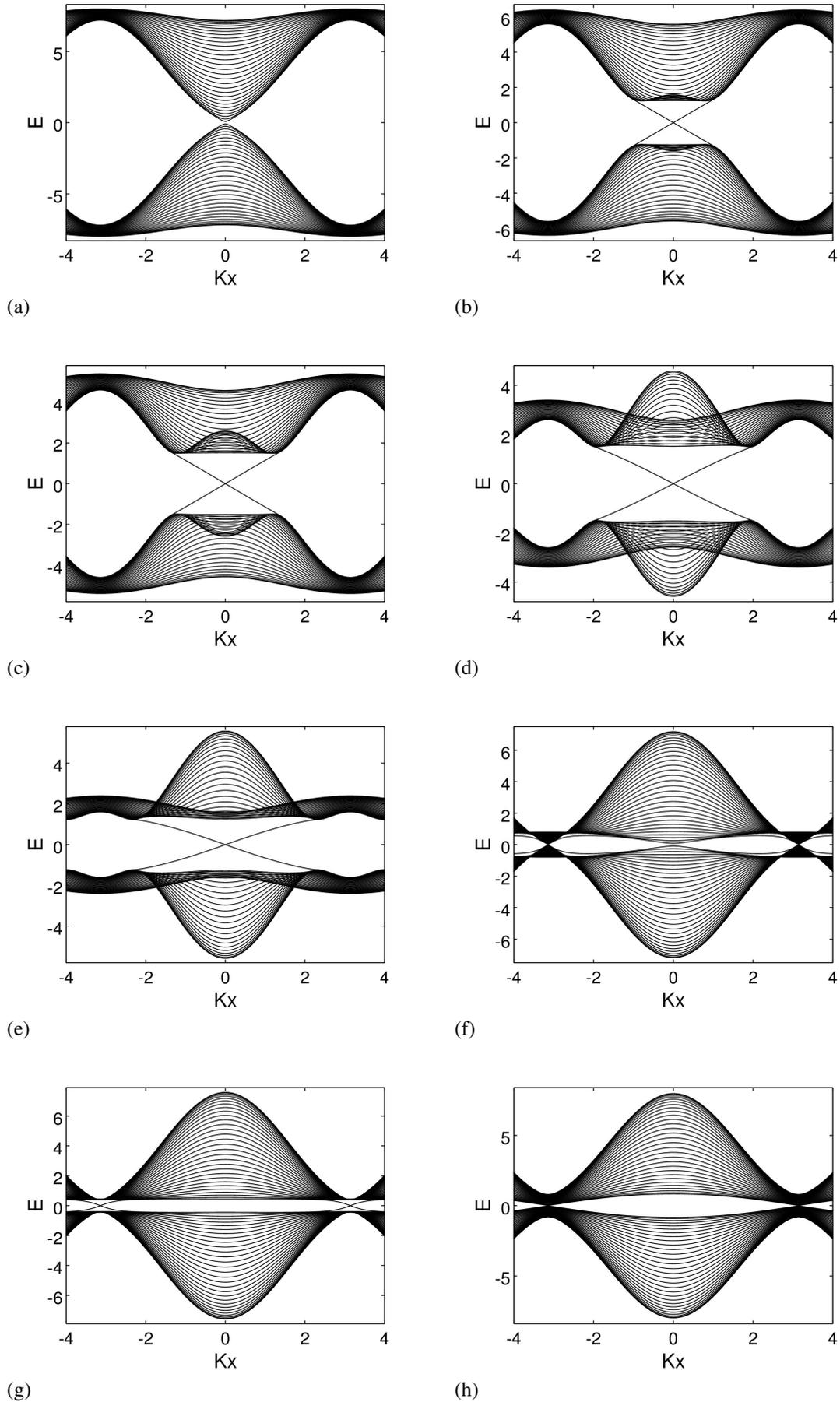


Figura 33: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.4$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.4$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.60$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 5.60$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.40$.

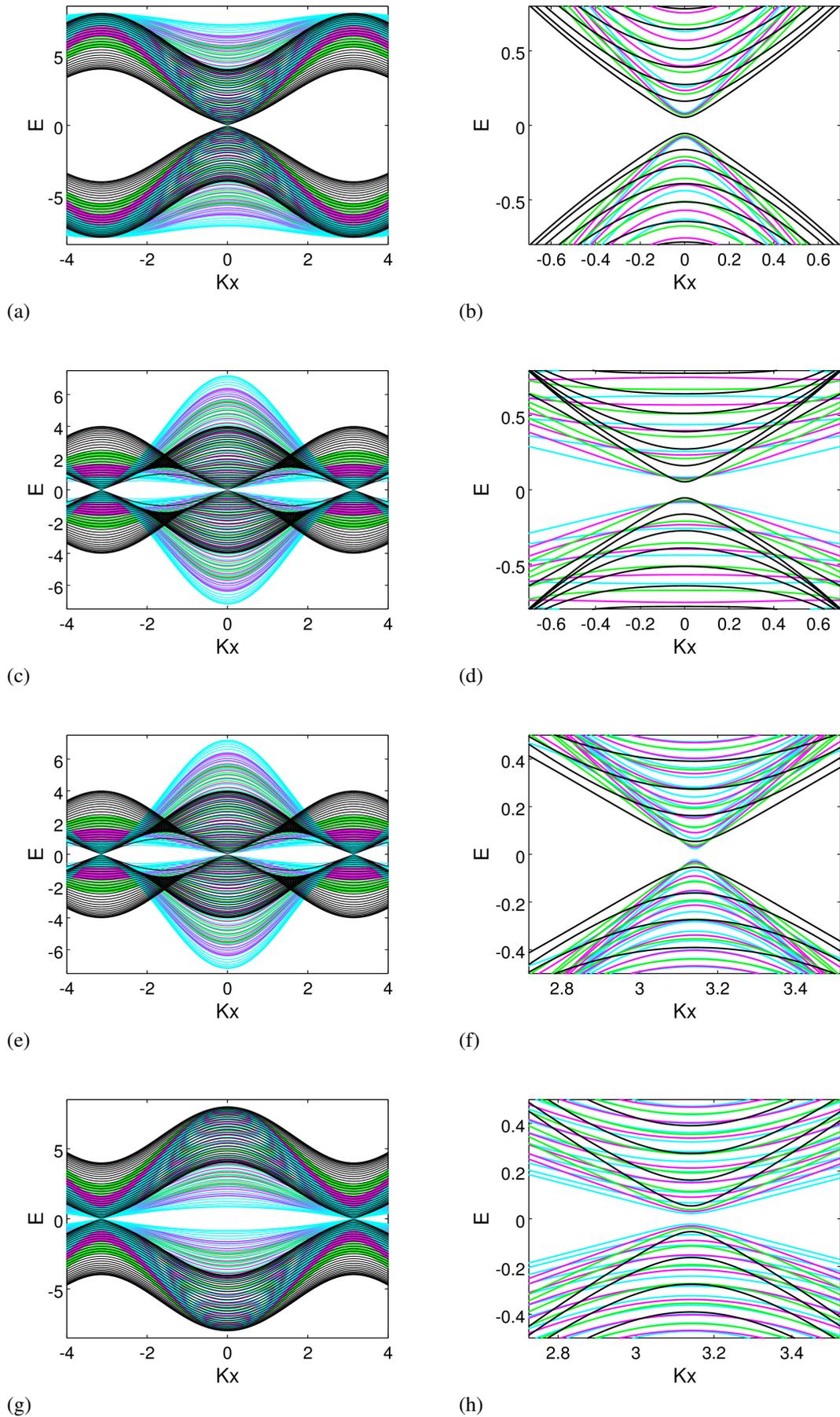


Figura 34: Sobreposições das relações de dispersão da energia nos pontos onde ocorrem as transições de fase.(a), (b), (c) e (d) transição de fase no ponto Γ , (e) e (f) transição de fase nos pontos X_1 e X_2 , (g) e (h) transição de fase no ponto M

4.3 Geometria de Fita com a Borda Reta Devido ao Termo de Acoplamento entre Segundos e Terceiros Vizinhos

Vamos agora analisar a Hamiltoniana *tight-binding* para o caso de um fita finita com interações entre primeiros vizinhos e sobre o efeito da perturbação oriunda do termo de acoplamento devido as interações entre os segundos e terceiros vizinhos. Novamente para introduzir os estados de borda vamos reescrever a nossa Hamiltoniana *tight-binding* com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiro vizinhos em termos dos parâmetros de *hopping* entre as linhas vizinhas. Vamos inicialmente considerar a Hamiltoniana *tight-binding* no espaço das configurações, a Hamiltoniana a ser utilizada já foi calculada no Capítulo 3 e é dado por,

$$\begin{aligned}
H(k) = & \epsilon_0^{(s)} \sum_i a_{i,s}^\dagger a_{i,s} - \frac{t_s}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) + \epsilon_0^{(p)} \sum_i a_{i,p}^\dagger a_{i,p} - \frac{t_p}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) + \\
& + \sum_{i,j} (\exp(i\theta_{ij}) t_1 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.) - \frac{t_s^{(2)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) - \frac{t_p^{(2)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
& + \sum_{i,j} (\exp(i\theta'_{ij}) t_2 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.) - \frac{t_s^{(3)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) - \frac{t_p^{(3)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
& + \sum_{i,j} (\exp(i\theta''_{ij}) t_3 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.),
\end{aligned} \tag{4.13}$$

onde o somatório sobre i e j é executado sobre todos os sítios da rede, $a_{i,\sigma}^\dagger (a_{i,\sigma})$ cria (aniquila) um elétron no sítio i do orbital σ , onde σ está representando o orbital s ou p . $t_s, t_p, t_s^{(2)}, t_p^{(2)}, t_s^{(3)}$ e $t_p^{(3)}$ são os termos de *hopping* para o mesmo orbital e possuem valores constantes. Os termos $\exp(i\theta_{ij})t_1, (\exp(-i\theta_{ij})t_1^*) \exp(i\theta'_{ij})t_2, (\exp(-i\theta'_{ij})t_2^*)$ e $\exp(i\theta''_{ij})t_3, (\exp(-i\theta''_{ij})t_3^*)$ dependem da orientação da rede. θ_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre primeiros vizinhos ($\theta_{ij} = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$). θ'_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre segundos vizinhos ($\theta'_{ij} = \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$). θ''_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre terceiros vizinhos ($\theta_{ij} = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$). Devido a periodicidade da rede na direção x vamos novamente pesquisar a dinâmica dos efeitos das interações no espaço dos momentos. Então a simetria translacional em uma direção, nos permite usar a transformada de Fourier nos operadores a_i^\dagger e a_i expresso nas coordenadas dos sítios da rede. Para definir os operadores $a_{k,n}^\dagger$ e $a_{k,n}$ em função do vetor de onda, através das definições abaixo,

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n}^\dagger \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}_i] \tag{4.14}$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i], \quad (4.15)$$

onde \vec{r}_i indica o vetor do sítio i , e N é o número dos sítios na rede e $n = 1, 2, 3, \dots, N_0$, sendo N_0 o número total de linhas atômicas na direção finita. Aplicando as transformações obtemos,

$$\begin{aligned} H(k) = \sum_{k_x,j} \left(t_s^\dagger a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,s} + t_s^s (2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,s} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,s}) \right. \\ + 2t_s^s \cos(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,s} + A \sin(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,p} \\ + 2t_3^s \cos(2k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,s} + A_3 \sin(2k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,p} \\ + t^s (a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,s} + a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,s}) + \frac{A}{2} (a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,p} - a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,p}) \\ + t_3^s (a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,s} + a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,s}) + \frac{A_3}{2} (a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+2,p} - a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-2,p}) \\ + A_2 (\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,p} + A_2 (\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,p} \\ + t^p a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,p} + t_2^p (2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,p} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,p}) \\ + 2t_2^p \cos(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,p} + A \sin(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,s} \\ + 2t_3^p \cos(2k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,p} + A_3 \sin(2k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,s} \\ + t^p (a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,p} + a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,p}) - \frac{A}{2} (a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,s} - a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,s}) \\ + t_3^p (a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,p} + a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,p}) - \frac{A_3}{2} (a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+2,s} - a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-2,s}) \\ \left. + A_2 (\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,s} + A_2 (\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,p} \right). \end{aligned} \quad (4.16)$$

Colocando a Hamiltoniana *tight-binding* para um Isolante Topológico com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, na forma matricial, logo temos;

$$H(k) = \begin{pmatrix} Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & 0 & \cdots \\ \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & \cdots \\ 0 & \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & \cdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

onde

$$\begin{aligned} Z = \begin{pmatrix} \epsilon_0^{(s)} + 2t_s \cos(k_x a) + 2t_s^{(3)} \cos(2k_x a) & A \sin(k_x a) + A_3 \sin(2k_x a) \\ A \sin(k_x a) + A_3 \sin(2k_x a) & \epsilon_0^{(p)} + 2t_p \cos(k_x a) + 2t_p^{(3)} \cos(2k_x a) \end{pmatrix} \\ \Gamma_1 = \begin{pmatrix} t_s + 2t_s^{(2)} \cos(k_x a) & -A/2 + A_2/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) \\ A/2 + A_2/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) & t_p + 2t_p^{(2)} \cos(k_x a) \\ t_s^{(3)} & -A_3/2 \\ A_3/2 & t_p^{(3)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\Gamma_1^\dagger = \begin{pmatrix} t_s + 2t_s^{(2)} \cos(k_x a) & A/2 + A_2/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) & t_s^{(3)} & A_3/2 \\ -A/2 + A_2/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) & t_p + 2t_p^{(2)} \cos(k_x a) & t_p^{(3)} & -A_3/2 \end{pmatrix}.$$

Vamos agora mostrar a relação de dispersão para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos e com um termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos para uma rede quadrada finita com $N = 30$ linhas atômicas. Em todos os nossos resultados aqui vamos usar $A = 1$ e $B = 1$. As Figuras (35, 36 e 37) mostram o espectro de energia (borda + *bulk*) para diferentes valores de Δ , observe que a localização dos modos de borda se movem da região central $\Delta < 4(B + B_2 - B_3)$ para os limites da figura $\Delta > 4(B + B_2 - B_3)$. Novamente observamos que, a velocidade de grupo que se intercepta com o nível de Fermi inverte seu sinal, refletindo a mudança de sinal de σ_{xy}^s no *bulk*. Isto pode ser considerado como a expressão concreta da correspondência *bulk*/borda para este caso.

Pela Tabela (3) do Capítulo (3), podemos encontrar os valores associados ao parâmetro Δ responsáveis pelos pontos onde ocorrem as transições de fase topológica como pode ser visto nas subfiguras (a, f e h) das Figuras (35, 36 e 37). Nas subfiguras (a) podemos observar o ponto Γ da zona de Brillouin, neste ponto o *gap* entre as bandas de condução e de valência se fecham, fazendo com que o material deixe de ser um isolante trivial passando a ser um Isolante Topológico. Nas subfiguras (d) podemos observar os pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin, nestes pontos ocorre o fechamento simultaneamente dos *gap* entre as bandas de condução e de valência, nesses pontos o material sofre uma transição de fase topológica invertendo o sinal do valor da condutividade Hall. Nas subfiguras (h) podemos observar o ponto M da zona de Brillouin, neste ponto o material deixa de ser um Isolante Topológico passando a ser um isolante trivial.

A Figura (38) mostra como a interação do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos altera o espectro de bandas do *bulk*, podemos observar nas subfiguras (a e c) a sobreposição dos espectros de bandas de energia no ponto Γ da zona de Brillouin, o espectro de banda da cor preta representa a descrição mais simples de um isolante topológico onde levamos em conta somente as interações entre primeiros vizinhos, o espectro de banda na cor vermelha representa o nosso modelo para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos sob o efeito do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, os valores dos parâmetros de *hopping* para as interações entre segundos vizinhos são; $B_2 = 0.2$, $A_2 = 0.2$, os espectros de bandas nas cores verde, roxa e azul claro representam o nosso modelo para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos sob o efeito do termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, os valores dos parâmetros de *hopping* para as interações entre segundos e terceiros vizinhos são; $B_2 = 0.2$, $A_2 = 0.2$, $B_3 = 0.04$ e $A_2 = 0.04$ (estrutura de banda da cor verde), $B_2 = 0.3$, $A_2 = 0.3$, $B_3 = 0.09$ e $A_2 = 0.09$ (estrutura de banda da cor roxa) e $B_2 = 0.4$, $A_2 = 0.2$,

$B_3 = 0.16$ e $A_2 = 0.16$ (estrutura de banda da cor azul claro). Os parâmetros A e B são mantidos constantes e com respectivos valores iguais a 1.0. Como na seção anterior para a variação dos parâmetros do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, notamos que, com o aumento da intensidade dos parâmetro relacionados com as interações entre terceiros, a relação de dispersão para um isolante topológico sofre uma gradual modificação, as quais trazem contribuições ao espectro que aumentam as energias para vetores de onda maiores. Nas subfiguras (b e d), podemos observar o efeito causado pela perturbação oriunda do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos durante a primeira fase topológica do material, nessa fase topológica o valor atribuído a condutividade Hall é positivo, essa fase se estende entre $-4(B_2 + B_3) < \Delta < 4(B + B_2 - B_3)$. Como pode ser observado desda seção anterior, o efeito da perturbação associada as interações entre segundos e terceiros vizinhos provoca o aumento do tamanho do *gap* direto no *bulk* do material. Na subfigura (e), podemos observar à sobreposição dos espectros de bandas de energia nos pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin, neste pontos podemos perceber uma inversão do efeito da perturbação causado pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos em relação ao descrito na primeira fase topológica. Nas subfiguras (f e h), podemos observar o efeito causado pela perturbação oriunda do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos durante a segunda fase topológica do material, nessa fase topológica o valor atribuído a condutividade Hall é negativo, essa fase se estende entre $4(B + B_2 - B_3) < \Delta < 8B - 4(B_2 + B_3)$. Como pode ser observado desda seção anterior, a perturbação associada as interações entre segundos e terceiros vizinhos provoca uma diminuição do tamanho do *gap* direto no *bulk* do material.

Portanto o efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico descrito em uma rede quadrada e com geometria de borda reta, depende da fase topológica do material, para $-4(B_2 + B_3) < \Delta < 4(B + B_2 - B_3)$ a perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz o aumento do tamanho *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico, e para $4(B + B_2 - B_3) < \Delta < 8B - 4(B_2 + B_3)$ o efeito perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz a diminuição do *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico.

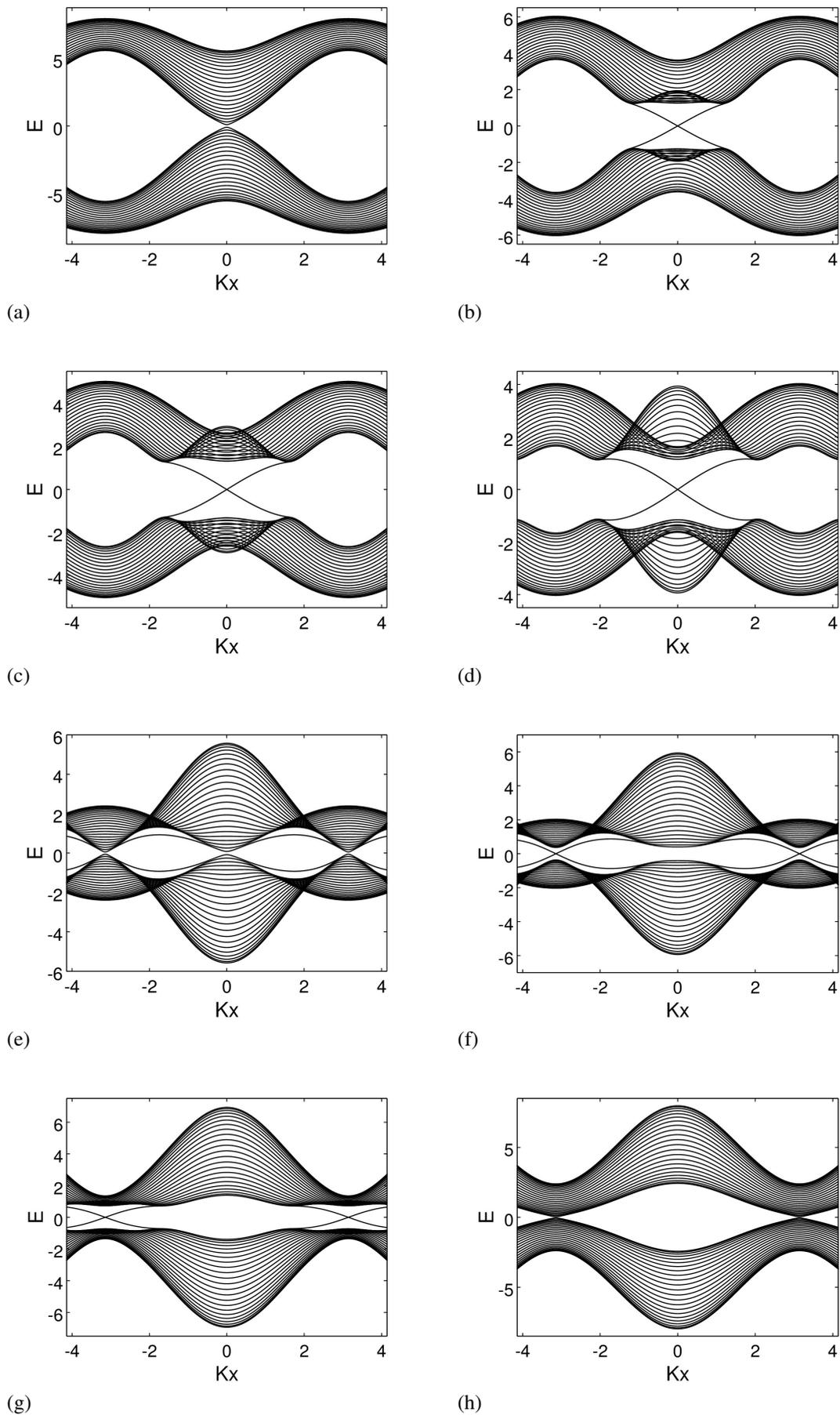


Figura 35: Relação de dispersão para $A = 1.00$, $A_2 = 0.20$, $A_3 = 0.04$, $B = 1.00$, $B_2 = 0.20$, $B_3 = 0.04$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.96$, (b) $\Delta = 1.00$, (c) $\Delta = 2.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.64$, (f) $\Delta = 5.00$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.04$.

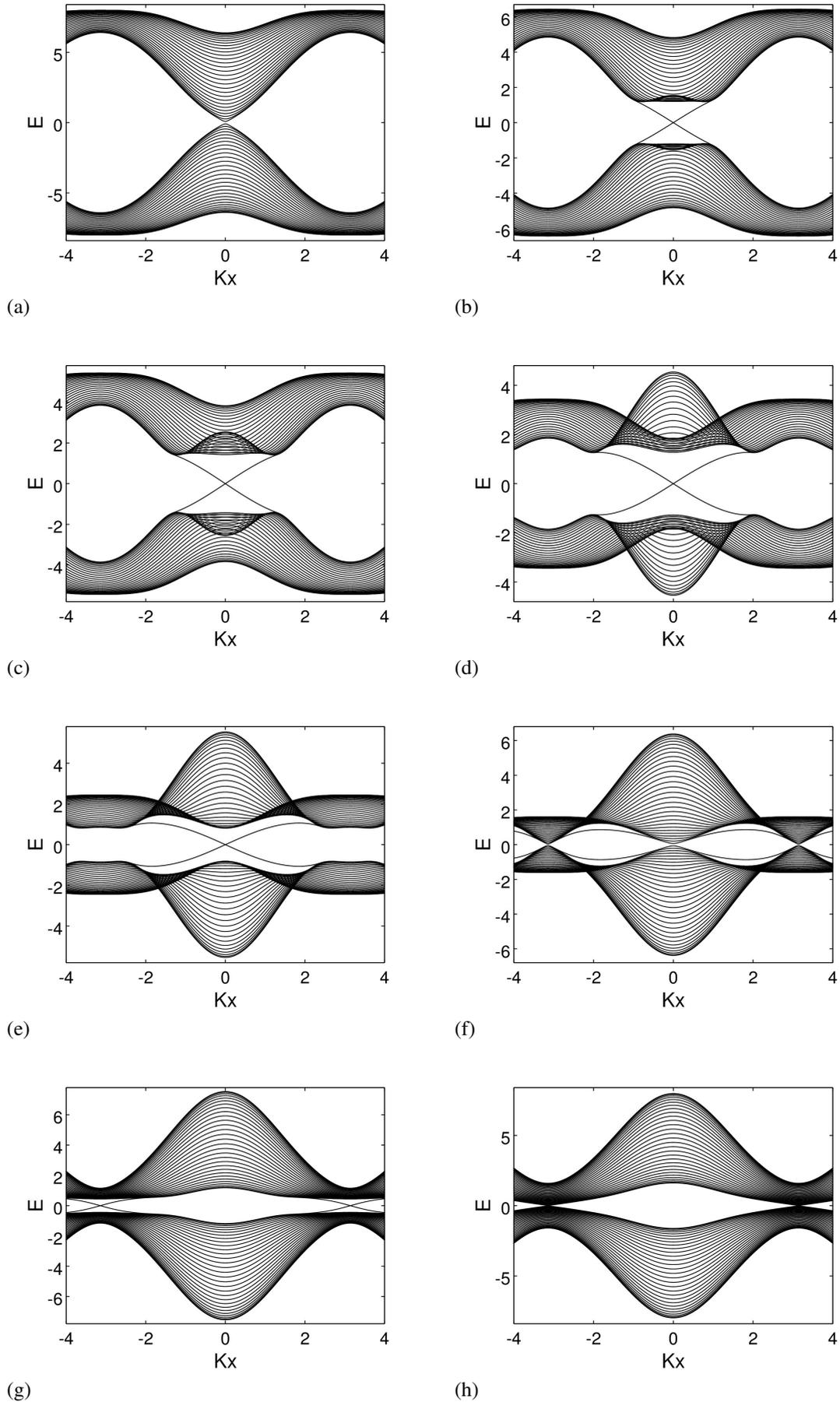


Figura 36: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.3$, $A_3 = 0.09$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.3$, $B_3 = 0.09$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.56$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 4.84$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.44$.

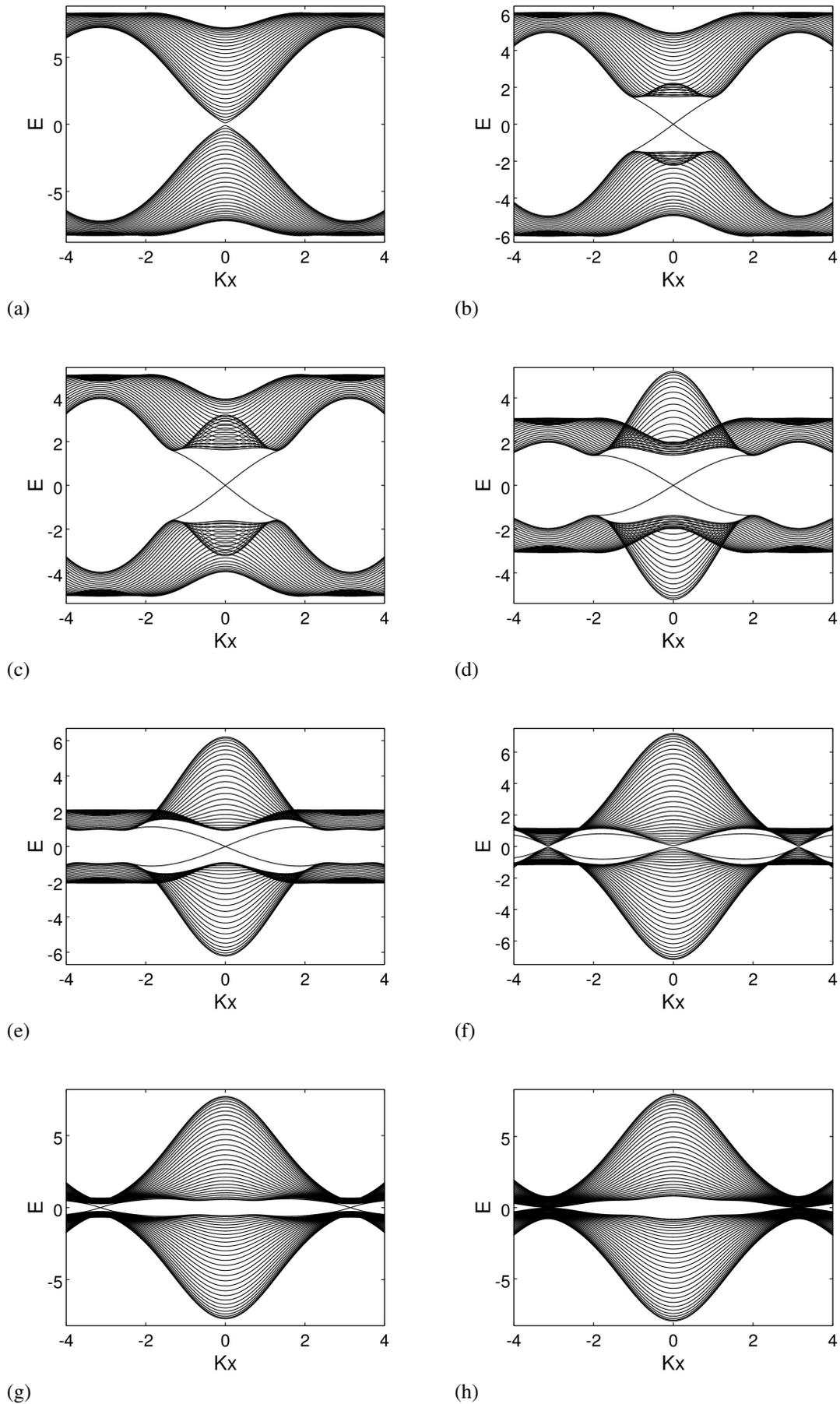


Figura 37: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.4$, $A_3 = 0.16$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.4$, $B_3 = 0.16$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -2.24$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 4.96$, (g) $\Delta = 5.50$, (h) $\Delta = 5.76$.

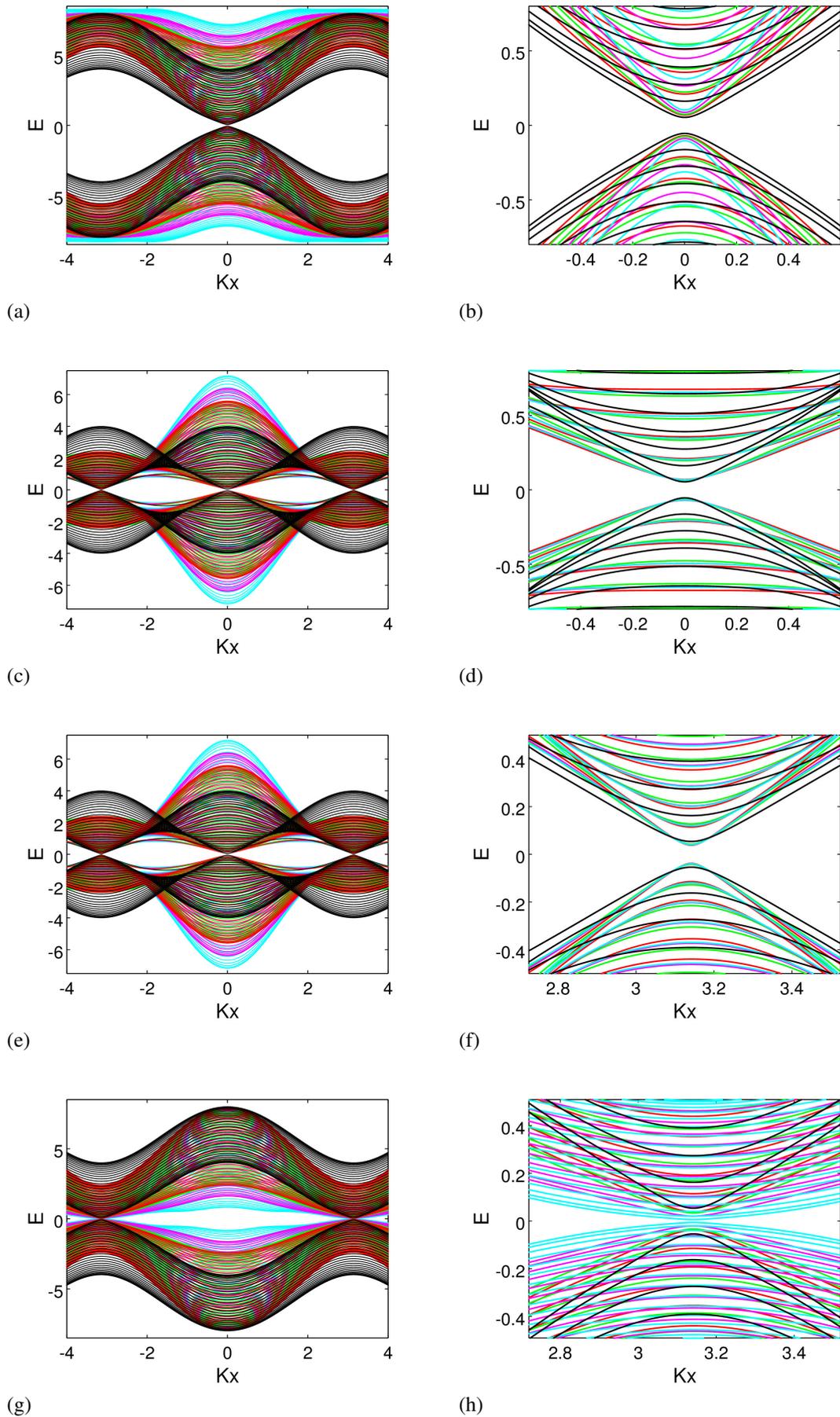


Figura 38: Sobreposições das relações de dispersão da energia nos pontos onde ocorrem as transições de fase. (a), (b), (c) e (d) transição de fase no ponto Γ , (e) e (f) transição de fase nos pontos X_1 e X_2 , (g) e (h) transição de fase no ponto M

4.4 Geometria de Borda em Zigzag

Vejamos agora o caso de uma geometria de borda diferente, essa geometria de borda será denominada zigzag, mostrada esquematicamente na Figura (39). A geometria de borda em zigzag considerada aqui, é em certo sentido análoga a geometria de borda de uma fita de grafeno, nomeada da mesma maneira, mas definida em uma rede hexagonal. Utilizando uma rede quadrada finita, vamos introduzir a borda em zigzag, normal à direção $(1, 1)$ ou $(1, -1)$ (Figura (39)). Os elétrons na geometria de borda em zigzag estão, confinados a uma tira diagonal em coordenadas cartesianas, ao longo da direção $(1, 1)$ como na Figura (39) [22].

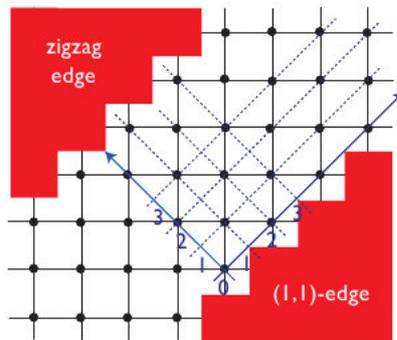


Figura 39: Geometria de borda em zigzag [22].

4.4.1 Geometria de Borda em Zigzag para Interação entre Primeiros Vizinhos

Vamos agora descrever uma Hamiltoniana *tight-binding* para o caso de um fita finita com borda em *zigzag*, com interações entre primeiros vizinhos. Para introduzir os estados de borda em *zigzag* vamos reescrever a nossa Hamiltoniana *tight-binding* com interações entre primeiros vizinhos em termos dos parâmetro de *hopping* entre as linhas vizinhas. Vamos inicialmente considerar a Hamiltoniana *tight-binding* no espaço das configurações, a Hamiltoniana a ser utilizada é obtida através das demonstrações feitas no Capítulo 3. Neste caso, também utilizamos a condição de contorno aberta na direção y . Assim temos,

$$\begin{aligned}
 H(k) = & \epsilon_0^{(s)} \sum_i a_{i,s}^\dagger a_{i,s} - \frac{t_s}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) + \epsilon_0^{(p)} \sum_i a_{i,p}^\dagger a_{i,p} - \frac{t_p}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
 & + \sum_{i,j} (\exp(i\theta'_{ij}) t_1 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.)
 \end{aligned}
 \tag{4.19}$$

onde o somatório sobre i e j é executado sobre todos os sítios da rede. O termo $a_{i,\sigma}^\dagger$ ($a_{i,\sigma}$) cria (aniquila) um elétron no sítio i do orbital σ , onde σ está representando o orbital s ou p . t_s e t_p são os termos de *hopping* para o mesmo orbital e possuem valores constantes. O

termo $\exp(i\theta'_{ij})t_1$, $(\exp(-i\theta'_{ij})t_1^*)$ depende da orientação da rede. θ'_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre segundos vizinhos ($\theta'_{ij} = \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$). Novamente estamos considerando a periodicidade da rede na direção x vamos novamente pesquisar a dinâmica dos efeitos das interações no espaço dos momentos. Então a simetria translacional em uma direção, nos permite usar a transformada de Fourier nos operadores a_i^\dagger e a_i expresso nas coordenadas dos sítios da rede. Para definir os operadores $a_{k,n}^\dagger$ e $a_{k,n}$ em função do vetor de onda, através das definições abaixo,

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n}^\dagger \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}_i] \quad (4.20)$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i], \quad (4.21)$$

onde \vec{r}_i indica o vetor do sítio i , e N é o número dos sítios na rede e $n = 1, 2, 3, \dots, N_0$, onde N_0 é o número total de linhas atômicas na direção finita. Aplicando as transformações obtemos a nossa Hamiltoniana *tight-binding* para o caso de um fita finita com borda em *zigzag* com interações entre primeiros vizinhos, ficando assim da seguinte forma,

$$\begin{aligned} H(k) = & \sum_{k_x,j} \left(\epsilon_0^{(s)} a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,s} + t_s (2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,s} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,s}) \right. \\ & + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,p} + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,p} \\ & + \epsilon_0^{(p)} a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,p} + t_p (2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,p} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,p}) \\ & \left. + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,s} + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,p} \right). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Novamente podemos reescrever a Hamiltoniana numa forma matricial. Dessa forma, temos

$$H = \begin{pmatrix} Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & 0 & \cdots \\ \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & \cdots \\ 0 & \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & \cdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

onde

$$Z = \begin{pmatrix} \epsilon_0^{(s)} & 0 \\ 0 & \epsilon_0^{(p)} \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} 2t_s \cos(k_x a) & A/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) \\ A/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) & 2t_p \cos(k_x a) \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_1^\dagger = \begin{pmatrix} 2t_s \cos(k_x a) & A/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) \\ A/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) & 2t_p \cos(k_x a) \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando a matriz (4.23) obtemos o espectro de energia da Hamiltoniana *tight*

binding, com interações entre primeiros vizinhos, inscrita numa fita com geometria de borda em *zigzag*. A Figura (40) mostra o espectro de energia (borda + *bulk*) para um isolante topológico para uma rede quadrada finita com geometria de borda em *zigzag* com $N = 30$ linhas atômicas e diferentes valores para o Δ . Os pontos relacionados às transições de fase topológica, com interações entre primeiros vizinhos, são os mesmos descritos na Tabela (1) do Capítulo (3). Em todos os nossos resultados aqui vamos usar $A = 1.0$ e $B = 1.0$.

Um par de modos de borda sem *gapless* sempre aparece em $0 < \Delta < 8B$. Em contraste com o caso da geometria de borda reta, os estados de borda da geometria de borda em *zigzag* sempre aparecem na vizinhança de $k_x = 0$, observando assim a existência de modos de borda localizados para os pontos associados com as transições de fase topológica. A subfigura (f) da Figura (40), mostra uma característica única dos modos de borda na geometria em *zigzag*, para $\Delta = 4B$, os modos de borda se tornam completamente planos, esse comportamento é também observado nos modos de borda do grafeno com geometria de borda em *zigzag* (mas em uma rede hexagonal)[24, 25]. No grafeno, tais modos de borda ligam a projeção $1D$ dos pontos K e K' através do limite da zona de Brillouin $1D$. Este é um comportamento semelhante ao caso presente, vide subfigura (f) da Figura (40). Uma das diferenças encontradas entre os dois casos é que aqui os modos de borda planos abrangem toda primeira zona Brillouin em $1D$.

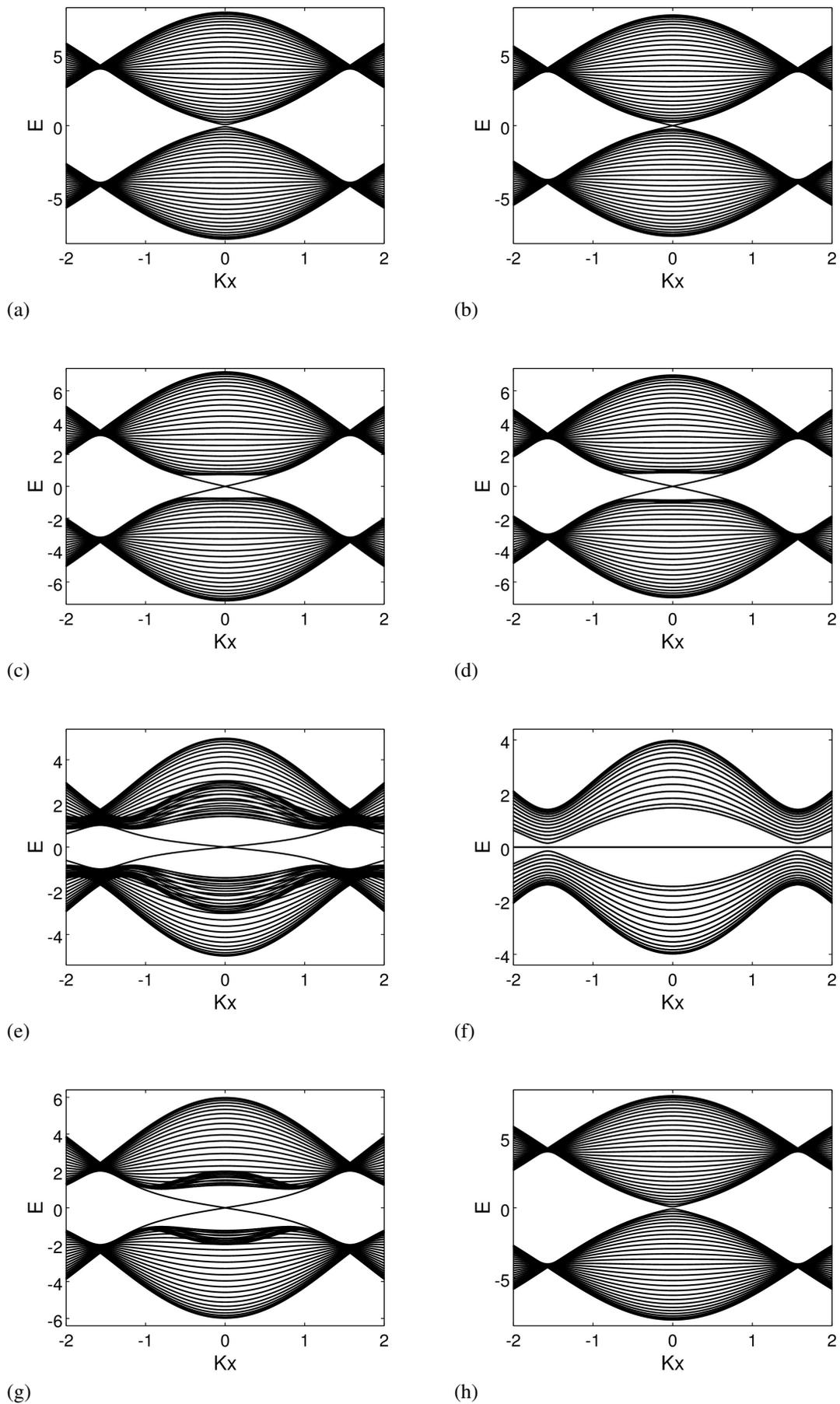


Figura 40: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $B = 1.0$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = 0.00$, (b) $\Delta = 0.20$, (c) $\Delta = 0.80$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 3.20$, (f) $\Delta = 4.00$, (g) $\Delta = 6.50$, (h) $\Delta = 8.00$.

4.4.2 Geometria de Borda em Zigzag com o Termo de Acoplamento entre Segundos Vizinhos

Vamos agora descrever uma Hamiltoniana *tight-binding* para o caso de uma fita finita com borda em *zigzag*, com interações entre primeiros vizinhos e sobre o efeito da perturbação oriunda do termo de acoplamento devido as interações entre os segundos vizinhos. Para introduzir os estados de borda em *zigzag* vamos reescrever a nossa Hamiltoniana *tight-binding* com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido às interações entre segundos vizinhos em termos dos parâmetro de *hopping* entre as linhas vizinhas. Vamos inicialmente considerar a Hamiltoniana *tight-binding* no espaço das configurações, a Hamiltoniana a ser utilizada é obtida através das demonstrações feitas no Capítulo 3. Neste caso, também é utilizado a condição de contorno aberta na direção y . Assim temos

$$\begin{aligned}
H(k) = & \epsilon_0^{(s)} \sum_i a_{i,s}^\dagger a_{i,s} - \frac{t_s}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) + \epsilon_0^{(p)} \sum_i a_{i,p}^\dagger a_{i,p} - \frac{t_p}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
& + \sum_{i,j} (\exp(i\theta'_{ij}) t_1 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.) - \frac{t_s^{(2)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) - \frac{t_p^{(2)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
& + \sum_{i,j} (\exp(i\theta_{ij}) t_2 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.),
\end{aligned} \tag{4.25}$$

onde o somatório sobre i e j é executado sobre todos os sítios da rede. O termo $a_{i,\sigma}^\dagger (a_{i,\sigma})$ cria (aniquila) um elétron no sítio i do orbital σ , onde σ está representando o orbital s ou p , t_s , t_p , $t_s^{(2)}$ e $t_p^{(2)}$ são os termos de *hopping* para o mesmo orbital e possuem valores constantes. Os termos $\exp(i\theta'_{ij})t_1$ ($\exp(-i\theta'_{ij'})t_1^*$) e $\exp(i\theta_{ij})t_2$, ($\exp(-i\theta_{ij})t_2^*$) dependem da orientação da rede. θ'_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre primeiros vizinhos ($\theta'_{ij} = \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$). θ_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre segundos vizinhos ($\theta_{ij} = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$). Devido à periodicidade da rede na direção x vamos novamente pesquisar a dinâmica dos efeitos das interações no espaço dos momentos. Então a simetria translacional em uma direção, nos permite usar a transformada de Fourier nos operadores a_i^\dagger e a_i expresso nas coordenadas dos sítios da rede. Para definir os operadores $a_{k,n}^\dagger$ e $a_{k,n}$ em função do vetor de onda, através das definições abaixo,

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n}^\dagger \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}_i] \tag{4.26}$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i], \tag{4.27}$$

onde \vec{r}_i indica o vetor do sítio i , e N é o número dos sítios na rede e $n = 1, 2, 3, \dots, N_0$, onde N_0 é o número total de linhas atômicas na direção finita. Aplicando as transformações obtemos a nossa Hamiltoniana *tight-binding* para o caso de um fita finita com borda em *zigzag* com interações entre primeiros vizinhos e sobre o efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos, ficando assim da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
H(k) = \sum_{k_x, j} & \left(\epsilon_0^{(s)} a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j, s} + t_s (2 \cos(k_x a) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j+1, s} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j-1, s}) \right. \\
& + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j+1, p} + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j-1, p} \\
& + \epsilon_0^{(p)} a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j, p} + t_p (2 \cos(k_x a) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j+1, p} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j-1, p}) \\
& + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j+1, s} + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j-1, s} \\
& + 2t_2^s \cos(2k_x a) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j, s} + A_2 \sin(2k_x a) a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j, p} \\
& + t_2^s (a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j+2, s} + a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j-2, s}) + \frac{A_2}{2} (a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j+2, p} - a_{k_x, j, s}^\dagger a_{k_x, j-2, p}) \\
& + 2t_2^p \cos(2k_x a) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j, p} + A_2 \sin(k_x a) a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j, s} \\
& \left. + t_2^p (a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j+2, p} + a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j-2, p}) - \frac{A_2}{2} (a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j+2, s} - a_{k_x, j, p}^\dagger a_{k_x, j-2, s}) \right)
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Novamente podemos reescrever a Hamiltoniana numa forma matricial. Dessa forma, temos

$$H = \begin{pmatrix} Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & 0 & \cdots \\ \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & \cdots \\ 0 & \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & \cdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \tag{4.29}$$

onde

$$Z = \begin{pmatrix} \epsilon_0^{(s)} + 2t_s^{(2)} \cos(2k_x a) & A_2 \sin(2k_x a) \\ A_2 \sin(2k_x a) & \epsilon_0^{(p)} + 2t_p^{(2)} \cos(2k_x a) \end{pmatrix} \tag{4.30}$$

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} 2t_s \cos(k_x a) & A/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) \\ A/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) & 2t_p \cos(k_x a) \\ t_2^{(s)} & -A_2/2 \\ A_2/2 & t_2^{(p)} \end{pmatrix}$$

$$\Gamma_1^\dagger = \begin{pmatrix} 2t_s \cos(k_x a) & A/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) & t_2^{(s)} & A_2/2 \\ A/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) & 2t_p \cos(k_x a) & -A_2/2 & t_2^{(p)} \end{pmatrix}.$$

Diagonalizando a matriz (4.29) obtemos o espectro de energia da Hamiltoniana *tight binding*, com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, inscrita numa fita com geometria de borda em *zigzag*. As Figuras (41, 42 e 43) mostra o espectro de energia (borda + *bulk*) para um isolante topológico para uma rede quadrada finita com geometria de borda em *zigzag* com $N = 30$ linhas atômicas para diferentes valores do parâmetro Δ . Os pontos relacionados as transições de fase topológica

desse modelo com interações entre primeiros vizinhos e sob efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos são os mesmos descritos na Tabela (2) do capítulo (3). Em todos os nossos resultados aqui vamos usar $A = 1.0$ e $B = 1.0$.

Como visto no caso anterior, para a relação de dispersão da energia com somente interação entre primeiros vizinhos, um par de modos de borda sem *gapless* sempre aparece em $-4B_2 < \Delta < 8B - 4B_2$. Os modos de borda da geometria de borda em *zigzag* sempre aparecerão na vizinhança de $k_x = 0$, observando assim a existência de modos de borda localizados para os pontos associados com as transições de fase topológica. As subfiguras (f) das Figuras (41, 42 e 43), mostram uma característica única dos modos de borda na geometria em *zigzag* para $\Delta = 4(B + B_2)$, como descrita no caso das interações envolvendo somente primeiros vizinhos, os modos de borda se tornam planos.

A Figuras (44) mostra como a interação do termo de acoplamento entre segundos vizinhos altera o espectro de bandas do *bulk* para uma geometria de borda em *zigzag*. Podemos observar na subfigura (a) e (b) a sobreposição dos espectros de bandas de energia no ponto Γ da zona de Brillouin, o espectro de banda da cor preta representa o descrição mais simples de um isolante topológico onde levamos em conta somente as interações entre primeiros vizinhos para uma fita com geometria de borda em *zigzag*, o espectro de banda nas cores verde, roxa e azul claro representam o modelo para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos sob o efeito do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos para uma fita com geometria de borda em *zigzag*, os valores dos parâmetros de *hopping* para as interações entre segundos vizinhos são; $B_2 = 0.2$, $A_2 = 0.2$, (estrutura de banda da cor verde) $B_2 = 0.3$, $A_2 = 0.3$, (estrutura de banda da cor roxa) $B_2 = 0.4$ e $A_2 = 0.4$ (estrutura de banda da cor azul claro). Os parâmetros A e B são mantidos constantes e com respectivos valores iguais a 1.0. Notamos que, com o aumento da intensidade dos parâmetro relacionados com as interações entre segundos, a relação de dispersão para um isolante topológico sofre uma gradual modificação, as quais trazem contribuições ao espectro que aumentam as energias para vetores de onda maiores. Na subfigura (b), podemos observar o efeito causado pela perturbação oriunda do termo de acoplamento entre segundos vizinhos para um Isolante Topológico que possui uma geometria de borda em *zigzag*, durante a primeira fase topológica do material, nessa fase topológica o valor atribuído a condutividade Hall é positivo, essa fase se estende entre $-4(B_2) < \Delta < 4(B + B_2)$. Como no caso com geometria de borda reta, podemos observar que o efeito da perturbação associada às interações entre segundos vizinhos para um Isolante Topológico com geometria de borda em *zigzag*, provoca o aumento do tamanho do *gap* direto no *bulk* do material.

Na subfigura (c), podemos observar a sobreposição dos espectros de bandas de energia no ponto M da zona de Brillouin, neste ponto podemos perceber uma inversão do efeito da

perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos em relação ao descrito na primeira fase topológica. Na subfigura (d), podemos observar o efeito causado pela perturbação oriunda do termo de acoplamento entre segundos vizinhos durante a segunda fase topológica do material, nessa fase topológica o valor atribuído a condutividade Hall é negativo, essa fase se estende entre $4(B + B_2) < \Delta < 8B - 4B_2$. Como no caso com geometria de borda reta, a perturbação associada às interações entre segundos vizinhos provoca uma diminuição do tamanho do *gap* direto no *bulk* do material.

O efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos para um Isolante Topológico descrito em uma rede quadrada e com geometria de borda em *zigzag*, é semelhante ao efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos para um Isolante Topológico descrito em uma rede quadrada e com geometria de borda reta, em ambos os casos o efeito causado pelas interações entre segundos vizinhos depende da fase topológica do material, para $-4B_2 < \Delta < 4(B + B_2)$ a perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz o aumento do tamanho do *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico, e para $4(B + B_2) < \Delta < 8B - 4B_2$ o efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz a diminuição do *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico.

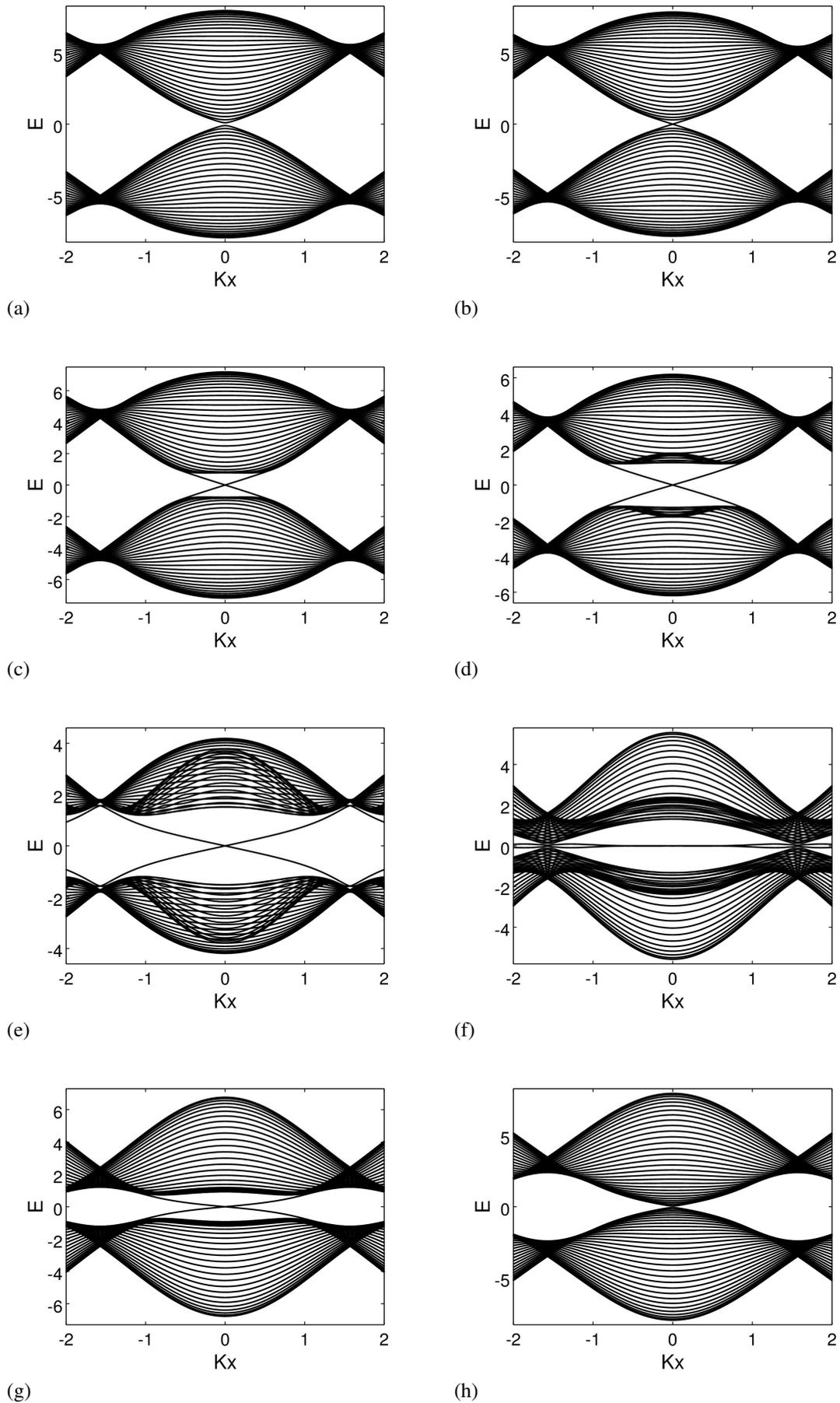


Figura 41: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.2$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.2$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.80$, (b) $\Delta = -0.60$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.80$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.20$.

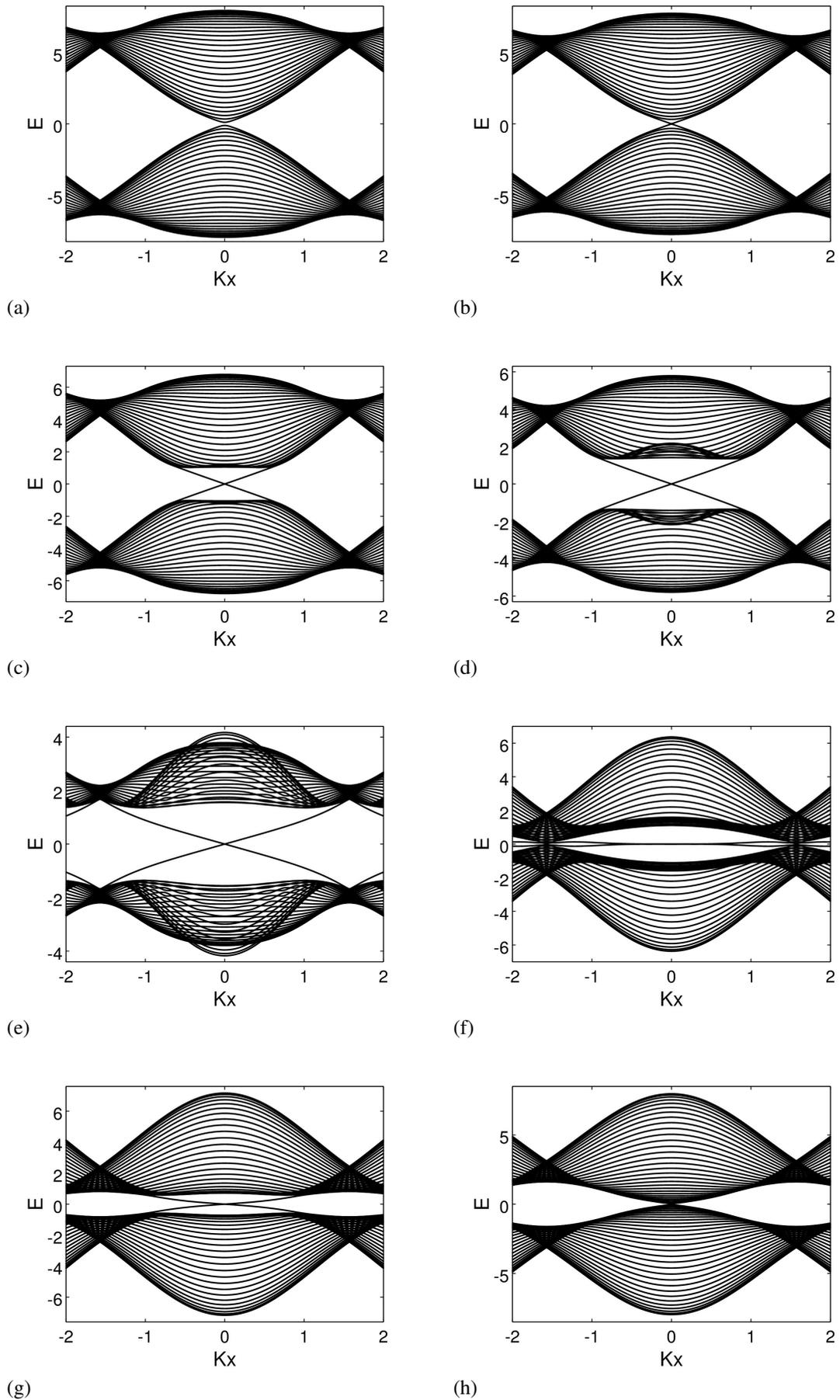


Figura 42: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.3$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.3$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.20$, (b) $\Delta = -1.00$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 5.20$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.80$.

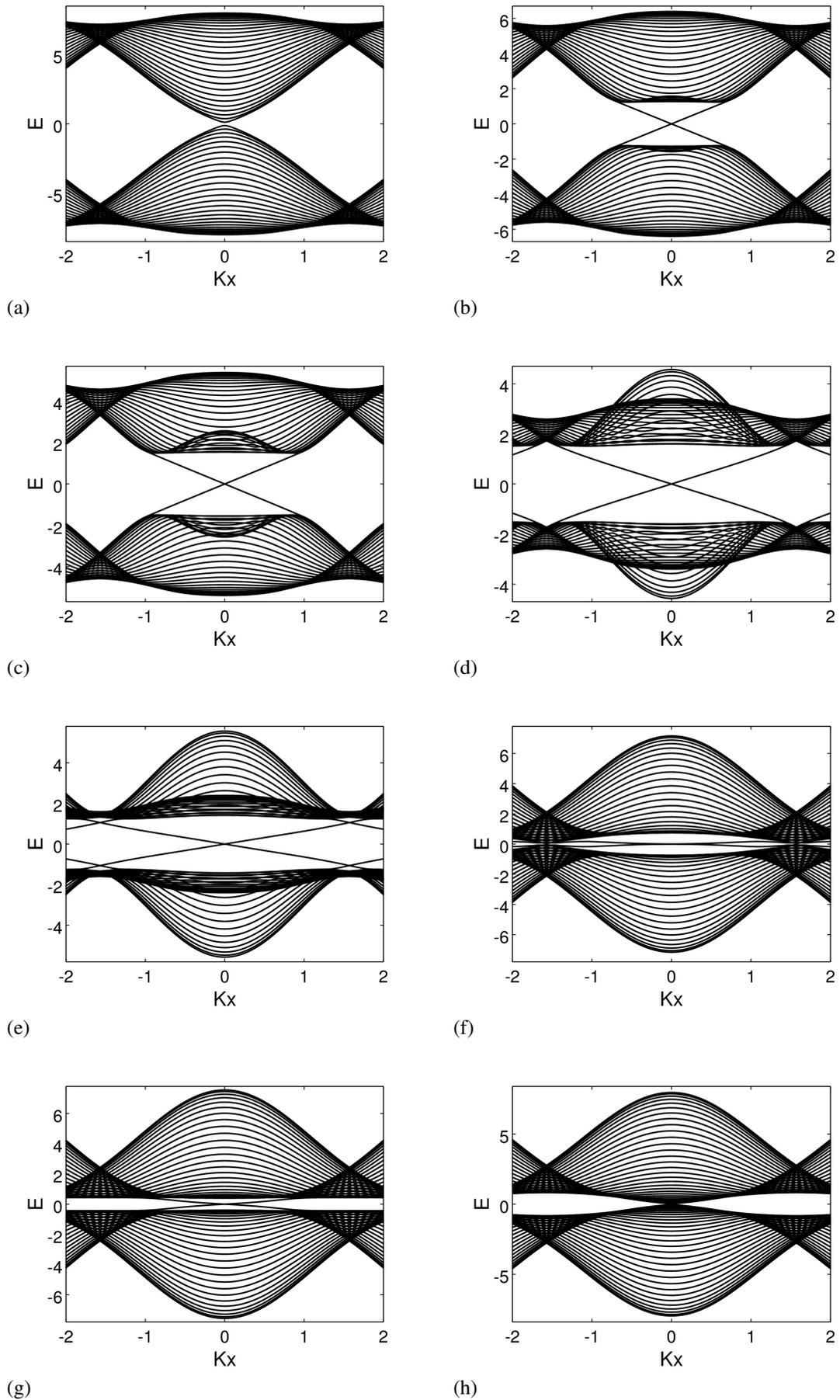


Figura 43: Relação de dispersão para $A = 1.0$, $A_2 = 0.40$, $B = 1.0$, $B_2 = 0.40$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.60$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 3.00$, (e) $\Delta = 4.00$, (f) $\Delta = 5.60$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.40$.

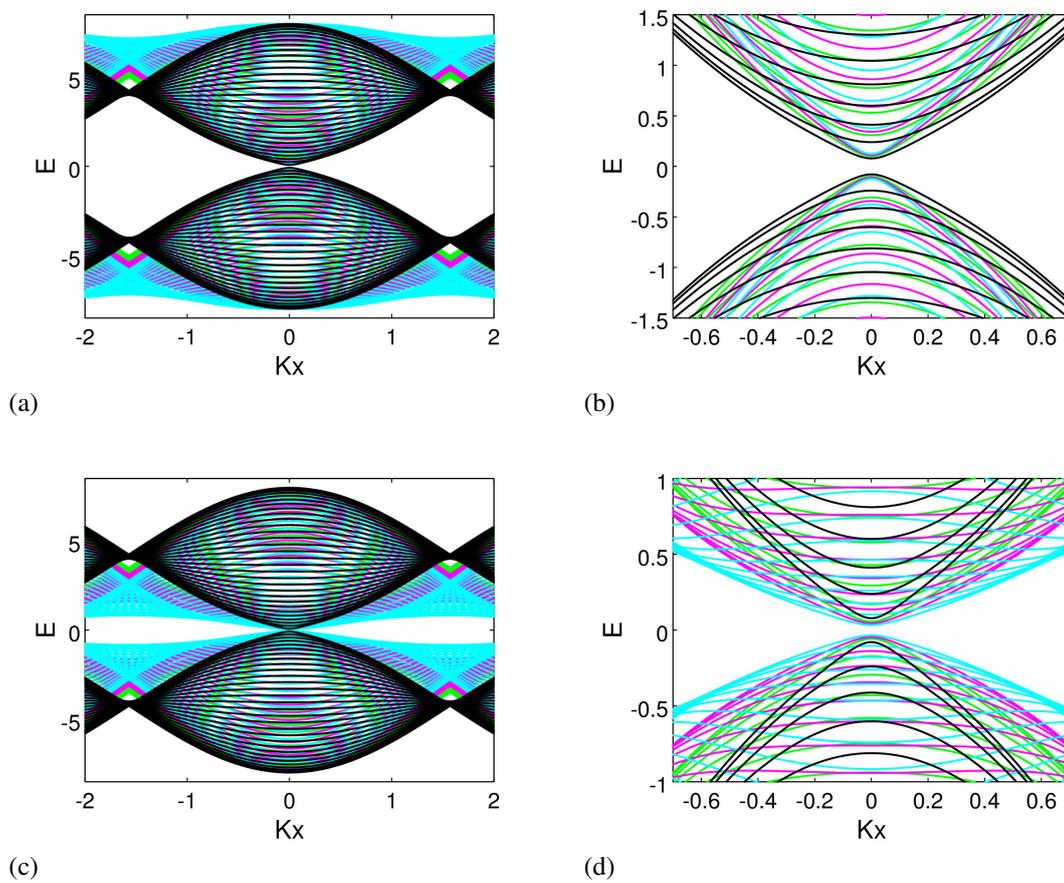


Figura 44: Sobreposições das relações de dispersão da energia nos pontos onde ocorrem as transições de fase. (a) e (b) transição de fase no Γ , (c) e (d) transição de fase no M

4.4.3 Geometria de Borda em Zigzag com o Termo de Acoplamento entre Segundos e Terceiros Vizinhos

Vamos agora descrever uma Hamiltoniana *tight-binding* para o caso de um fita finita com uma geometria de borda em *zigzag*, com interações entre primeiros vizinhos e sobre o efeito da perturbação oriunda do termo de acoplamento devido as interações entre os segundos e terceiros vizinhos. Para introduzir os estados de borda em *zigzag* vamos reescrever a nossa Hamiltoniana *tight-binding* com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido às interações entre segundos e terceiros vizinhos em termos dos parâmetro de *hopping* entre as linhas vizinhas. Vamos inicialmente considerar a Hamiltoniana *tight-binding* no espaço das configurações, a Hamiltoniana a ser utilizada é obtida através das demonstrações feitas no Capítulo 3. Neste caso, também é utilizado as condição de contorno aberta na direção y . Assim temos

$$\begin{aligned}
H(k) = & \epsilon_0^{(s)} \sum_i a_{i,s}^\dagger a_{i,s} - \frac{t_s}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) + \epsilon_0^{(p)} \sum_i a_{i,p}^\dagger a_{i,p} - \frac{t_p}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
& + \sum_{i,j} (\exp(i\theta'_{ij}) t_1 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.) - \frac{t_s^{(2)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) - \frac{t_p^{(2)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
& + \sum_{i,j} (\exp(i\theta_{ij}) t_2 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.) - \frac{t_s^{(3)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + H.c.) - \frac{t_p^{(3)}}{2} \sum_{i,j} (a_{i,p}^\dagger a_{j,p} + H.c.) \\
& + \sum_{i,j} (\exp(i\theta''_{ij}) t_3 a_{i,s}^\dagger a_{i,p} + H.c.),
\end{aligned} \tag{4.31}$$

onde o somatório sobre i e j é executado sobre todos os sítios da rede. O termo $a_{i,\sigma}^\dagger (a_{i,\sigma})$ cria (aniquila) um elétron no sítio i do orbital σ , onde σ está representando o orbital s ou p . $t_s, t_p, t_s^{(2)}, t_p^{(2)}, t_s^{(3)}$ e $t_p^{(3)}$ são os termos de *hopping* para o mesmo orbital e possuem valores constantes. Os termos $\exp(i\theta'_{ij})t_1$, $\exp(-i\theta'_{ij})t_1^*$, $\exp(i\theta_{ij})t_2$, $\exp(-i\theta_{ij})t_2^*$ e $\exp(i\theta''_{ij})t_3$, $\exp(-i\theta''_{ij})t_3^*$ dependem da orientação da rede. θ'_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre primeiros vizinhos ($\theta_{ij} = \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$). θ''_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre segundos vizinhos ($\theta'_{ij} = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$). θ''_{ij} é o ângulo do vetor de onda de propagação na rede em relação as interações entre terceiros vizinhos ($\theta''_{ij} = \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$). Devido à periodicidade da fita na direção x vamos novamente pesquisar a dinâmica dos efeitos das interações no espaço dos momentos. Então a simetria translacional em uma direção, nos permite usar a transformada de Fourier nos operadores a_i^\dagger e a_i expresso nas coordenadas dos sítios da rede. Para definir os

operadores $a_{k,n}^\dagger$ e $a_{k,n}$ em função do vetor de onda, através das definições abaixo,

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n}^\dagger \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}_i] \quad (4.32)$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k,n} a_{k,n} \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i], \quad (4.33)$$

onde \vec{r}_i indica o vetor do sítio i , e N é o número dos sítios na rede e $n = 1, 2, 3, \dots, N_0$, onde N_0 é o número total de linhas atômicas na direção finita. Aplicando as transformações obtemos a Hamiltoniana *tight-binding* para o caso de um fita finita com geometria de borda em *zigzag* com interações entre primeiros vizinhos e sobre o efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos, ficando assim da seguinte forma,

$$\begin{aligned} H(k) = & \sum_{k_x,j} \left(\epsilon_0^{(s)} a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,s} + t_s (2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,s} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,s}) \right. \\ & + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+1,p} + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-1,p} \\ & + \epsilon_0^{(p)} a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,p} + t_p (2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,p} + 2 \cos(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,p}) \\ & + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) - \cos(k_x a)) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+1,s} + \frac{A}{2} (\sin(k_x a) + \cos(k_x a)) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-1,s} \\ & + 2t_2^s \cos(2k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,s} + A_2 \sin(2k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j,p} \\ & + t_2^s (a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+2,s} + a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-2,s}) + \frac{A_2}{2} (a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+2,p} - a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-2,p}) \\ & + 2t_2^p \cos(2k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,p} + A_2 \sin(k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j,s} \\ & + t_2^p (a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+2,p} + a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-2,p}) - \frac{A_2}{2} (a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+2,s} - a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-2,s}) \\ & + t_3^s (2 \cos(2k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+2,s} + 2 \cos(2k_x a) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-2,s}) \\ & + \frac{A_3}{2} (\sin(2k_x a) + \cos(2k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j+2,p} + \frac{A_3}{2} (\sin(2k_x a) - \cos(2k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-2,p} \\ & + t_3^p (2 \cos(2k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j+2a,p} + 2 \cos(2k_x a) a_{k_x,j,p}^\dagger a_{k_x,j-2,p}) \\ & \left. + \frac{A_3}{2} (\sin(2k_x a) - \cos(2k_x a)) a_{2k_x,j,p}^\dagger a_{2k_x,j+2,s} + \frac{A_3}{2} (\sin(2k_x a) + \cos(2k_x a)) a_{k_x,j,s}^\dagger a_{k_x,j-2,p} \right) \end{aligned} \quad (4.34)$$

Novamente podemos reescrever a Hamiltoniana numa forma matricial. Dessa forma, temos

$$H = \begin{pmatrix} Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & 0 & \cdots \\ \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & 0 & \cdots \\ 0 & \Gamma_1 & Z & \Gamma_1^\dagger & \cdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

onde

$$Z = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

os elementos da matriz Z são: $A_{11} = \epsilon_s^{(0)} + 2t_s^{(2)} \cos(2k_x a)$, $A_{12} = A_2 \sin(2k_x a)$, $A_{21} = A_2 \sin(2k_x a)$ e $A_{22} = \epsilon_p^{(0)} + 2t_p^{(2)} \cos(2k_x a)$

$$\Gamma_1 = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \\ B_{31} & B_{32} \\ B_{41} & B_{42} \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

os elementos da matriz Γ_1 são: $B_{11} = 2t_s \cos(k_x a)$, $B_{12} = A_2/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a))$, $B_{21} = A/2(\sin(k_x a) + \cos(k_x a))$, $B_{22} = 2t_p \cos(k_x a)$, $B_{31} = t_s^{(2)} + 2t_s^{(3)} \cos(2k_x a)$, $B_{32} = -A_2/2 + A_3/2(\sin(2k_x a) - \cos(2k_x a))$, $B_{41} = A_2/2 + 2A_3/2(\sin(2k_x a) + \cos(2k_x a))$, $B_{42} = t_p^{(2)} + 2t_p^{(3)} \cos(2k_x a)$,

$$\Gamma_1^\dagger = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

os elementos da matriz Γ_1^\dagger são: $C_{11} = 2t_s \cos(k_x a)$ e $C_{12} = A/2(\sin(2k_x a) + \cos(2k_x a))$, $C_{21} = A/2(\sin(k_x a) - \cos(k_x a))$, $C_{22} = 2t_p \cos(k_x a)$, $C_{13} = t_s^{(2)} + 2t_s^{(3)} \cos(2k_x a)$, $C_{14} = A_2/2 + A_3/2(\sin(2k_x a) + \cos(2k_x a))$, $C_{23} = -A_2/2 + A_3/2(\sin(2k_x a) - \cos(2k_x a))$ e $C_{24} = t_p^{(2)} + 2t_p^{(3)} \cos(2k_x a)$

Diagonalizando a matriz (4.35) obtemos o espectro de energia da Hamiltoniana *tight binding*, com interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido às interações entre segundos e terceiros vizinhos, inscrita numa fita com geometria de borda em *zigzag*. As Figuras (45, 46 e 47) mostram o espectro de energia (borda + *bulk*) para um isolante topológico para uma rede quadrada finita com geometria de borda em *zigzag* com $N = 30$ linhas atômicas para diferentes valores do parâmetro Δ . Os pontos relacionados as transições de fase topológica desse modelo com interações entre primeiros vizinhos e sob efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos são os mesmos descritos na Tabela (3) do capítulo (3). Em todos os nossos resultados aqui vamos usar $A = 1.0$ e $B = 1.0$.

Como visto nos dois último casos com geometria de borda em *zigzag*, um par de modos de borda sem *gapless* sempre aparece em $-4(B_2 + B_3) < \Delta < 8B - 4(B_2 + B_3)$. Os modos de borda da geometria de borda em *zigzag*, sempre aparecem na vizinhança de $k_x = 0$, observando assim a existência de modos de borda localizados para os pontos associados com as transições de fase topológica. As subfiguras (f) das Figuras (45, 46 e 47), mostram uma característica única dos modos de borda na geometria em *zigzag* para $\Delta = 4(B + B_2 - B_3)$, como descrita nos dois últimos casos, os modos de borda se tornam planos.

A Figuras (48) mostra como a interação do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos altera o espectro de bandas do *bulk* para uma geometria de borda em *zigzag*. Podemos observar nas subfiguras (a) e (b) a sobreposição dos espectros de bandas de energia

no ponto Γ da zona de Brillouin. O espectro de banda da cor preta representa a descrição mais simples de um isolante topológico onde levamos em conta somente as interações entre primeiros vizinhos para uma fita com geometria de borda em *zigzag*, o espectro de banda na cor vermelha representa o modelo para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos sob o efeito do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, os valores dos parâmetros de *hopping* para as interações entre segundos vizinhos são; $B_2 = 0.2$, $A_2 = 0.2$, os espectros de bandas nas cores verde, roxa e azul claro representam o nosso modelo para um isolante topológico com interações entre primeiros vizinhos sob o efeito do termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, os valores dos parâmetros de *hopping* para as interações entre segundos e terceiros vizinhos são; $B_2 = 0.2$, $A_2 = 0.2$, $B_3 = 0.04$ e $A_2 = 0.04$ (estrutura de banda da cor verde), $B_2 = 0.3$, $A_2 = 0.3$, $B_3 = 0.09$ e $A_2 = 0.09$ (estrutura de banda da cor roxa) e $B_2 = 0.4$, $A_2 = 0.2$, $B_3 = 0.16$ e $A_2 = 0.16$ (estrutura de banda da cor azul claro). Os parâmetros A e B são mantidos constantes e com respectivos valores iguais a 1.0. Como na seção anterior que analisou a variação dos parâmetros do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, notamos que, com o aumento da intensidade dos parâmetro relacionados com as interações entre terceiros vizinhos, a relação de dispersão para um isolante topológico sofre uma gradual modificação, as quais trouxe contribuições ao espectro, como o aumento das energias para vetores de onda maiores, Na subfigura (b), podemos observar o efeito causado pela perturbação oriunda do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico que possui uma geometria de borda em *zigzag*, durante a primeira fase topológica do material, nessa fase topológica o valor atribuído a condutividade Hall é positivo, essa fase se estende entre $-4(B_2 + B_3) < \Delta < 4(B + B_2 - B_3)$. Como no caso com geometria de borda reta, podemos observar que o efeito da perturbação associada às interações entre segundos e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico com geometria de borda em *zigzag*, provoca o aumento do tamanho do *gap* direto no *bulk* do material.

Na subfigura (c), podemos observar a sobreposição dos espectros de bandas de energia no ponto M da zona de Brillouin, neste ponto podemos perceber uma inversão do efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos em relação ao descrito na primeira fase topológica. Na subfigura (d), podemos observar o efeito causado pela perturbação oriunda do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos durante a segunda fase topológica do material, nessa fase topológica o valor atribuído a condutividade Hall é negativo, essa fase se estende entre $4(B + B_2 - B_3) < \Delta < 8B - 4(B_2 + B_3)$. Como no caso com geometria de borda reta, a perturbação associada às interações entre segundos e terceiros vizinhos provoca uma diminuição do tamanho do *gap* direto no *bulk* do material.

O efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos

para um Isolante Topológico descrito em uma rede quadrada e com geometria de borda em *zigzag*, é semelhante ao efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico descrito em uma rede quadrada e com geometria de borda reta, em ambos os casos o efeito causado pelas interações entre segundos vizinhos depende da fase topológica do material, para $-4(B_2 - B_3) < \Delta < 4(B + B_2 - B_3)$ a perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz o aumento do tamanho do *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico, e para $4(B + B_2 - B_3) < \Delta < 8B - 4(B_2 + B_3)$ o efeito da perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz a diminuição do *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico.

Nós temos estudado o comportamentos dos estados de borda para um isolante topológica Z_2 sob o efeito da perturbação causada pelo termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos. Verificou-se que para os casos com geometria de borda reta a localização dos modos de borda, é modificada desde do ponto Γ localizado na zona central das estruturas de bandas em $k_x = 0$, até os pontos localizados na zona periférica das estruturas de bandas X_1 em $k_x = \pi$ e X_2 em $k_x = -\pi$. O aumento cadenciado da força dos parâmetros de interação entre segundos e terceiros vizinhos produzem uma mudança nos níveis de energia. Como discutimos anteriormente, nas proximidades do ponto Γ da zona de Brillouin é observado um *shifts* nas energias da relação de dispersão para um isolante topológico com somente interações entre primeiros vizinhos, isto é devido a perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros, aumentando assim o tamanho do *gap* no *bulk*, nas proximidades dos pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin o efeito causada pela perturbação, faz com que o tamanho do *gap* no *bulk* diminua.

Para os casos com geometria de borda em *zigzag*, observamos que um par de modos de borda sem *gapless* sempre aparece na região topologicamente não trivial. Em contraste com o caso da geometria de borda reta, os estados de borda com geometria em *zigzag* sempre aparecem na vizinhança de $k_x = 0$. O aumento cadenciado dos parâmetros de *hopping* relacionados com as interações entre segundos e terceiros vizinhos, produzem uma mudança nos níveis de energia. Como discutimos anteriormente, nas proximidades do ponto Γ da zona de Brillouin é observado um *shifts* nas energias da relação de dispersão para um isolante topológico com somente interações entre primeiros vizinhos, isto é devido a perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros, aumentando assim o tamanho do *gap* no *bulk*, nas proximidades do ponto M da zona de Brillouin, o efeito causada pela perturbação, faz com que o tamanho do *gap* no *bulk* diminua.

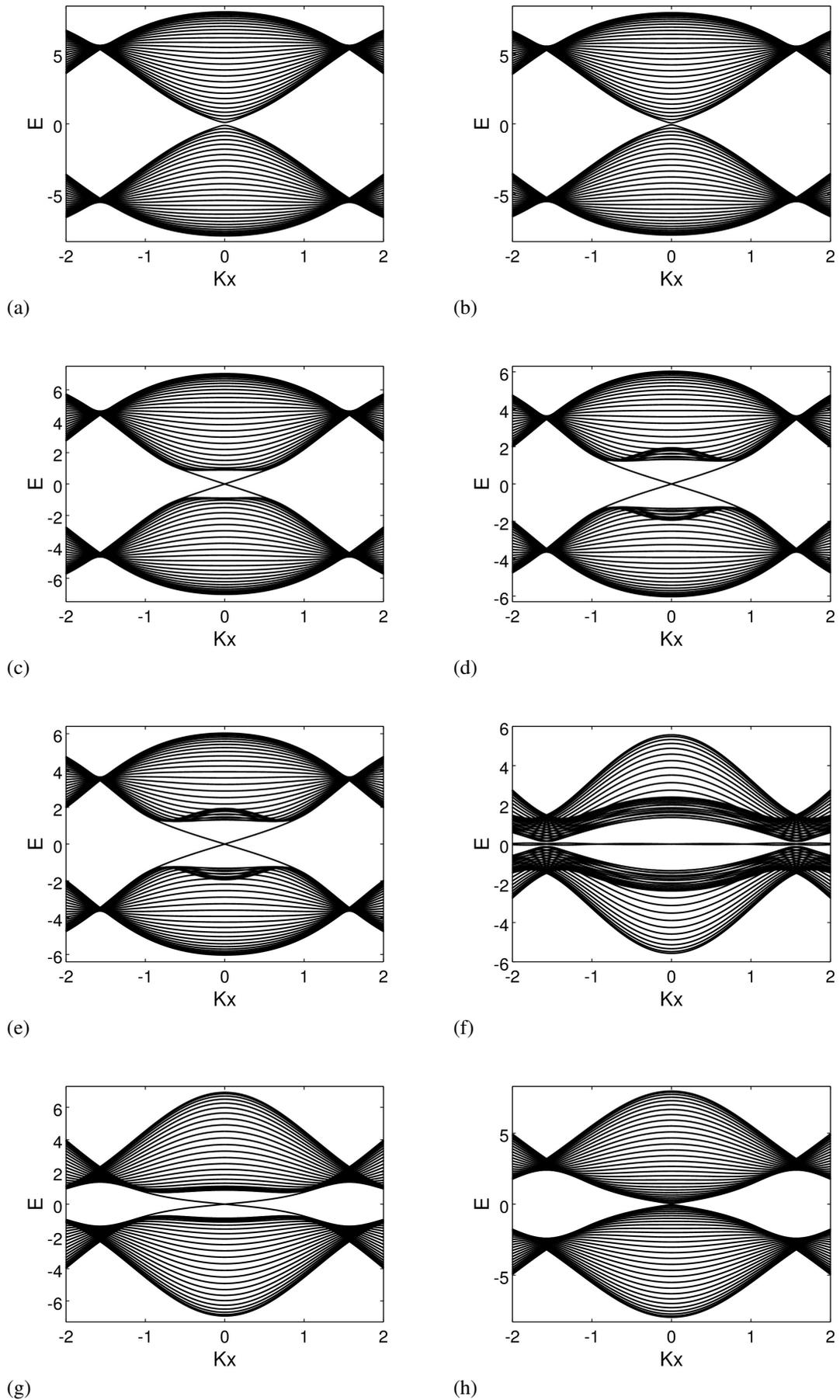


Figura 45: Relação de dispersão para $A = 1.00$, $A_2 = 0.20$, $A_3 = 0.04$, $B = 1.00$, $B_2 = 0.20$, $B_3 = 0.04$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -0.96$, (b) $\Delta = -0.90$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.64$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 7.04$.

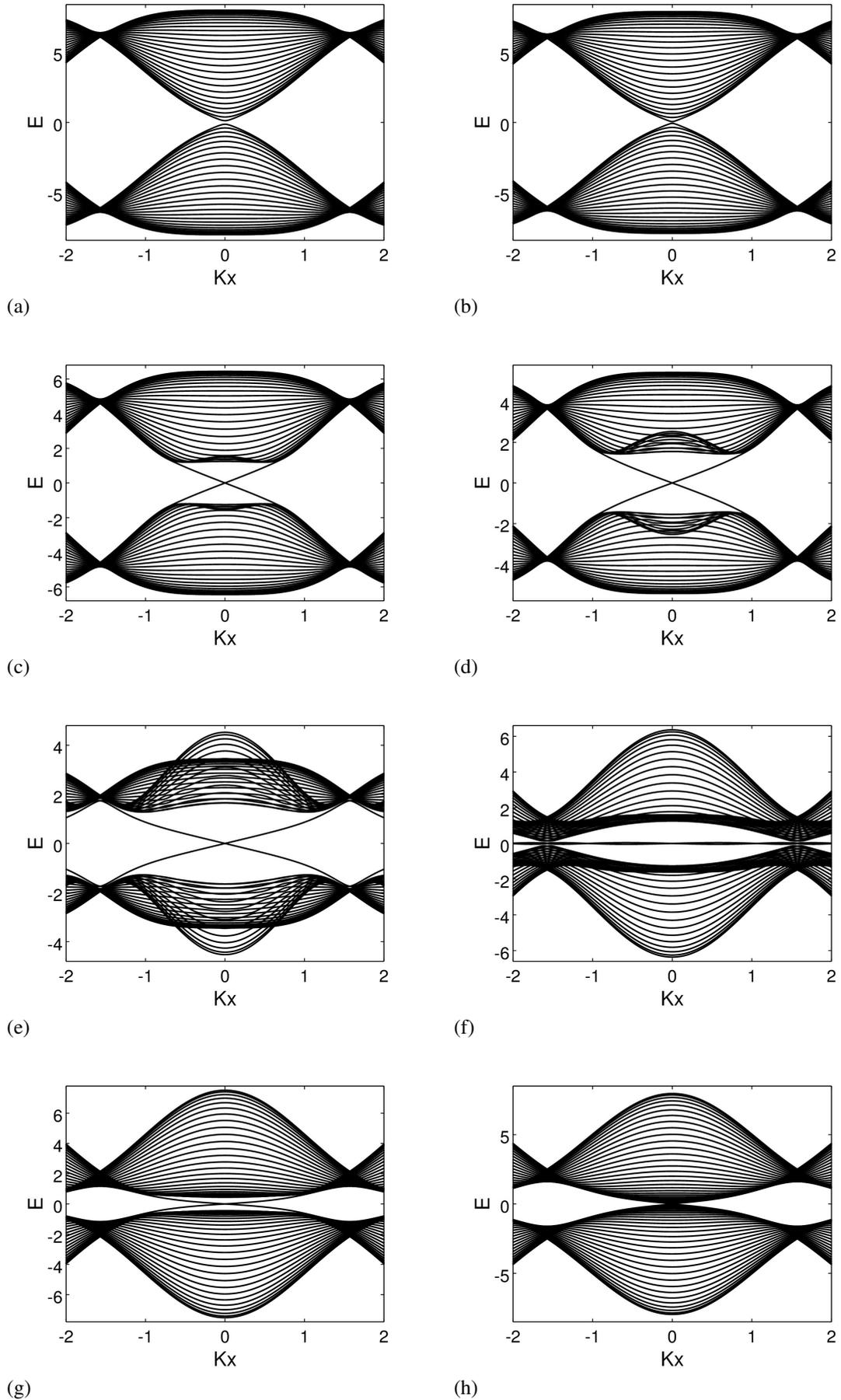


Figura 46: Relação de dispersão para $A = 1.00$, $A_2 = 0.30$, $A_3 = 0.09$, $B = 1.00$, $B_2 = 0.03$, $B_3 = 0.09$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -1.56$, (b) $\Delta = -1.46$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.84$, (g) $\Delta = 6.00$, (h) $\Delta = 6.44$.

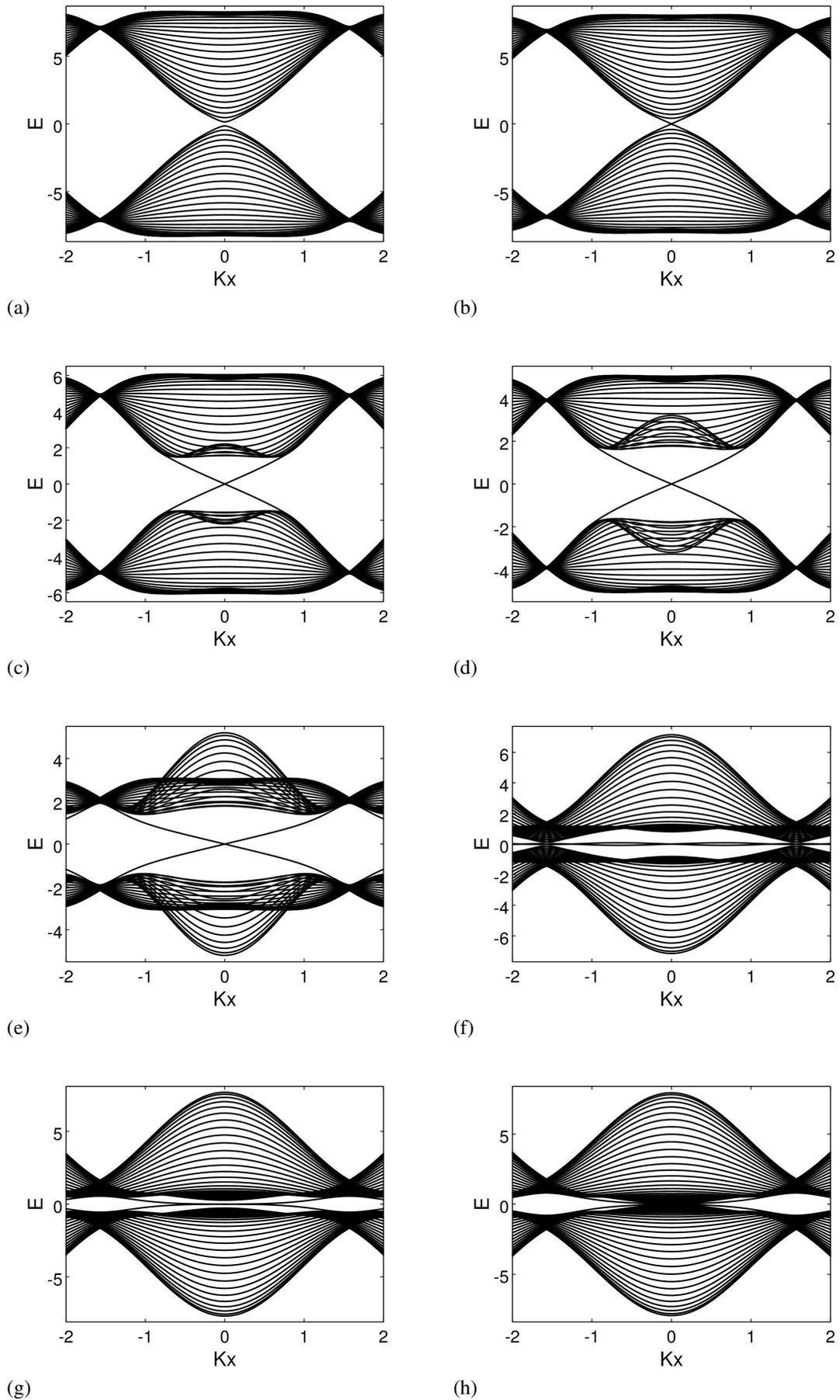


Figura 47: Relação de dispersão para $A = 1.00$, $A_2 = 0.40$, $A_3 = 0.16$, $B = 1.00$, $B_2 = 0.4$, $B_3 = 0.16$ e oito diferentes valores para Δ . (a) $\Delta = -2.24$, (b) $\Delta = -2.00$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.96$, (g) $\Delta = 5.50$, (h) $\Delta = 5.75$.

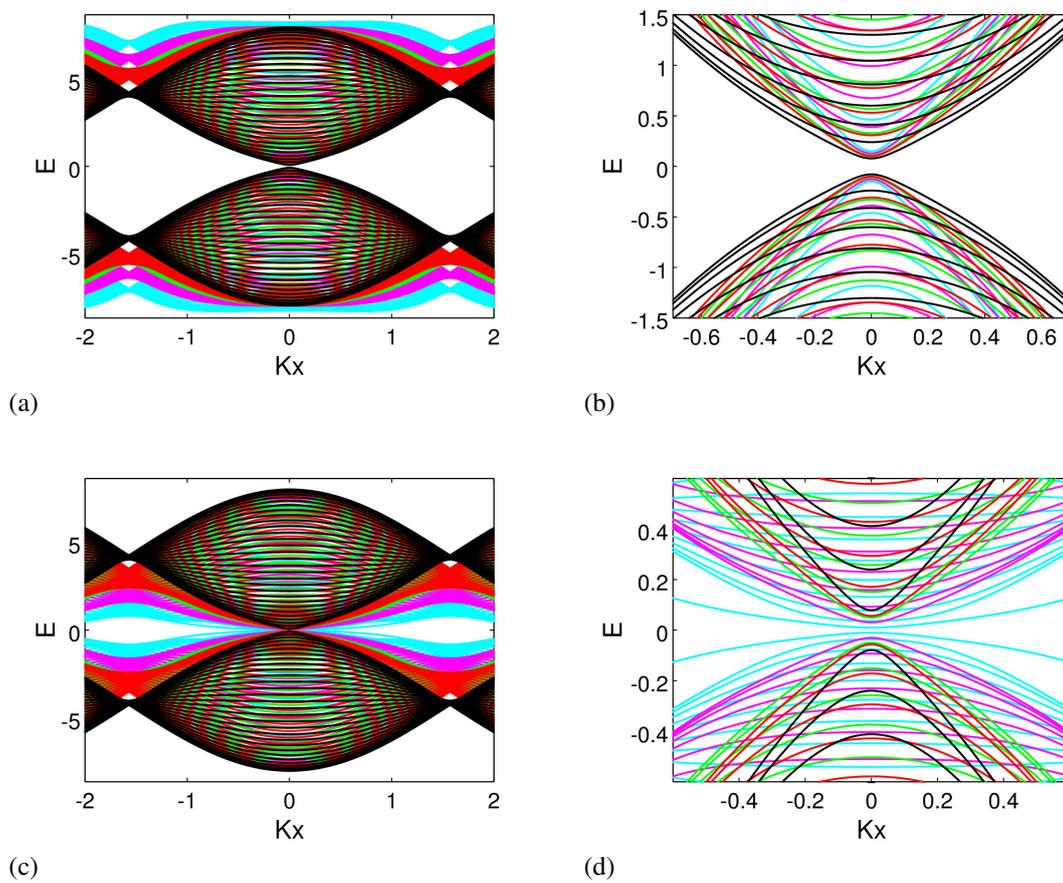


Figura 48: Sobreposições das relações de dispersão da energia nos pontos onde ocorrem as transições de fase. (a) e (b) transição de fase no Γ , (c) e (d) transição de fase no M

5 EFEITO DE TAMANHO FINITO EM ISOLANTES TOPOLÓGICOS

Afim de utilizar Isolantes Topológicos na fabricação de dispositivos microscópicos, é notório saber o comportamento desse sistema sobre um tamanho finito. Recentemente, Zhou *et al* apresentaram um estudo analítico do modelo contínuo de 4 bandas para uma tira de largura finita para os poços quânticos HgTe/CdTe [26]. Eles mostraram que os estados de borda nos dois lados podem se juntar para produzir um *gap* no espectro, destruindo o estado *Quantum Spin Hall* (QSH).

Nesse capítulo realizamos uma análise semelhante ao efeito de tamanho finito no estado QSH, mas com base no esquema de ligação forte (*tight-binding*). Os autovalores e os autovetores do *bulk* e do estado de borda podem ser obtidos diagonalizando a Hamiltoniana vista no Capítulo (3). Como visto anteriormente, o modelo *tight-binding* pode facilmente descrever a escala atômica ao redor da borda da amostra e descreve a geometria de vários dispositivos.

Para estudar a dependência do tamanho do sistema do estado QSH, escolhemos os parâmetros do modelo semelhante aos da referi [27], por exemplo, $\Delta = 1,0$ [meV], $A = 1,0$ [meV nm], $B = 1,0$ [meV nm²]. A Figura (49) (a) e (b) mostram a relação de dispersão de energia para $L = 60$ sítios. Podemos ver claramente que os modos de borda helicoidal sem *gap* existem dentro do *gap* da energia do *bulk* do sistema. Notemos aqui que, uma vez que estamos tratando $H(k)$ apenas, o modo de borda helicoidal com velocidade de grupo positiva e negativa estão localizados em torno do lado oposto da amostra, respectivamente.

Mostramos também os resultados para $L = 15$ linhas atômicas na Figura (49) (e) e (f). Ao contrário do caso para $L = 60$ linhas atômicas, podemos ver que o espectro de energia para os estados de borda é parabólico perto de $k_x = 0$ e um *gap* de energia se abre. Assim, o sistema é isolante. Este mecanismo pode ser entendido da seguinte forma. A medida que a tira se estreita, os estados de borda em cada contorno começam a se acoplar. Assim, os canais de dispersão para trás (retro-espalhamento) se abrem e, em seguida, a proteção contra a inversão de temporal dos estados de borda é quebrada.

Os estados de borda têm uma elevada magnitude do *gap* de energia $E_g \sim 0.082766$ [meV] para $N_y = 5$, uma vez que as duas funções de onda localizadas nas bordas superior e inferior se sobrepõem significativamente (Observe (h) na Figura (49)). A magnitude do *gap* de energia presente torna-se pequena com o aumento de N_y . (a), (c) e (e) na Figura (49). Para $N_y = 30$, a E_g resultante é significativamente reduzida para $1,66202 \times 10^{-07}$ [meV]. Além disso, observa-se que a forma das sub-bandas de valência depende de N_y . Para $N_y = 5$ ((g) na Figura (49)), existem três sub-bandas de valência em -2.0 [meV] $< E < 0.0$ [meV]. A sub-banda superior consiste principalmente dos estados de borda, uma vez que está localizada no *gap* de energia do *bulk*. A

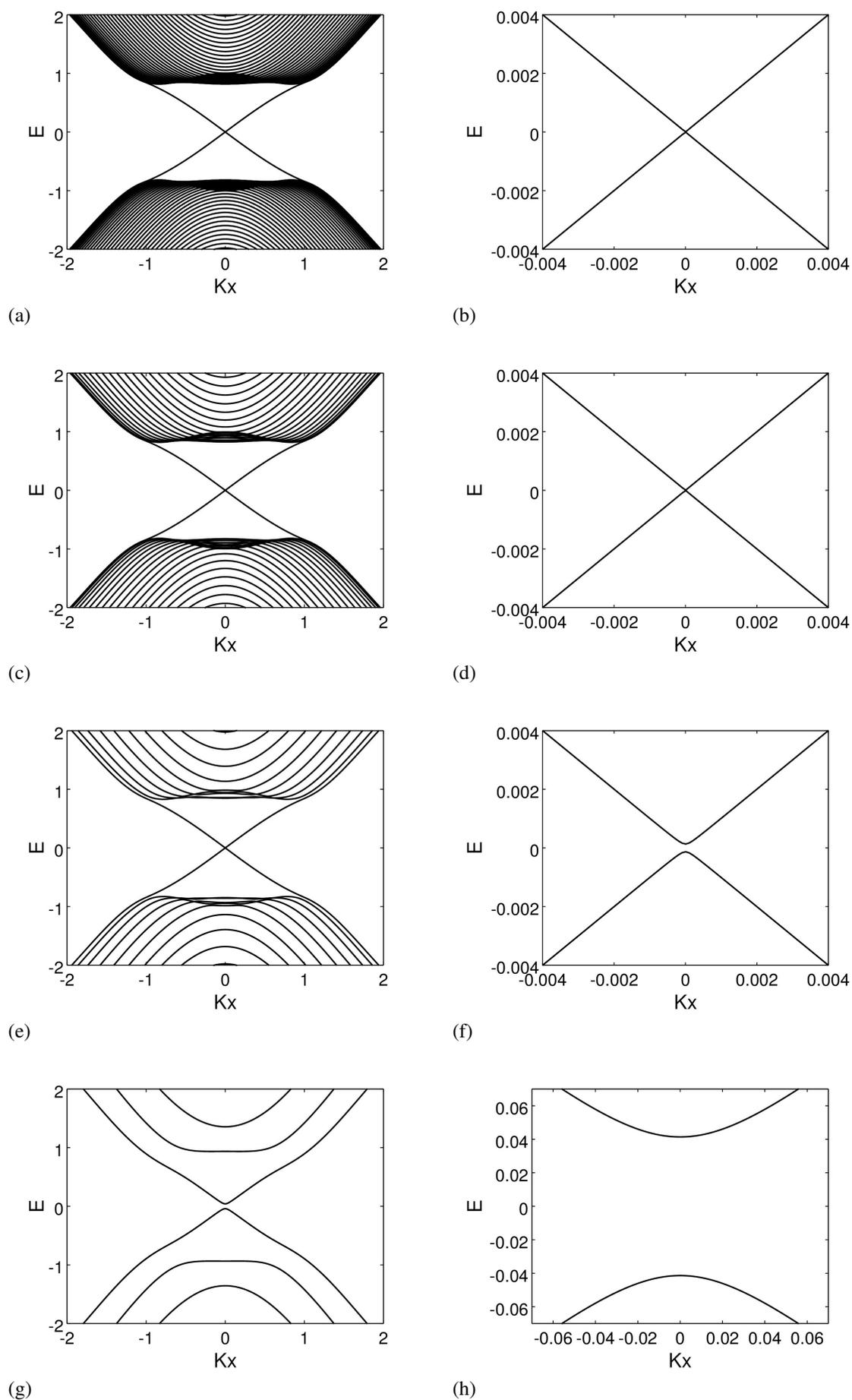


Figura 49: Espectro de energia para uma tira com (a) e (b) $L = 60$ sítios, (c) e (d) $L = 30$ sítios (e) e (f) $L = 15$ sítios (g) e (h) $L = 5$ sítios

mais baixa, que é a banda de energia *bulk*, está localizada em $\sim -1.0[\text{meV}]$. Novas sub-bandas aparecem entre estas três sub-bandas para $N_y = 15$ ((e) na Figura (49)). Simultaneamente, as sub-bandas de valência têm um mínimo local em $k_x = 0$, e é gerado um *gap* de energia indireto. Para $N_y = 30$ ((c) na Figura (49)) há muito mais sub-bandas. As bandas de energia para $N_y = 60$ como mostrado em (a) na Figura 49 é quase semelhante à do isolante topológico bidimensional com $N_y \rightarrow \infty$.

Na Figura (50), a dependência de N_y com E_g é mostrada. Para $N_y = 3, 4, 5, 6$ e 7 , E_g diminui aproximadamente exponencialmente em função de N_y , com o valor de $E_g \sim 10^{-01}[\text{meV}]$. E_g torna-se muito menor para $N_y \geq 8$. Note-se também que E_g tem um comportamento oscilatório em função de N_y cujo período é quase 3. Comportamento semelhante é obtido com base em modelos contínuos [28, 29, 30] e cálculos de primeiros princípios [31, 32, 33, 34, 35].

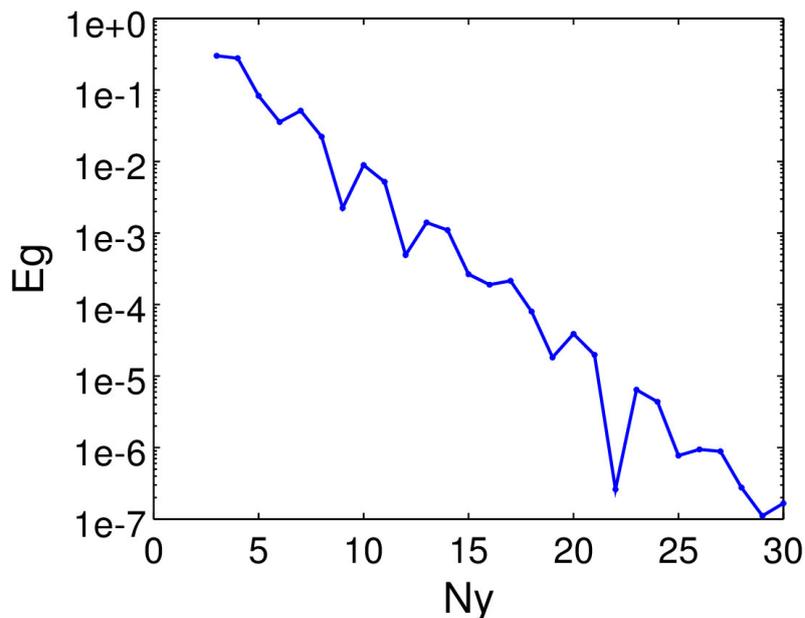


Figura 50: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y . Os parâmetros do material são os mesmos da Figura 26.

A seguir, focalizamos as dependências dos parâmetros do material com E_g . Por simplicidade, fixaremos todos os parâmetros, exceto Δ . Aqui, escolhemos seis casos de Δ . A curva na Figura (50) coincide com a curva (c) da Figura (50) obtido para $\Delta = 1.0$. A curva (c) tem uma oscilação amortecida de periodicidade tripla. Para $\Delta = 0.2$ caso (a) da Figura (51) e $\Delta = 3.9$ caso (f) da Figura (51) E_g decai exponencialmente como uma função de N_y . E_g tem uma forte oscilação para $\Delta = 2.0$, E_g torna-se zero para números ímpares de N_y . A oscilação amortecida com quatro vezes a periodicidade aparece para $\Delta = 0.5$ caso (b) Figura (51)

Podemos observar que, E_g mostra uma oscilação amortecida em função de N_y para valores de Δ distantes dos pontos onde ocorrem as transições de fase (Figura (53)). Como vimos

acima, o período de oscilação depende do valor de Δ . Pode-se concluir que a dependência de N_y e E_g é sensível ao parâmetro Δ do material.

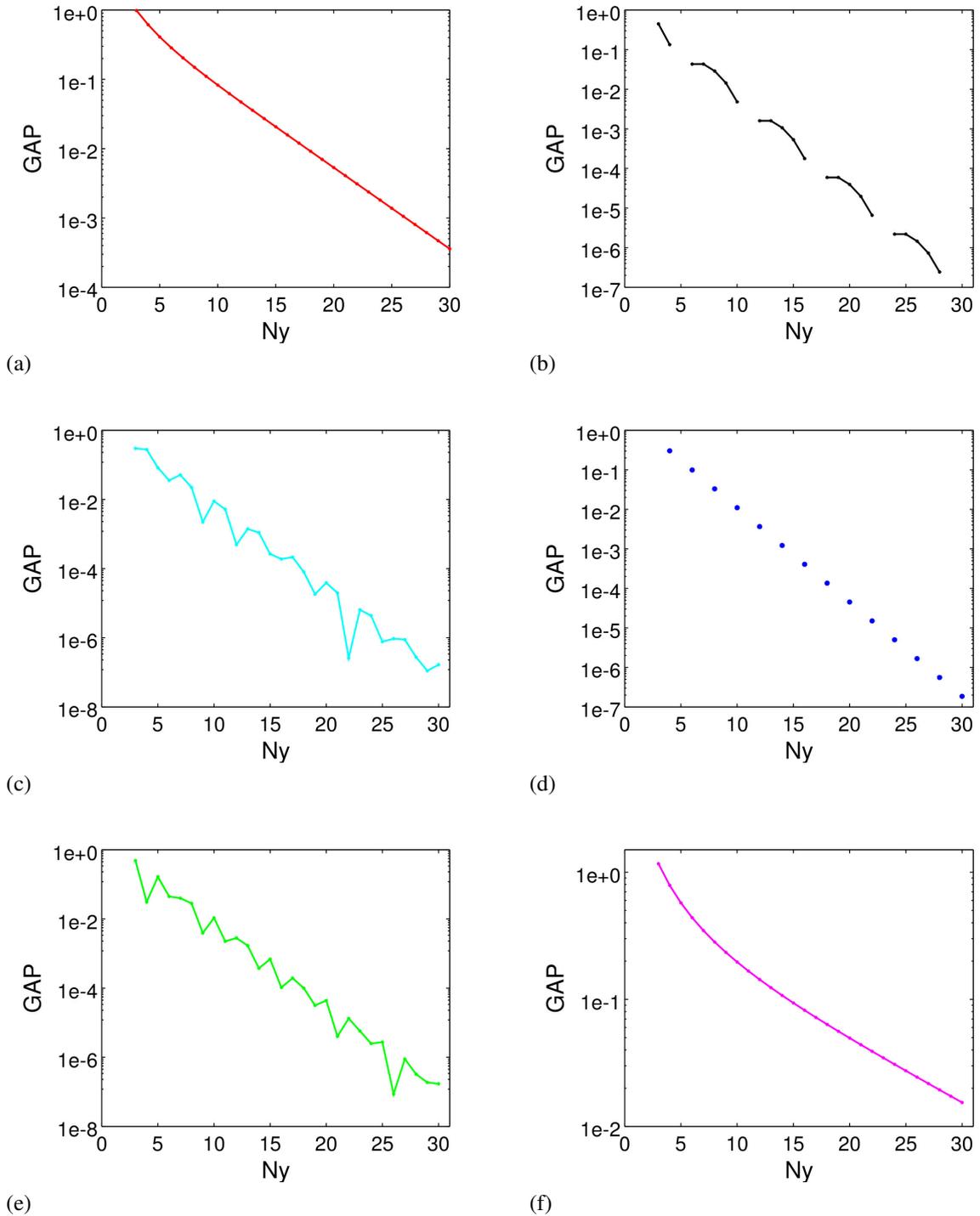


Figura 51: Magnitude do gap de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = 0.2$, (b) $\Delta = 0.5$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$, (e) $\Delta = 2.5$, (f) $\Delta = 3.9$.

5.0.4 Efeito de Tamanho Finito em Isolantes Topológicos com o Termo de Acoplamento Devido as Interações entre Segundos Vizinhos

Consideramos agora o efeito de tamanho finito para um Isolante Topológico sob a influência do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos descrito numa fita com geometria de borda reta. Como discutido nos Capítulos (3 e 4) o aumento cado da intensidade dos parâmetros de *hopping*, responsáveis pelas interações entre segundos vizinhos, faz com que a relação de dispersão deste isolante topológico sofra modificação no espectro das energias. Devido essa perturbação causada na relação de dispersão do Isolante Topológico Z_2 , nesta seção nos iremos analisar o caso onde a fase topológica encontra-se em $-4B_2 < \Delta < 4(B + B_2)$ (condutividade Hall positiva) onde os modos de borda estão localizados em $k_x = 0$.

Como no caso da interação entre primeiros vizinhos novamente por simplicidade, fixaremos todos os parâmetros, exceto Δ . Vamos escolher seis casos de Δ . Na Figura (52) temos os seguintes valores para os parâmetros de *hopping* $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.2$ e $B_2 = 0.2$, a fase topológica desse Isolante topológico encontra-se entre $-0.8 < \Delta < 4.8$. Na Figura (53) temos os seguintes valores para os parâmetros de *hopping* $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.4$ e $B_2 = 0.4$, a fase topológica desse Isolante topológico encontra-se entre $-1.6 < \Delta < 5.2$. Observe que a extensão da fase topológica é modificada, devido a implementação do efeito das interações entre segundos vizinhos.

As curvas (c) ($\Delta=1.0$), (e) ($\Delta=2.8$) e (f) ($\Delta=3.5$) da Figura (52) e as curvas (c) ($\Delta=0.0$) e (e) ($\Delta=4.2$) da Figura (53), possuem características gráficas de uma oscilação amortecida com periodicidade tripla. Para as curvas (a) ($\Delta = -0.7$) da Figura (52) e (a) ($\Delta = -1.5$) da Figura (53), é visto que E_g decai exponencialmente como uma função de N_y . E_g tem uma forte oscilação para a curva (d) ($\Delta = 2.0$) da Figura(52), onde podemos ver que, E_g torna-se zero para números ímpares de N_y . A oscilação amortecida com a periodicidade à quarta aparecem nas curvas, (b) ($\Delta = 0.0$) da Figura (52) e (b) ($\Delta = 1.2$) da Figura (53). Na curva (d) da Figura (53), E_g tem um comportamento oscilatório em forma de *zigzag*.

Como visto no caso das interações entre primeiros vizinhos, observamos que, E_g mostra uma oscilação amortecida em função de N_y para valores de Δ distantes dos pontos onde ocorrem as transições de fase (Figuras (52 e 53)). Como vimos acima, o período de oscilação depende do valor de Δ e da força dos parâmetros de acoplamento entre segundos vizinhos. Pode-se concluir que a dependência de N_y e E_g é sensível tanto ao parâmetro Δ do material quanto a intensidade dos parâmetros de *hopping* devido as interações entre segundos vizinhos.

Na Figura (54) pode ser observado o efeito da perturbação causada pelo do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos. O efeito desse termo de acoplamento proporciona um aumento do tamanho do *gap* dos estados de borda em relação as

interações entre somente primeiros vizinhos, é visto que, para valores de Δ próximos aos pontos onde ocorrem as transições de fase (estamos estudando as transições que ocorrem próximas ao ponto Γ da zona de Brillouin), E_g decai exponencialmente em função de N_y , esse comportamento é observado nas Figuras (51(a), 52(a) e 53(a)). Na Figura (54), a curva (a) da Figura (52) está sendo representada pela cor azul claro, a curva (a) da Figura (53) está sendo representada pela cor preta e a curva (a) da Figura (51) está sendo representada pela cor vermelha. Analisando esta figura, verificamos que as duas primeira curvas relacionadas com a implementação das interações entre segundo vizinhos para um Isolante Topológico, possuem os maiores valores para a energia do *gap*, logo podemos observar que o efeito da perturbação causada pelo do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, eleva o valor da energia do *gap* em comparação com o caso das interação que ocorrem somente entre primeiros vizinhos. Podemos notar que, quanto maior for a intensidade dos parâmetros de interação entre segundos vizinhos, mais acentuado é o valor *gap* dos estados de borda e maior será a quantidade de números de linhas atômicas para forçar o material a se comportar como um Isolante Topológico.

Na Figura(54), pode ser visto também o comportamento de E_g em função de N_y para valores de Δ próximos a 1.0, para estes casos os gráficos de E_g em função de N_y possuem características de uma oscilação amortecida, esse comportamento é observado na curva (c) da Figura (51) que está sendo representada pela cor verde, na curva (c) da Figura (52) que está sendo representada pela cor azul e na curva (b) da Figura (53) que está sendo representada pela cor vermelha, verificamos novamente que, as duas primeira curvas relacionadas com a implementação das interações entre segundo vizinhos para um Isolante Topológico, possuem os maiores valores para a energia do *gap*, esse comportamento é devido a perturbação causada pelo do termo de acoplamento entre segundos vizinhos, essa perturbação é responsável por elevar o valor da energia do *gap* nos estados de borda.

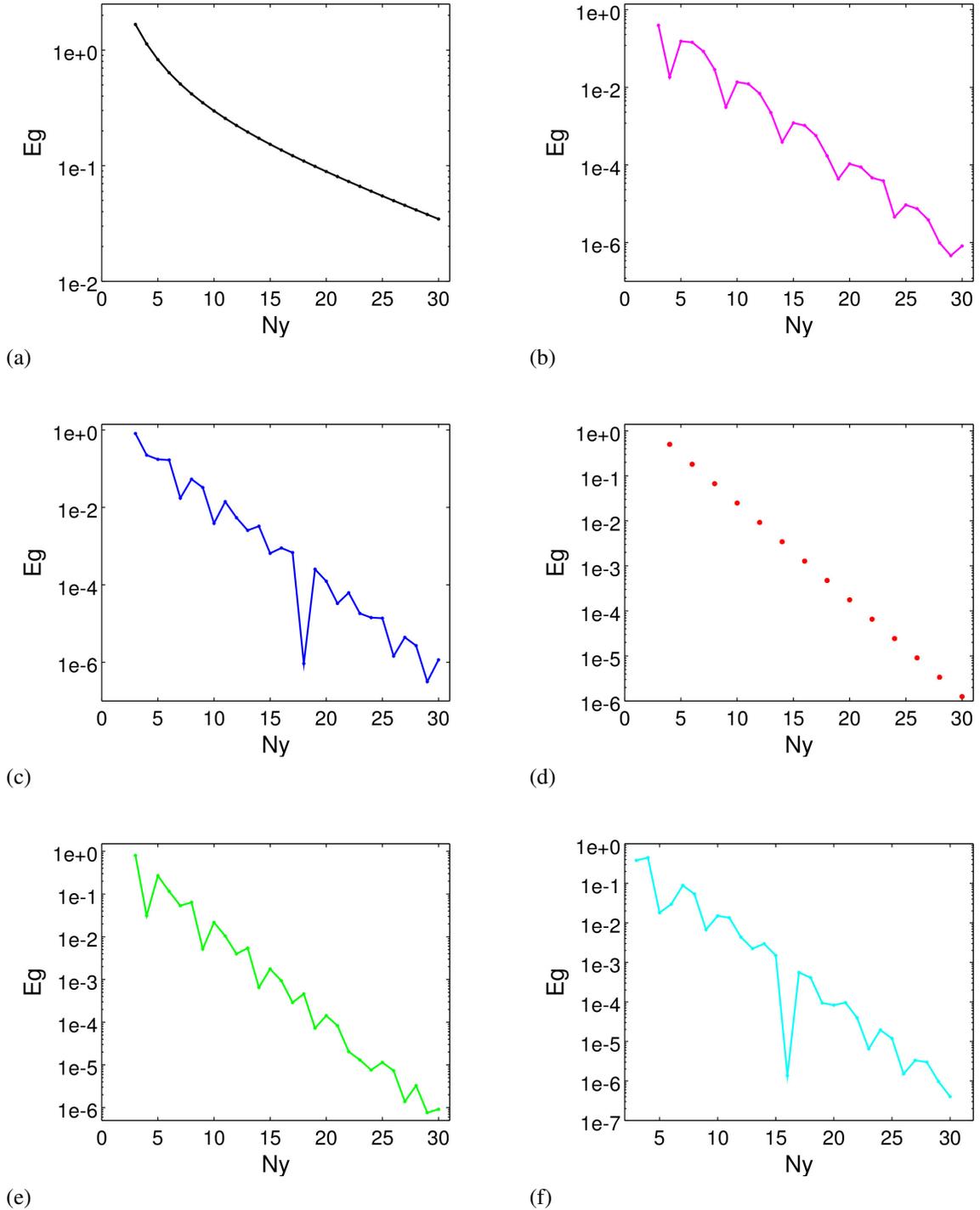


Figura 52: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -0.7$, (b) $\Delta = 0.0$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$, (e) $\Delta = 2.8$, (f) $\Delta = 3.5$.

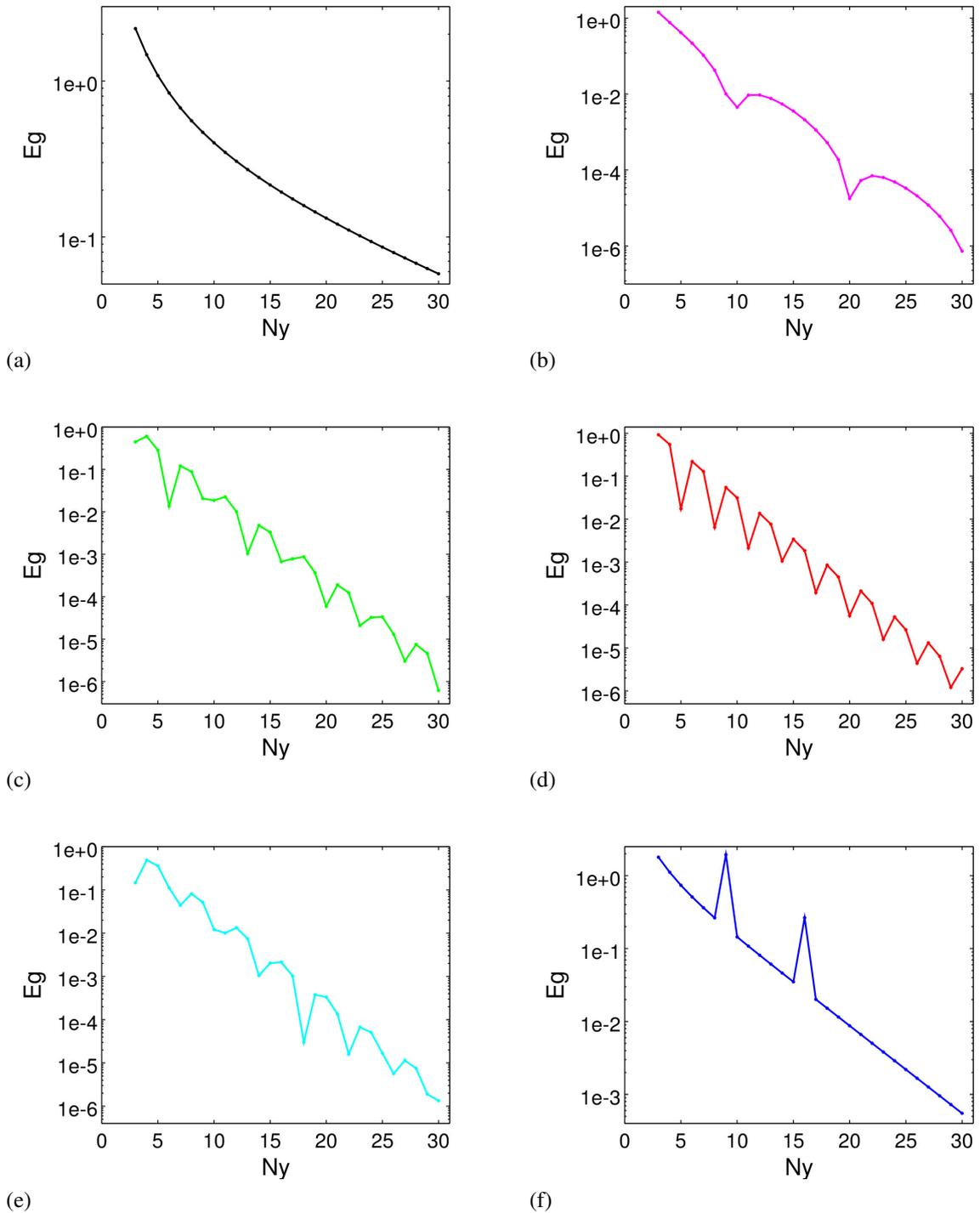


Figura 53: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -1.5$, (b) $\Delta = 1.2$, (c) $\Delta = 0.0$, (d) $\Delta = 3.6$, (e) $\Delta = 4.2$, (f) $\Delta = 5.3$.

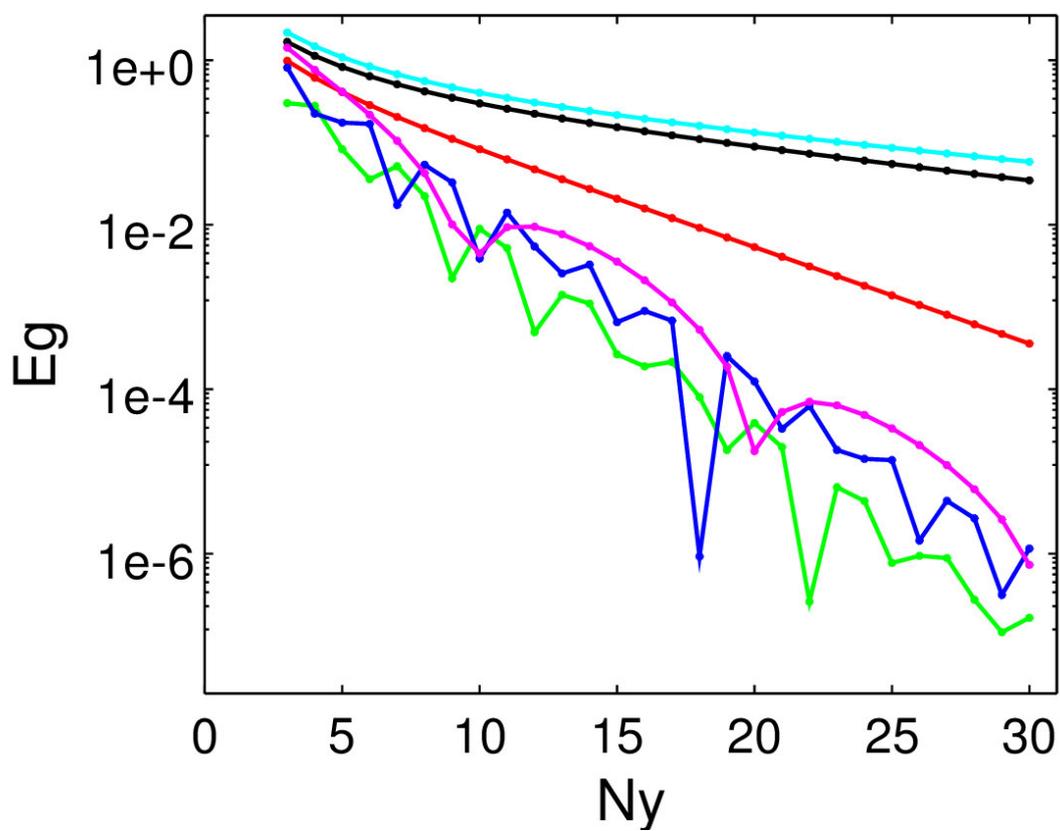


Figura 54: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y .

5.0.5 Efeito de Tamanho Finito em Isolantes Topológicos com o Termo de Acoplamento Devido as Interações entre Segundos e Terceiros Vizinhos

Consideramos agora o efeito de tamanho finito para um Isolante Topológico sob a influência do termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos descrito numa fita com geometria de borda reta. Como discutido nos Capítulos (3 e 4), o aumento cadenciado da intensidade dos parâmetros de *hopping*, responsáveis pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos, faz com que a relação de dispersão deste isolante topológico sofra modificação no espectro das energias. Devido essa perturbação causada na relação de dispersão do Isolante Topológico Z_2 , nesta seção nos iremos analisar o caso onde a fase topológica encontra-se em $-4(B_2 + B_3) < \Delta < 4(B + B_2 - B_3)$ (condutividade Hall positiva) onde os modos de borda estão localizados em $k_x = 0$

Como nos dois casos anteriores, novamente por simplicidade, fixaremos todos os parâmetros, exceto Δ . Vamos escolher seis casos para Δ . Na Figura (55) temos os seguintes valores para os parâmetros de *hopping* $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.2$, $B_2 = 0.2$, $A_3 = 0.04$, $B_3 = 0.04$, a fase topológica desse Isolante topológico encontra-se entre $-0.96 < \Delta < 4.96$. Na Figura (56) temos os seguintes valores para os parâmetros de *hopping* $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.4$, $B_2 = 0.4$, $A_3 = 0.16$ e $B_3 = 0.16$, a fase topológica desse Isolante topológico encontra-se entre $-2.24 < \Delta < 6.24$. Observe que a extensão da fase topológica é modificada, devido a implementação do efeito das interações entre segundos e terceiros vizinhos.

As curvas (b) ($\Delta=0.0$) e (c) ($\Delta=1.0$) da Figura (55) e as curvas (b) ($\Delta=0.0$), (c) ($\Delta=1.0$) e (e) ($\Delta=3.0$) da Figura (56), possuem características gráficas de uma oscilação amortecida com periodicidade tripla. Para as curvas (a) ($\Delta = -0.95$) da Figura (55) e (a) ($\Delta = -2.23$) da Figura (56), é visto que E_g decai exponencialmente como uma função de N_y . A oscilação amortecida com a periodicidade à quarta aparece na curva, (e) ($\Delta = 3.7$) da Figura (55). Na curvas (d) ($\Delta=2.0$) da Figura (55) e (d) ($\Delta=2.0$) da Figura (56), E_g tem um comportamento oscilatório em forma de zigzag.

Como visto no caso das interações entre primeiros vizinhos e no caso das interações entre primeiros vizinhos com um termo de acoplamento entre segundos vizinhos, é observado que, E_g mostra uma oscilação amortecida em função de N_y para valores de Δ distantes dos pontos onde ocorrem as transições de fase (Figuras (55 e 56)). Como vimos acima, o período de oscilação depende do valor de Δ e da força dos parâmetros de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos. Pode-se concluir que a dependência de N_y e E_g é sensível tanto ao parâmetro Δ do material quanto a intensidade dos parâmetros de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos.

Na Figura (57) pode ser observado o efeito da perturbação causada pelo do termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos. O efeito desse termo de

acoplamento proporciona um aumento do tamanho do *gap* dos estados de borda em relação as interações entre somente primeiros vizinhos, é visto que, para valores de Δ próximos aos pontos onde ocorrem as transições de fase (estamos estudando as transições que ocorrem próximas ao ponto Γ da zona de Brillouin), E_g decai exponencialmente em função de N_y , esse comportamento é observado nas Figuras (51(a), 52(a), 53(a) 55(a) e 56(a)). Na Figura (57), a curva (a) da Figura (56) está sendo representada pela cor roxa, a curva (a) da Figura (52) está sendo representada pela cor verde, a curva (a) da Figura (55) está sendo representada pela cor preta, a curva (a) da Figura (53) está sendo representada pela cor azul claro e a curva (a) da Figura (51) está sendo representada pela cor vermelha. Analisando esta figura, verificamos que as duas primeira curvas estão relacionadas com a implementação das interações entre segundo e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico, as duas curva subsequentes estão relacionadas com a implementação das interações entre segundo vizinhos para um Isolante Topológico, note que essa quatro curvas possuem os maiores valores para a energia do *gap*, logo podemos observar que o efeito da perturbação causada pelo do termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, eleva o valor da energia do *gap*. Podemos notar que, quanto maior for a intensidade dos parâmetros de interação entre segundos e terceiros vizinhos, mais acentuado deverá ser o valor *gap* dos estados de borda e maior será a quantidade de números de linhas atômicas para fossar o material a se comportar como um Isolante Topológico.

Na Figura (57), pode ser visto também o comportamento de E_g em função de N_y para valores de Δ próximos a 1.0, para estes casos os gráficos de E_g em função de N_y possuem características de uma oscilação amortecida com periodicidade, esse comportamento é observado na curva (c) da Figura (51) que está sendo representada pela cor vermelha na Figura (57), na curva (b) da Figura (56) que está sendo representada pela cor azul na Figura (57), na curva (c) da Figura (52) que está sendo representada pela cor vermelha na Figura (57) e na curva (b) da Figura (55) que está sendo representada pela cor roxa na Figura (57), verificamos novamente que, as quatro primeiras curvas possuem os maiores valores para a energia do *gap* em relação a curva que caracteriza as interações entre primeiros vizinhos, esse comportamento é explicado devido a perturbação causada pelo do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos, elevando assim o valor do *gap* nos estados de borda em comparação com o caso das interação que ocorrem somente entre primeiros vizinhos.

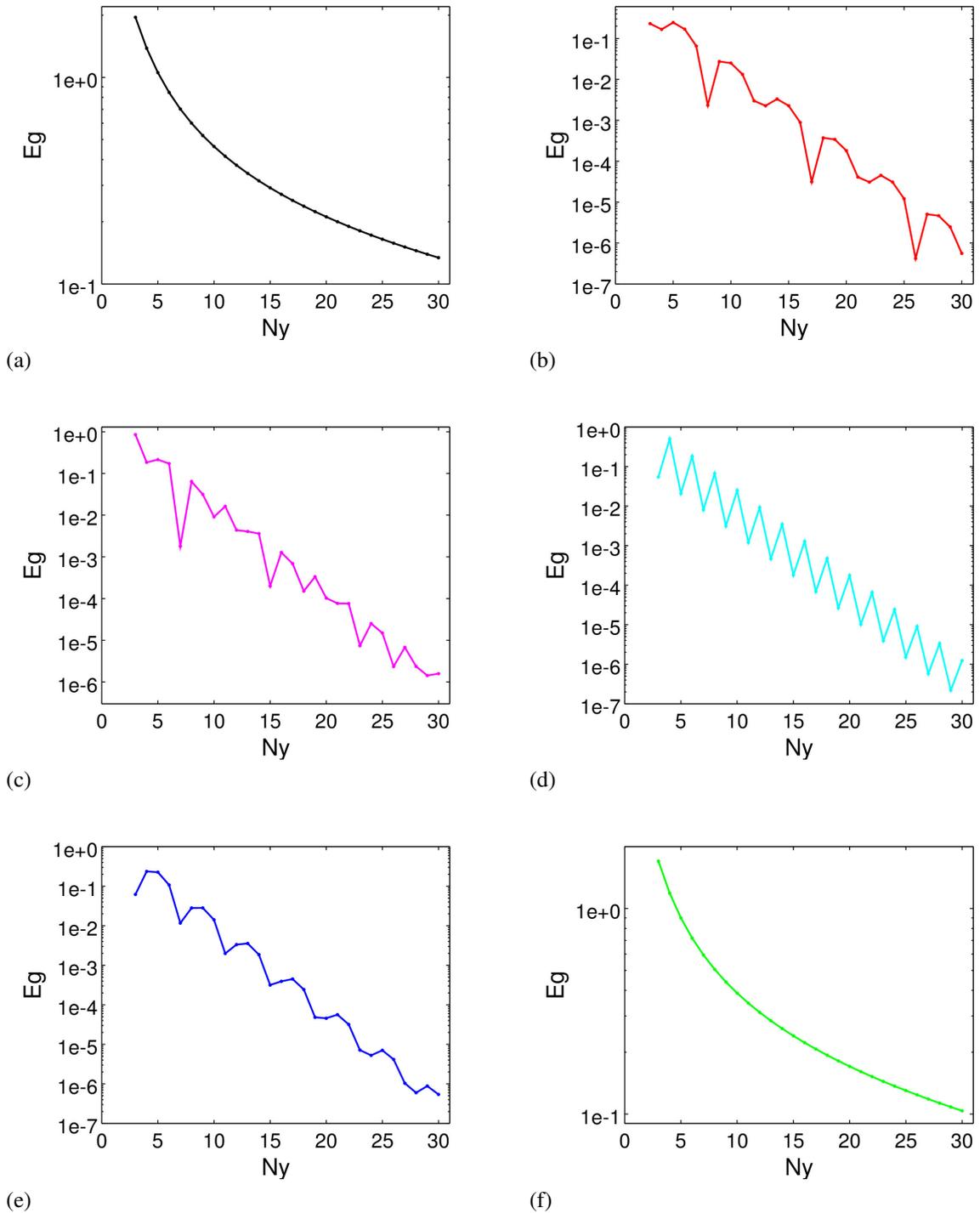


Figura 55: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -0.95$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 3.70$, (f) $\Delta = 4.62$.

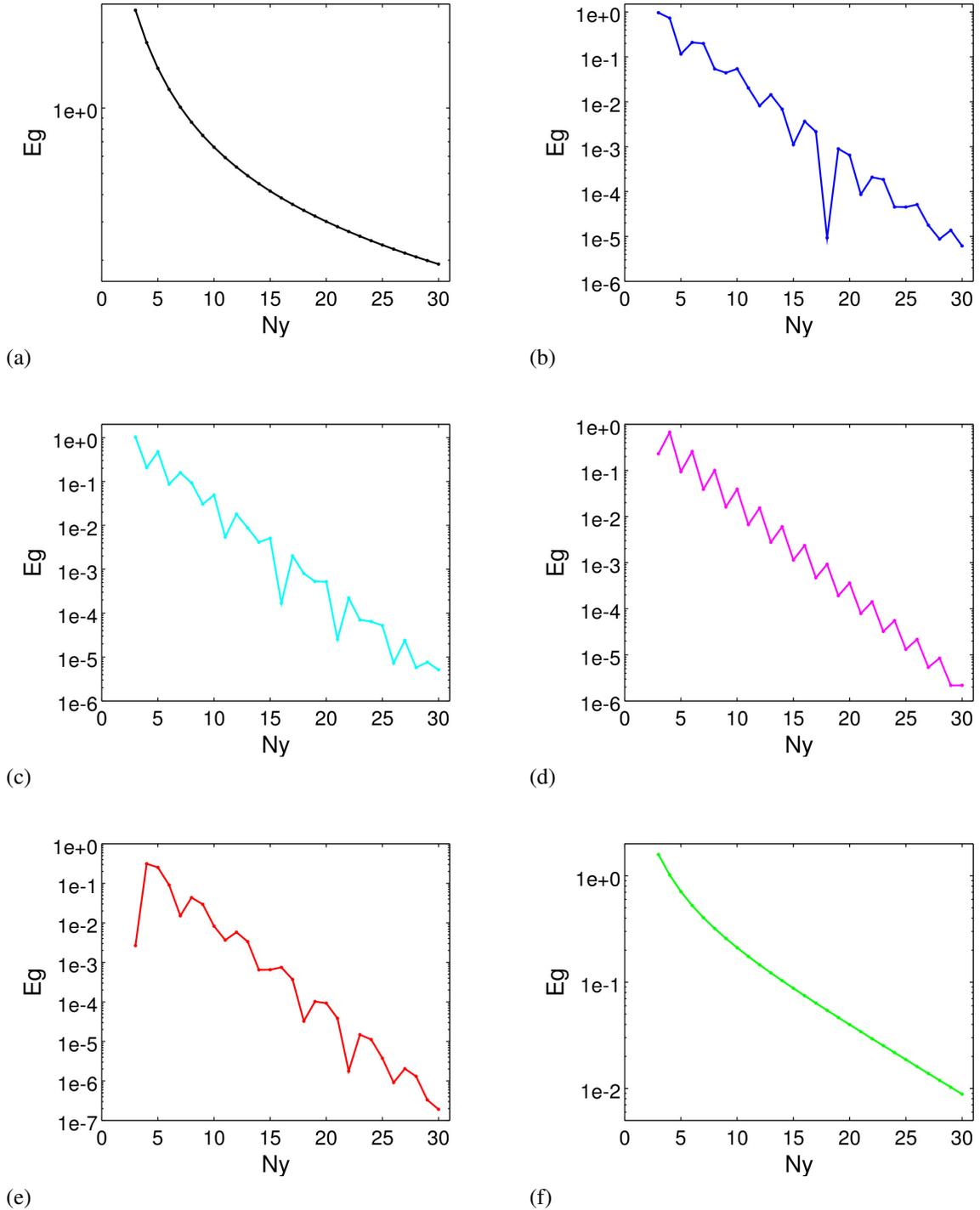


Figura 56: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -2.23$, (b) $\Delta = 0.00$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 3.90$, (f) $\Delta = 4.80$.

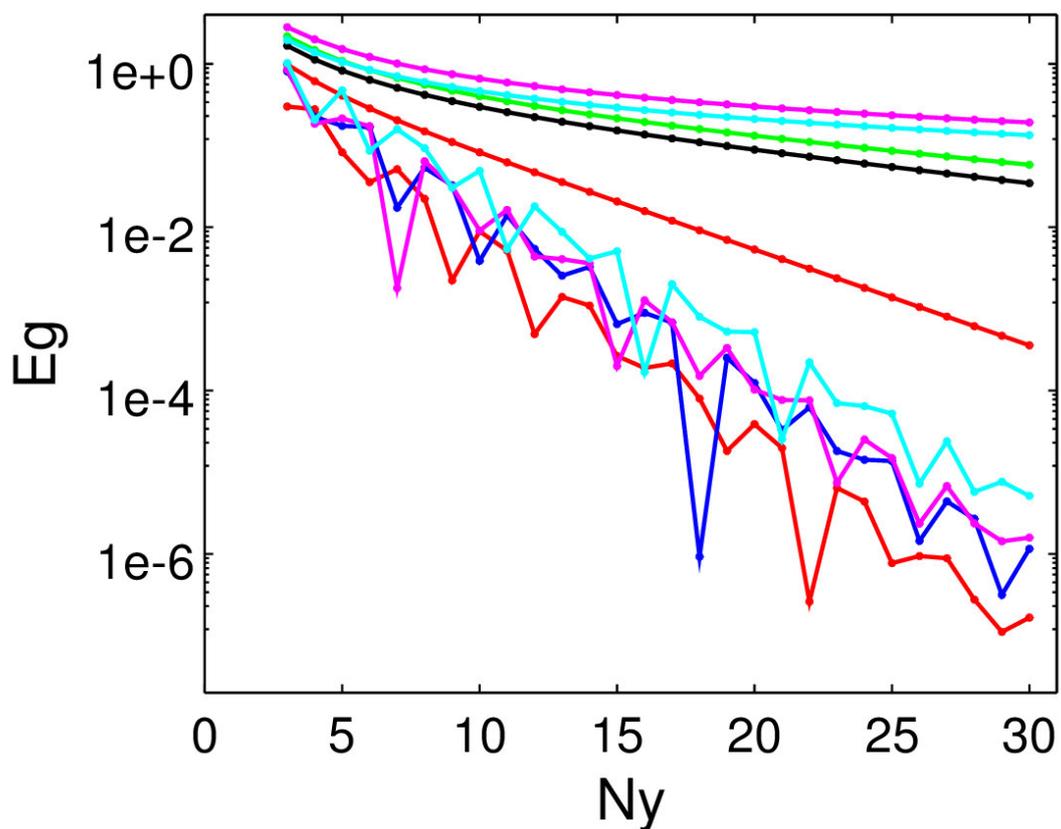


Figura 57: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y .

A Figura 58, nos mostra, a sobreposição das relações de dispersão para um Isolante Topológico com diferentes valores do termo de acoplamento. A relação de dispersão com a cor azul claro representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre Primeiros vizinhos. A relação de dispersão com a cor verde representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros e segundos vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos ($\Delta = 1.0, A = 1.0, B = 1.0, A_2 = 0.2$ e $B_2 = 0.2$). A relação de dispersão com a cor roxa representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros e segundos vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos ($\Delta = 1.0, A = 1.0, B = 1.0, A_2 = 0.4$ e $B_2 = 0.4$) A relação de dispersão com a cor vermelha representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos, e os parâmetros de interação entre terceiros vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre segundos vizinhos ($\Delta = 1.0, A = 1.0, B = 1.0, A_2 = 0.2, B_2 = 0.2, A_3 = 0.04$ e $B_3 = 0.04$) A relação de dispersão com a cor preta representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos, e os parâmetros de interação entre terceiros vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre segundos vizinhos ($\Delta = 1.0, A = 1.0, B = 1.0, A_2 = 0.4, B_2 = 0.4, A_3 = 0.16$ e $B_3 = 0.16$).

Na Figura (58(a e b)) é mostrado a sobreposição das relações de dispersão para um Isolante Topológico com diferentes valores do termo de acoplamento para 60 linhas atômicas. Na subfigura (a), é observado que as interações entre segundos e terceiros vizinhos induzem a um aumento do tamanho do *gap* no *bulk*. Na subfigura (c), é mostrado os estados de bordas para um Isolante Topológico, podemos notar que os estados de borda cruzam toda a região do *gap* no *bulk* na primeira região topológica que possui a condutividade Hall positiva. Na Figura (58(c e d)) é mostrado novamente a sobreposição das relações de dispersão para um Isolante Topológico com diferentes valores do termo de acoplamento para 15 linhas atômicas. Na subfigura (c), é observado um resultado similar ao visto na subfigura (a) onde as interações entre segundos e terceiros vizinhos induzem a um aumento do tamanho do *gap* no *bulk* na primeira região topológica que possui a condutividade Hall positiva. Na subfigura (c), é mostrado os estados de bordas para um Isolante Topológico, podemos notar, a existência de um *gap* nos estados de borda, assim, o sistema torna-se um isolante. A medida que a tira se estreita, os estados de borda em cada contorno começam a se acoplar. Assim, os canais de dispersão para trás (retro-

espalhamento) se abrem e, em seguida, a proteção contra a inversão de temporal dos estados de borda é quebrada.

Nas Figuras (59, 60, 61, 62 3 63), é mostrado o comportamento do *gap* nos estados de borda em função do número de linhas atômicas. A descrição das cores das figuras em função da força do termo de perturbação é dada no parágrafo acima. Na Figura (59), fixamos os valores para Δ próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase. Na Figura (60), fixamos o valor de Δ para 1.0. Na Figura (61), fixamos o valor de Δ para 2.0. É observado nestas figuras que as interações entre segundos e terceiros vizinhos aumentam o tamanho do *gap* na borda de um Isolante Topológico na primeira região topológica que possui a condutividade Hall positiva. Na Figura (62), fixamos os valores para Δ próximos ao ponto X_1 da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase topológica. Na Figura (63), fixamos o valor de Δ para 6.0. Diferentes dos resultados encontrados para as Figuras (59, 60 e 61), é observado que as interações entre segundos e terceiros vizinhos diminuem o tamanho do *gap* na borda de um Isolante Topológico na segunda região topológica que possui a condutividade Hall negativa.

Portanto, notamos que, o efeito causado pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos na borda de um Isolante Topológico, depende tanto dos valores dos parâmetros de acoplamento, quanto da região topológica observada.

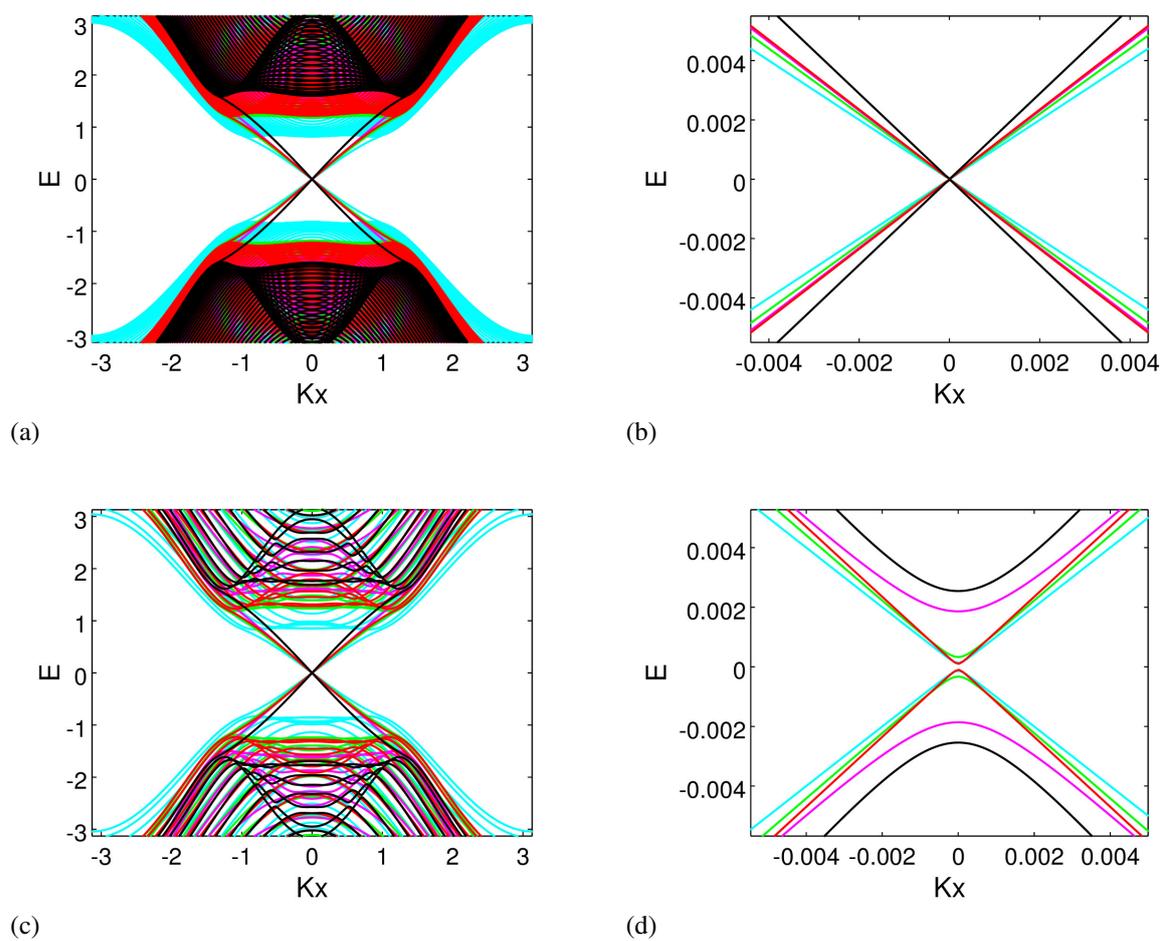
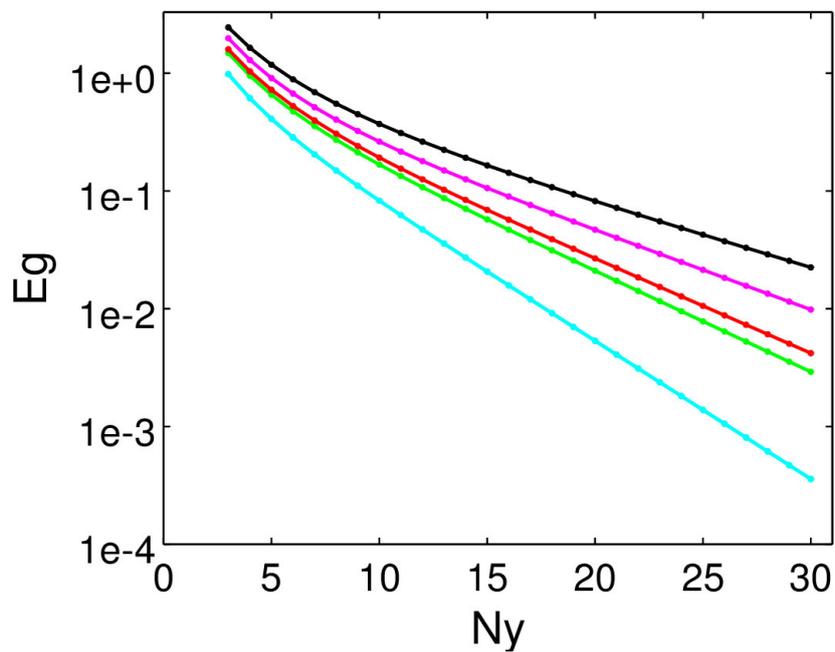
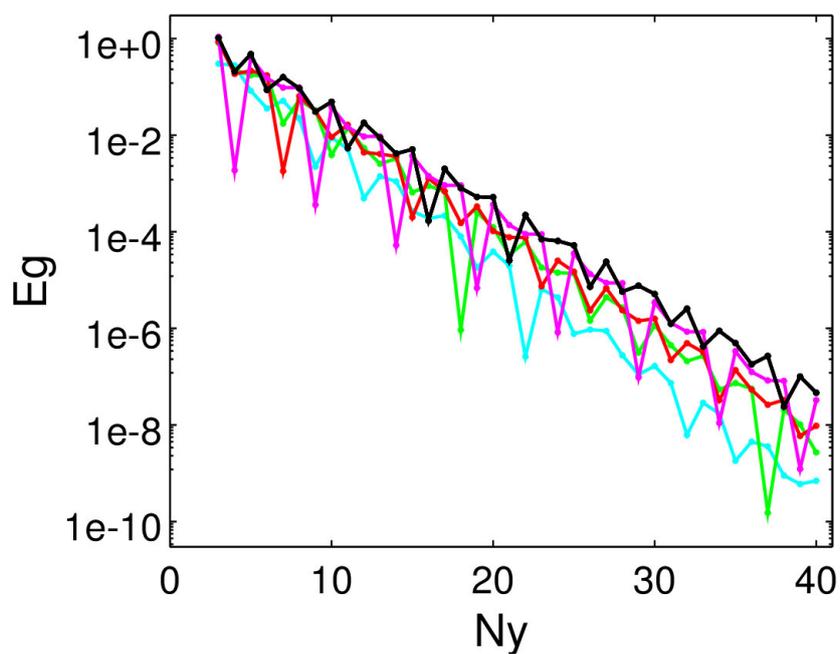


Figura 58: Sobreposições das relações de dispersão da energia, para diferentes valores do termo de acoplamento. (a) e (b) 60 linhas atômicas, (c) e (d) 15 linhas atômicas.



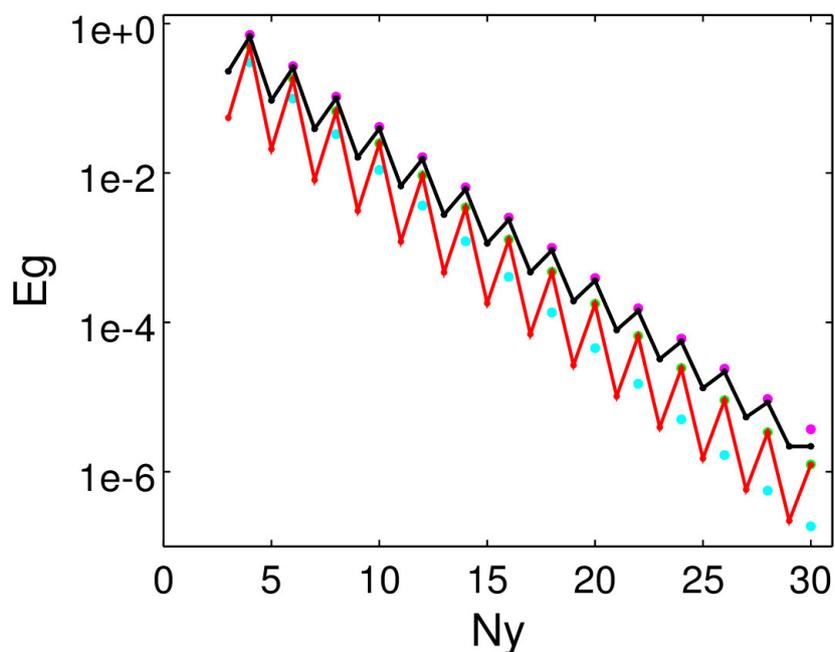
(a)

Figura 59: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos os valores para Δ para valores próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase.



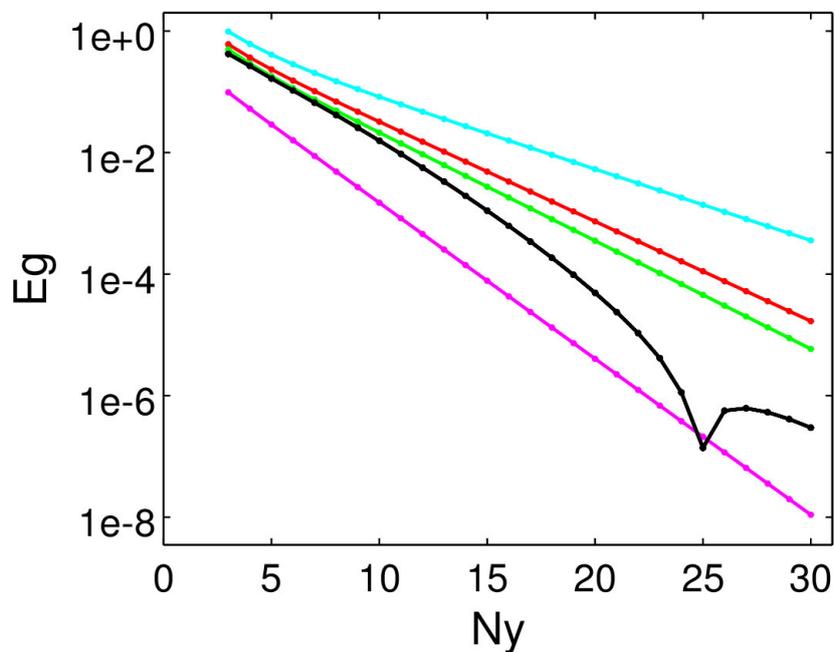
(a)

Figura 60: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 1.0



(a)

Figura 61: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 2.0.



(a)

Figura 62: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos os valores para Δ para pontos próximos ao ponto X_1 da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase topológica.

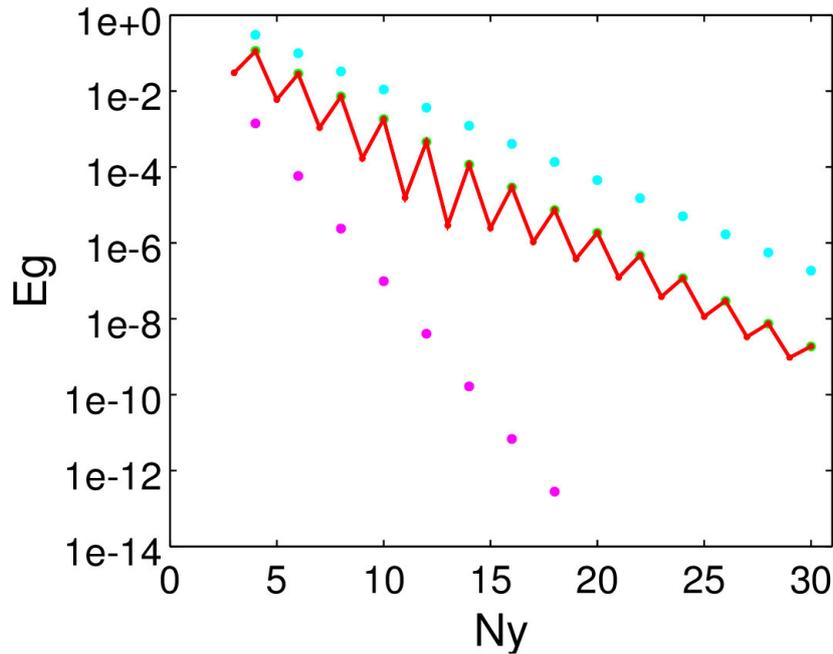


Figura 63: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 6.0.

5.1 Efeito de Tamanho Finito em Isolantes Topológicos com a Geometria de Borda em Zigzag

Outra geometria de borda analisada nessa tese é a geometria de borda em zigzag, para essa geometria também consideramos o efeito de tamanho finito para um Isolante Topológico sob a influência do termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos. Como discutido nos Capítulos (3 e 4), o aumento cadenciado da intensidade dos parâmetros de *hopping*, responsáveis pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos, faz com que a relação de dispersão deste isolante topológico sofra modificação no espectro das energias. Devido essa perturbação causada na relação de dispersão do Isolante Topológico Z_2 , nesta seção nos iremos analisar o caso onde a fase topológica encontra-se em $-4(B_2 + B_3) < \Delta < 4(B + B_2 - B_3)$ (condutividade Hall positiva) onde os modos de borda estão localizados em $k_x = 0$

Como nos casos anteriores, novamente por simplicidade, fixaremos todos os parâmetros, exceto Δ . Vamos escolher seis casos para Δ . A Figura (64) corresponde ao modelo proposto para um Isolante Topológico descrito para uma rede quadrada com geometria de borda em zigzag com somente interações entre primeiros vizinhos, os seguintes valores para os parâmetros de *hopping* associados a essa figura são $A = 1.0$ e $B = 1.0$ a fase topológica desse Isolante topológico encontra-se entre $0.0 < \Delta < 4.00$. A Figura (65) corresponde ao modelo proposto para um ao Isolante Topológico descrito para uma rede quadrada com geometria de borda em zigzag com interações entre primeiros vizinhos e com um termo de acoplamento devido as

interações entre segundos vizinhos, os seguintes valores para os parâmetros de *hopping* associados a essa figura são $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.4$ e $B_2 = 0.4$ a fase topológica desse Isolante topológico encontra-se entre $-1.60 < \Delta < 5.60$. A Figura (66) corresponde ao modelo proposto para um ao Isolante Topológico descrito para uma rede quadrada com geometria de borda em *zigzag* com interações entre primeiros vizinhos e com um termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, os seguintes valores para os parâmetros de *hopping* associados a essa figura são $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.4$, $B_2 = 0.4$, $A_3 = 0.16$ e $B_3 = 0.16$ a fase topológica desse Isolante topológico encontra-se entre $-2.24 < \Delta < 6.24$. Observe que a extensão da fase topológica é modificada, devido a implementação do efeito das interações entre segundos e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico com a geometria de borda em *zigzag*.

As curvas (d) ($\Delta=2.0$) e (e) ($\Delta=2.5$) da Figura (64), a curva (c) ($\Delta=0.0$) da Figura (65) e as curvas (d) ($\Delta=1.0$) e (e) ($\Delta=3.0$) da Figura (66), possuem características gráficas de uma oscilação amortecida com periodicidade tripla. Para as curvas (a) ($\Delta = 0.20$) da Figura (64), (a) ($\Delta = -1.50$) da Figura (65) e (a) ($\Delta = -2.13$), é visto que E_g decai exponencialmente como uma função de N_y . A oscilação amortecida com a periodicidade à quarta aparece nas curvas, (b) ($\Delta = 0.5$) e (c) ($\Delta = 1.0$) da Figura (65), (b) ($\Delta = 1.2$) da Figura (67) e (b) ($\Delta = -1.0$) da Figura (69). Nas curvas (d) ($\Delta=2.0$) e (f) ($\Delta=3.9$) da Figura (65), (d) ($\Delta=3.60$) e (f) ($\Delta=5.30$) da Figura (67) (d) ($\Delta=2.0$) e (f) ($\Delta=3.9$) da Figura (65) E_g tem um comportamento oscilatório em forma de *zigzag*.

Semelhante aos casos que possuem uma geometria de borda reta, observamos que, E_g mostra uma oscilação amortecida em função de N_y para valores de Δ distantes dos pontos onde ocorrem as transições de fase (Figuras (66, 68 e 70)). Como pode ser vistos nessas figuras, o período de oscilação depende do valor de Δ , da intensidade dos parâmetros de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos e da estrutura geometria das bordas do material. Pode-se concluir que a dependência de N_y e E_g é sensível tanto ao parâmetro Δ do material, quanto a força dos parâmetros de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos e da geometria da borda.

Na Figura (71) pode ser observado o efeito da perturbação causada pelo do termo de acoplamento devidos as interações entre segundos e terceiros vizinhos num isolante topológico que possui uma geometria de borda em *zigzag*. O efeito desse termo de acoplamento proporciona um aumento do tamanho do *gap*, é visto que, para valores de Δ próximos aos pontos onde ocorrem as transições de fase (estamos estudando as transições que ocorrem próximas ao ponto Γ da zona de Brillouin), E_g decai exponencialmente em função de N_y , esse comportamento é observado nas Figuras (66(a), 68(a) e 70(a)). Na Figura (64), a curva (a) da Figura (70) está sendo representada pela cor roxa, a curva (a) da Figura (68) está sendo representada pela

cor azul e a curva (a) da Figura (66) está sendo representada pela cor vermelha. Analisando esta figura, verificamos que as duas primeira curvas estão relacionadas com a implementação das interações entre segundo e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico, note que essas curvas possuem os maiores valores para a energia do *gap*, logo podemos observar que o efeito da perturbação causada pelo do termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, eleva o valor da energia do *gap*. Podemos notar que, quanto maior for a intensidade dos parâmetros de interação entre segundos e terceiros vizinhos, mais acentuado deverá ser o valor *gap* dos estados de borda e maior será a quantidade de números de linhas atômicas para fossar o material a se comportar como um Isolante Topológico.

Na Figura (71), pode ser visto também o comportamento de E_g em função de N_y para valores de Δ próximos a 1.0, para estes casos os gráficos de E_g em função de N_y possuem características de uma oscilação amortecida com periodicidade, esse comportamento é observado na curva (c) da Figura (66) que está sendo representada pela cor azul claro na Figura (71), na curva (b) da Figura (68) que está sendo representada pela cor verde na Figura (71) e na curva (d) da Figura (70) que está sendo representada pela cor vermelha na Figura (71), verificamos novamente que, as duas primeiras curvas possuem os maiores valores para a energia do *gap* em relação a curva que caracteriza as interações entre primeiros vizinhos, esse comportamento é explicado devido a perturbação causada pelo do termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos, elevando assim o valor do *gap* nos estados de borda em comparação com o caso das interação que ocorrem somente entre primeiros vizinhos.

Assim podemos inferir que o termo de acoplamento devido as interações entre e segundos e terceiros vizinhos, modifica a extensão da fase topológica de um Isolante Topológico para ambas geometrias de borda estudas nesta tese, esse termo de acoplamento é responsável para produzir uma perturbação no modelo de interações com somente primeiros vizinhos de tal foma que além de variar o tamanho das fases topológicas como discutido no Capítulo (4), essas perturbações também é responsável por aumenta o valor do *gap* nos estados de borda, também concluímos que a dependência de N_y e E_g é sensível tanto ao parâmetro Δ do material, quanto ao valor da intensidade dos parâmetros de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos e da geometria da borda. Quando analisamos um sistema finito, é visto que, quanto maior for o valor da intensidade dos parâmetros de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos, maior é a perturbação produzida no modelo. Do ponto de vista da construção de um sistema finito (nanodispositivos), notamos que os efeitos causados pelos termos de acoplamento podem interferir na construção desses dispositivos, isto é, quanto menor forem os dispositivos, maiores serão as flutuações devidos aos termos de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos.

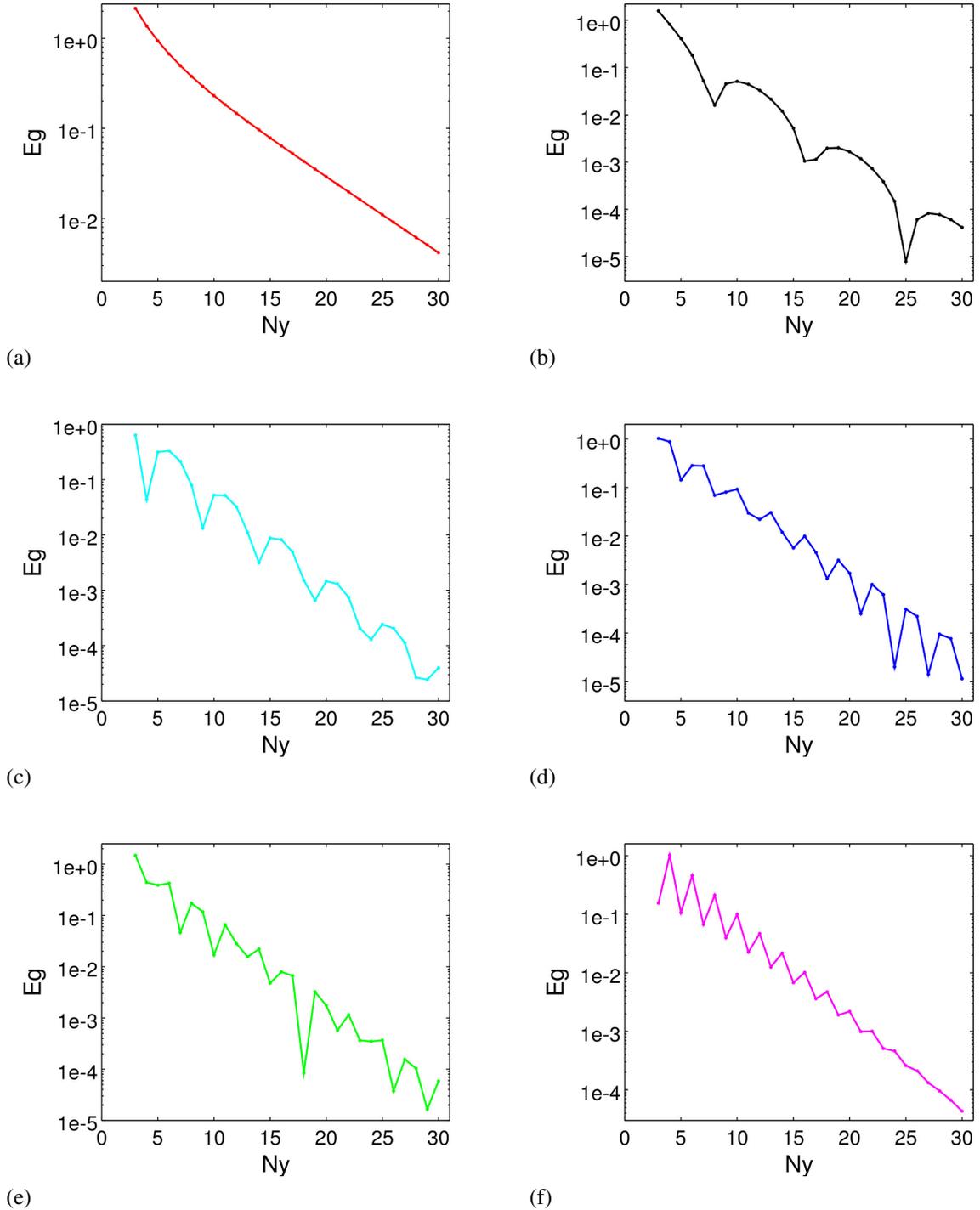


Figura 64: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = 0.20$, (b) $\Delta = 0.50$, (c) $\Delta = 1.00$, (d) $\Delta = 2.00$, (e) $\Delta = 2.50$, (f) $\Delta = 3.90$.

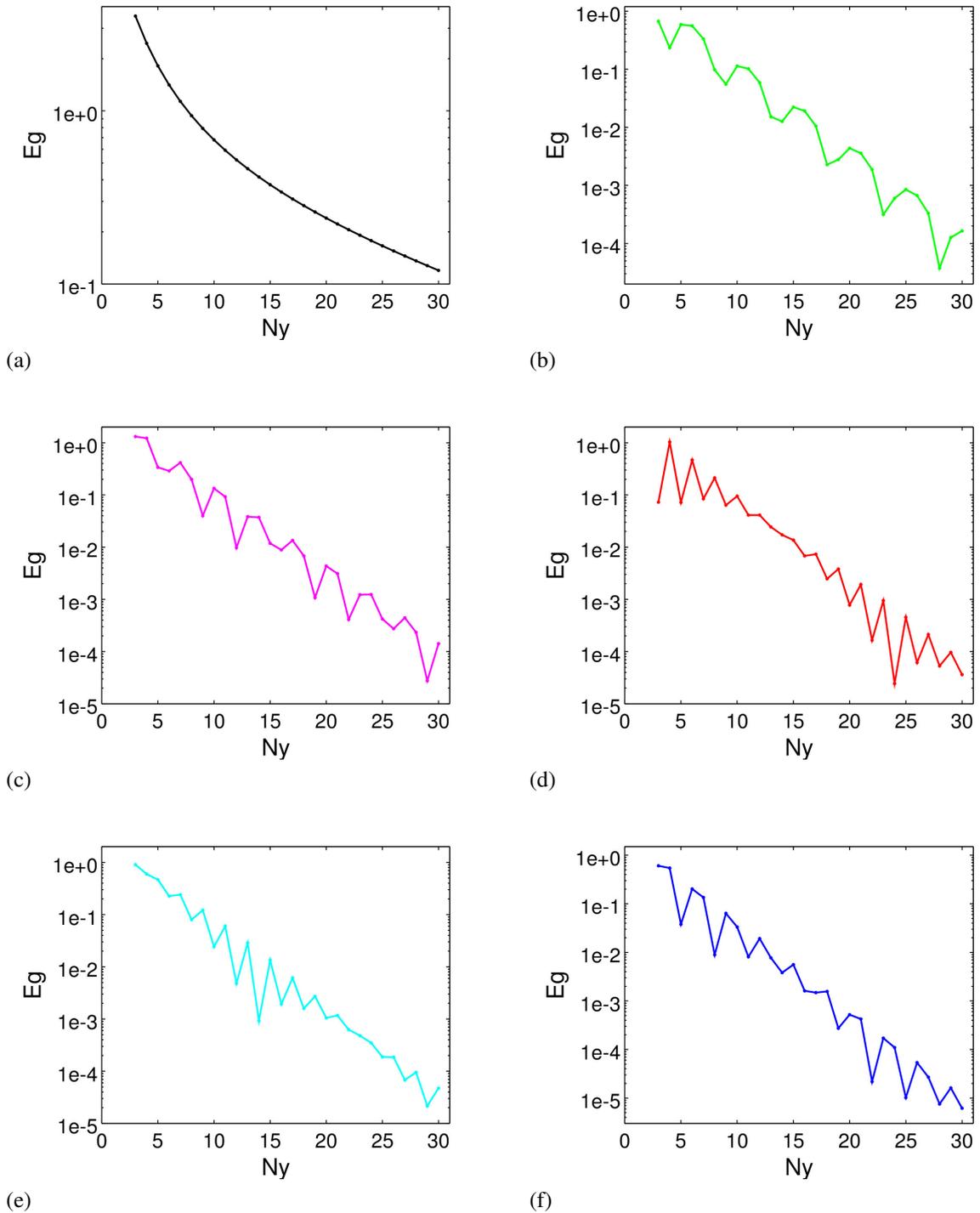


Figura 65: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -1.50$, (b) $\Delta = 1.20$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 3.60$, (e) $\Delta = 4.20$, (f) $\Delta = 5.30$.

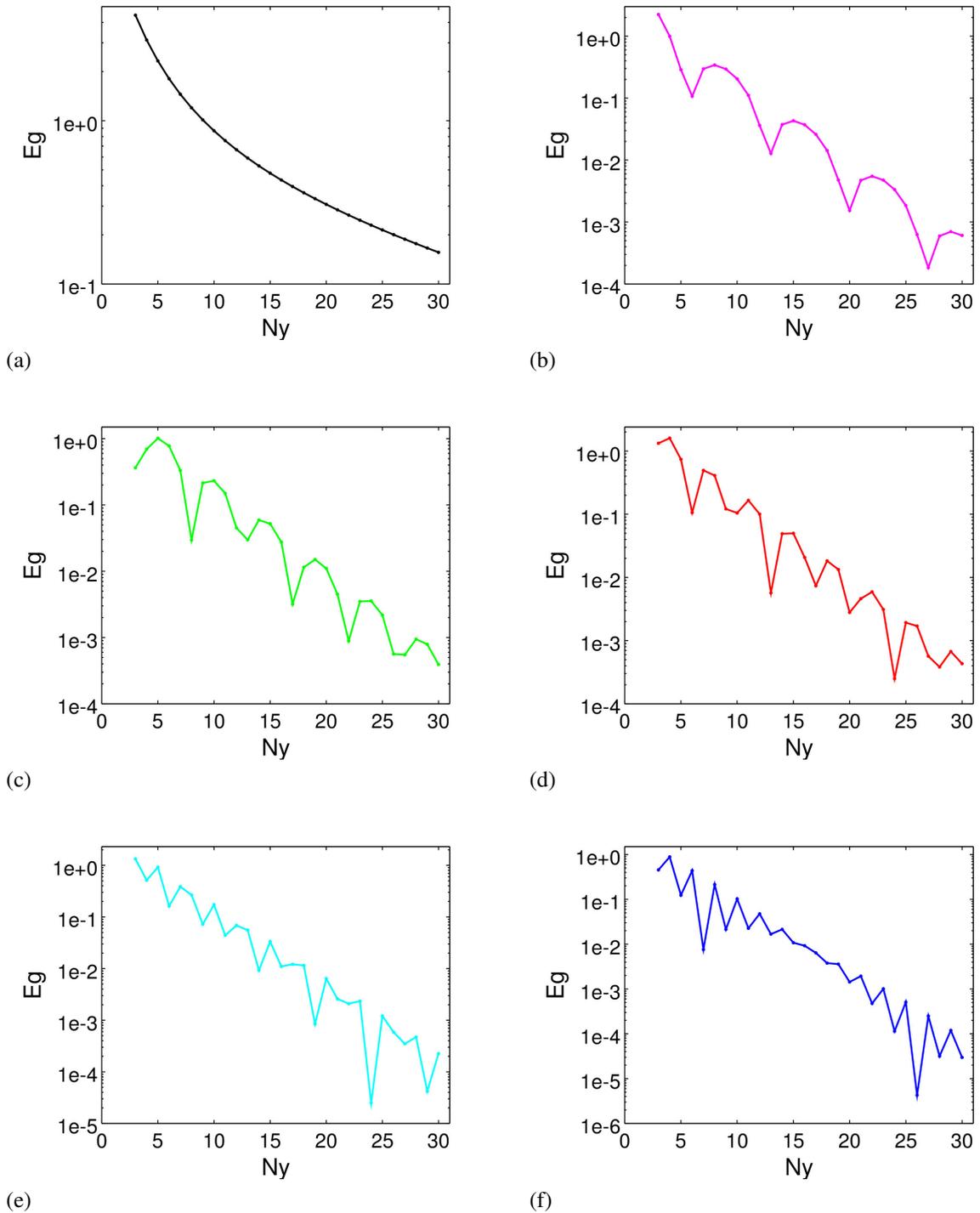


Figura 66: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para oito valores diferentes de Δ ; (a) $\Delta = -2.13$, (b) $\Delta = -1.00$, (c) $\Delta = 0.00$, (d) $\Delta = 1.00$, (e) $\Delta = 3.00$, (f) $\Delta = 4.20$.

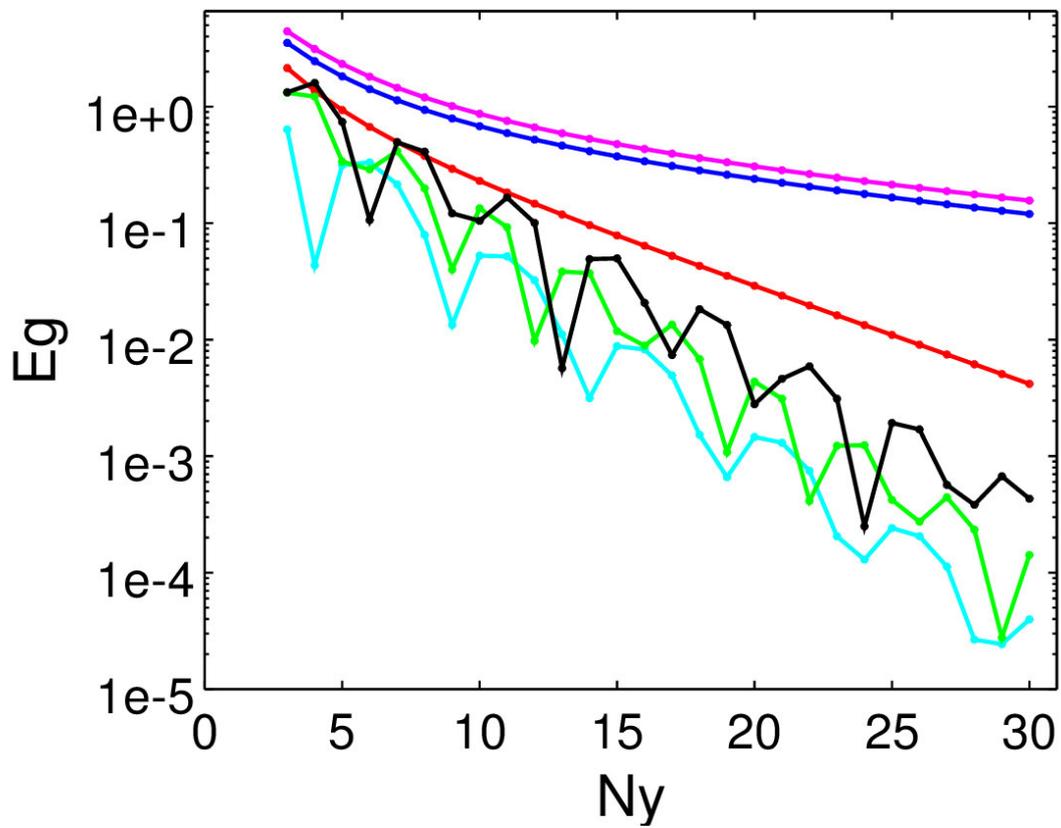


Figura 67: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y .

A Figura 68, nos mostra, a sobreposição das relações de dispersão para um Isolante Topológico com diferentes valores do termo de acoplamento para uma geometria de borda em *zigzag*. A relação de dispersão com a cor azul claro representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre Primeiros vizinhos. A relação de dispersão com a cor verde representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros e segundos vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos ($\Delta = 1.0$, $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.2$ e $B_2 = 0.2$). A relação de dispersão com a cor roxa representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros e segundos vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos ($\Delta = 1.0$, $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.4$ e $B_2 = 0.4$). A relação de dispersão com a cor vermelha representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos, e os parâmetros de interação entre terceiros vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre segundos vizinhos ($\Delta = 1.0$, $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.2$, $B_2 = 0.2$, $A_3 = 0.04$ e $B_3 = 0.04$). A relação de dispersão com a cor preta representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos, e os parâmetros de interação entre terceiros vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre segundos vizinhos ($\Delta = 1.0$, $A = 1.0$, $B = 1.0$, $A_2 = 0.4$, $B_2 = 0.4$, $A_3 = 0.16$ e $B_3 = 0.16$).

Na Figura (68(a e b)) é mostrado a sobreposição das relações de dispersão para um Isolante Topológico com geometria de borda em *zigzag* para diferentes valores dos termos de acoplamento para 60 linhas atômicas. Na subfigura (a), é observado que as interações entre segundos e terceiros vizinhos induzem a um aumento do tamanho do *gap* no *bulk*. Na subfigura (c), é mostrado os estados de bordas para um Isolante Topológico, podemos notar que os estados de borda cruzam toda a região do *gap* no *bulk* na primeira região topológica que possui a condutividade Hall positiva. Na Figura (68(c e d)) é mostrado novamente a sobreposição das relações de dispersão para um Isolante Topológico com diferentes valores do termo de acoplamento para 15 linhas atômicas. Na subfigura (c), é observado um resultado similar ao visto na subfigura (a) onde as interações entre segundos e terceiros vizinhos induzem a um aumento do tamanho do *gap* no *bulk*. Na subfigura (c), é mostrado os estados de bordas para um Isolante Topológico, podemos notar, a existência de um *gap* nos estados de borda, assim, o sistema torna-se um isolante. A medida que a tira se estreita, os estados de borda em cada contorno

começam a se acoplar. Assim, os canais de dispersão para trás (retro-espalhamento) se abrem e, em seguida, a proteção contra a inversão de temporal dos estados de borda é quebrada.

Nas Figuras (69, 70, 71, 72 e 73), é mostrado o comportamento do *gap* nos estados de borda em função do número de linhas atômicas. A descrição das cores das figuras em função da força do termo de perturbação é dada, da seguinte maneira: A cor preta representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre Primeiros vizinhos. A cor vermelha representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros e segundos vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos. A cor azul claro representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros e segundos vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos. A cor verde representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos, e os parâmetros de interação entre terceiros vizinhos equivalem à vinte por cento do valor dos parâmetros de interação entre segundos vizinhos. A cor roxa representa um Isolante Topológico descrito numa fita com Interação entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos, onde os parâmetros de interação entre segundos vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre primeiros vizinhos, e os parâmetros de interação entre terceiros vizinhos equivalem à quarenta por cento do valor dos parâmetros de interação entre segundos vizinhos

Na Figura (69), fixamos os valores para Δ próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase. Na Figura (70), fixamos o valor de Δ para 1.0. Na Figura (71), fixamos o valor de Δ para 2.0. Semelhante ao caso da geometria de borda reta, é observado nestas figuras que as interações entre segundos e terceiros vizinhos aumentam o tamanho do *gap* na borda de um Isolante Topológico. Na Figura (72), fixamos os valores para Δ próximos ao ponto X_1 da zona de Brillouin. Na Figura (73), fixamos o valor de Δ para 6.0. Diferentes dos resultados encontrados para as Figuras (69, 70 e 71), é observado que as interações entre segundos e terceiros vizinhos diminuem o tamanho do *gap* na borda de um Isolante Topológico.

Portanto, notamos que, o efeito causado pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos na borda de um Isolante Topológico, depende tanto dos valores dos parâmetros de acoplamento, quanto da região topológica observada, e da geometria de borda da rede utilizada.

Nas Figuras (74, 75, e 76) é mostrado a comparação entre as duas geometrias de borda, para diferentes valores de Δ . A descrição das cores em função dos parâmetros de interação entre primeiros, segundos e terceiros, foi descrita nas seções anteriores. Na Figura (74), fixamos os valores para Δ próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a

transição de fase. Na Figura (74), fixamos o valor de Δ para 1.0. Na Figura (75), fixamos o valor de Δ para 2.0. É observado, nestas figuras, que em todos os casos com geometria de borda em *zigzag* aumentam o tamanho do *gap* na borda em relação aos casos com geometria de borda reta para um Isolante Topológico.

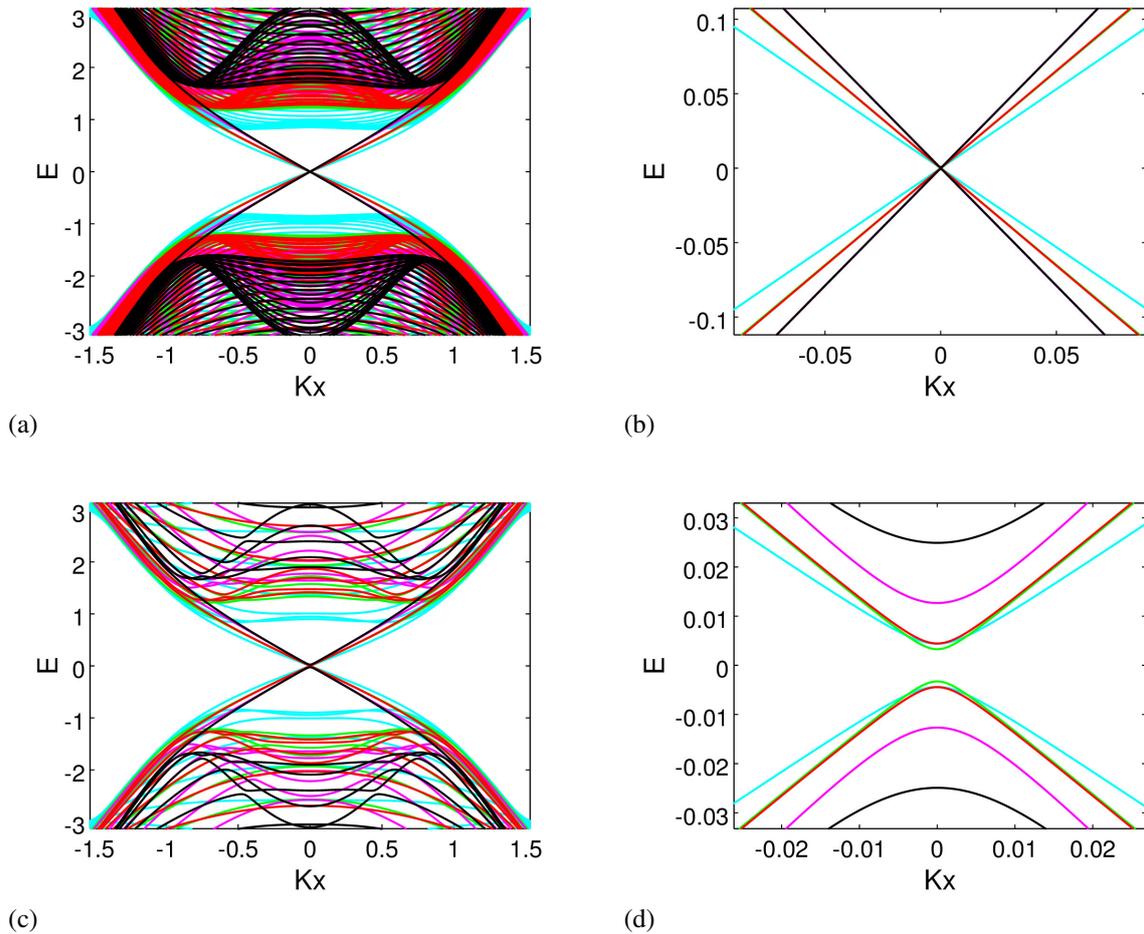
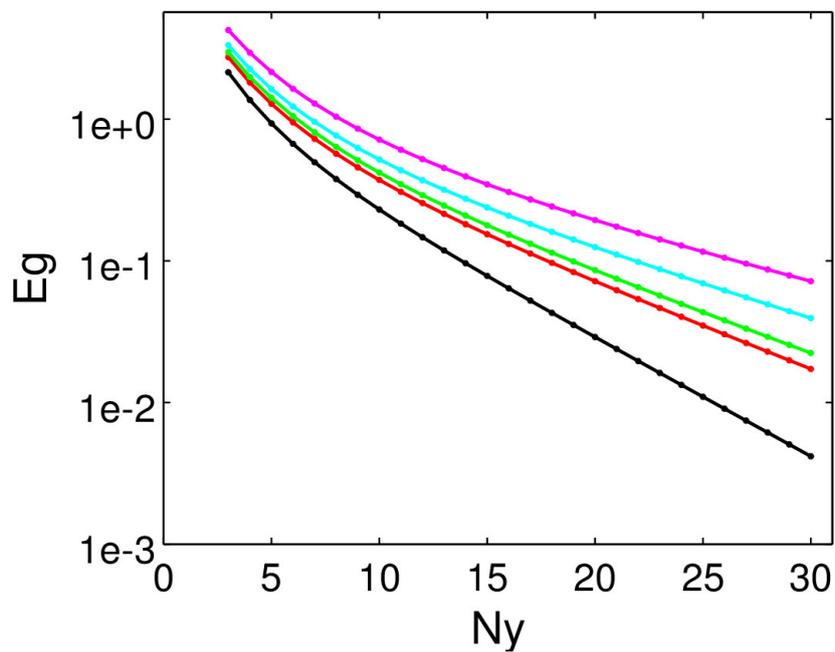
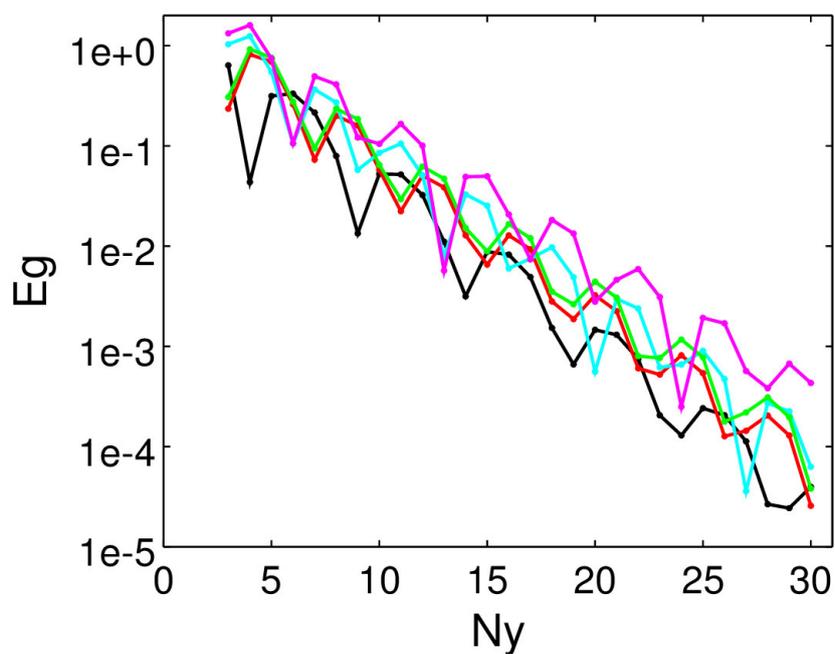


Figura 68: Sobreposição das relações de dispersão da energia, para diferentes valores do termo de acoplamento, com geometria de borda em *zigzag*. (a) e (b) 60 linhas atômicas, (c) e (d) 15 linhas atômicas.



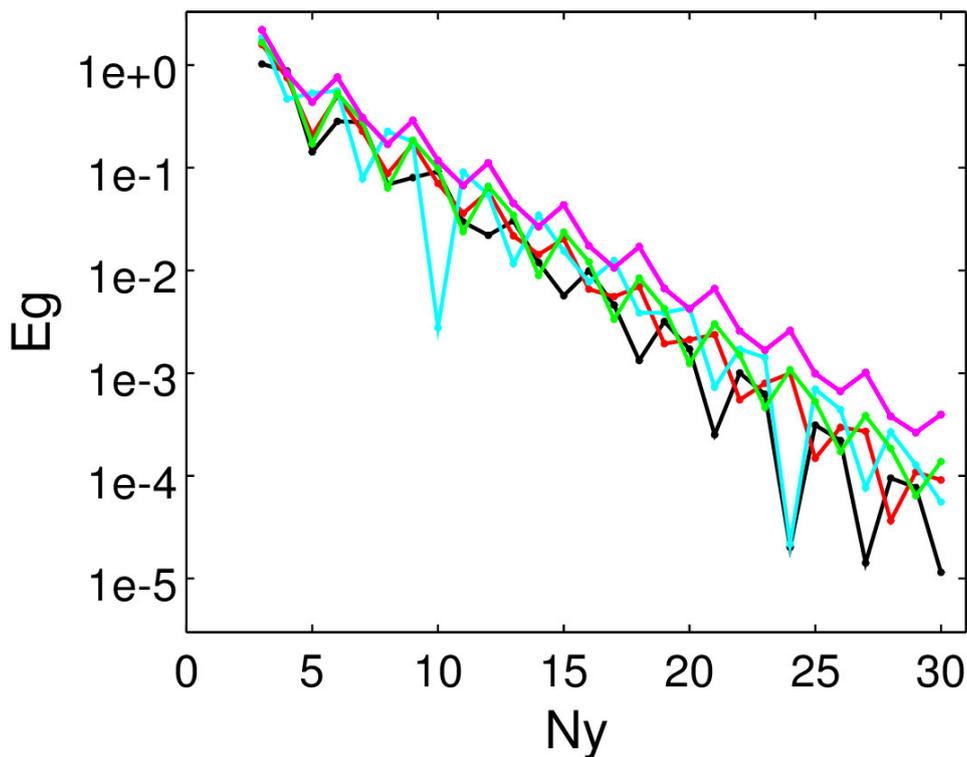
(a)

Figura 69: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos os valores de Δ para valores próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase.



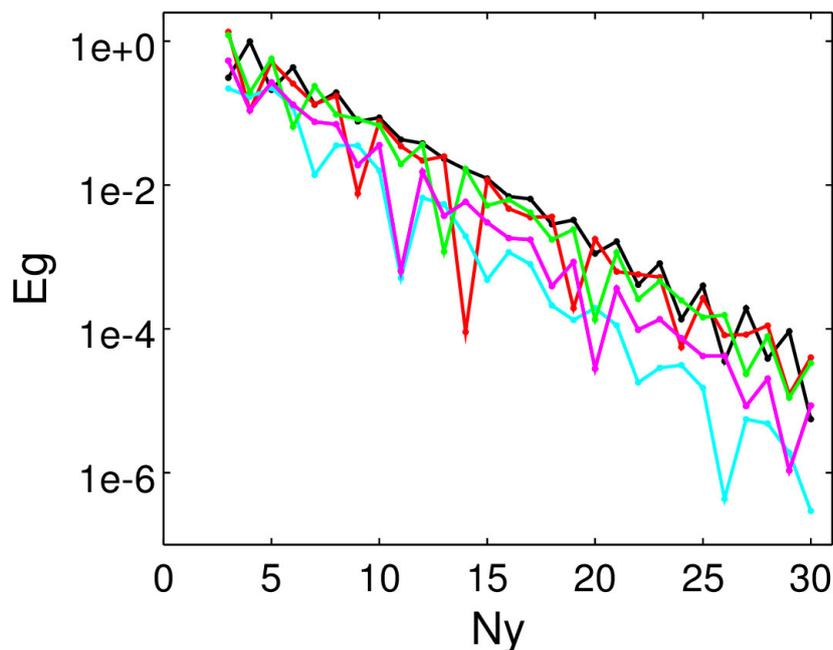
(a)

Figura 70: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 1.0.



(a)

Figura 71: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 2.0.



(a)

Figura 72: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos os valores de Δ para pontos próximos ao ponto X_1 da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase topológica.

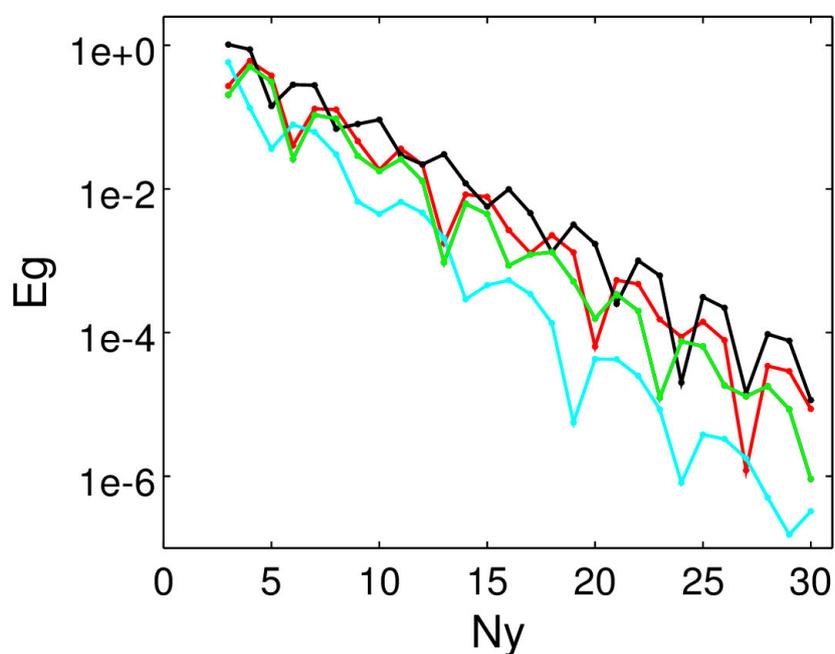


Figura 73: Comportamento da energia do gap nos estados de borda em função do número de linhas atômicas para diferentes valores do termo de perturbação. Fixamos o valor de Δ para 6.0.

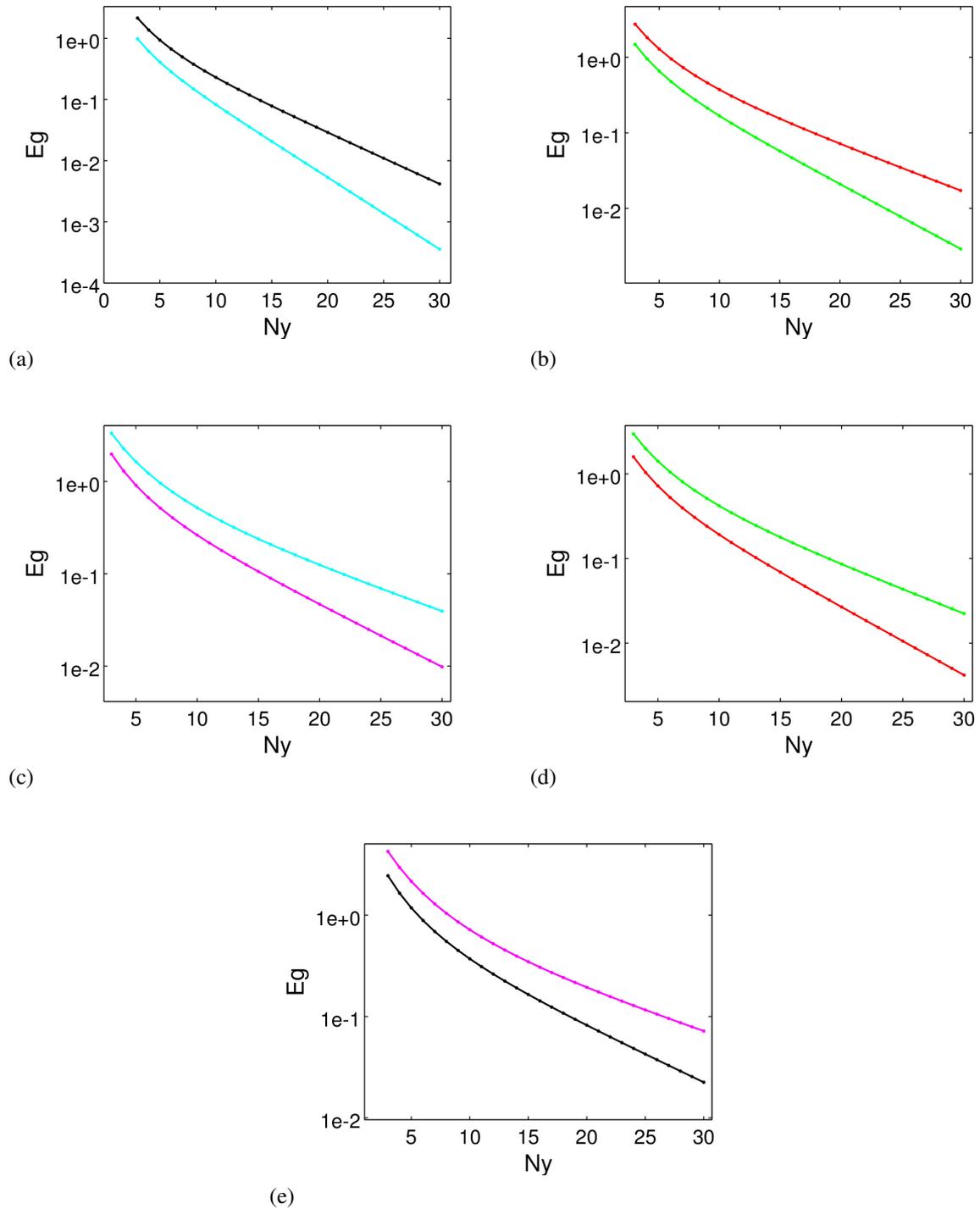


Figura 74: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para diferentes tipos de borda. Fixamos os valores de Δ para valores próximos ao ponto Γ da zona de Brillouin onde ocorre a transição de fase.

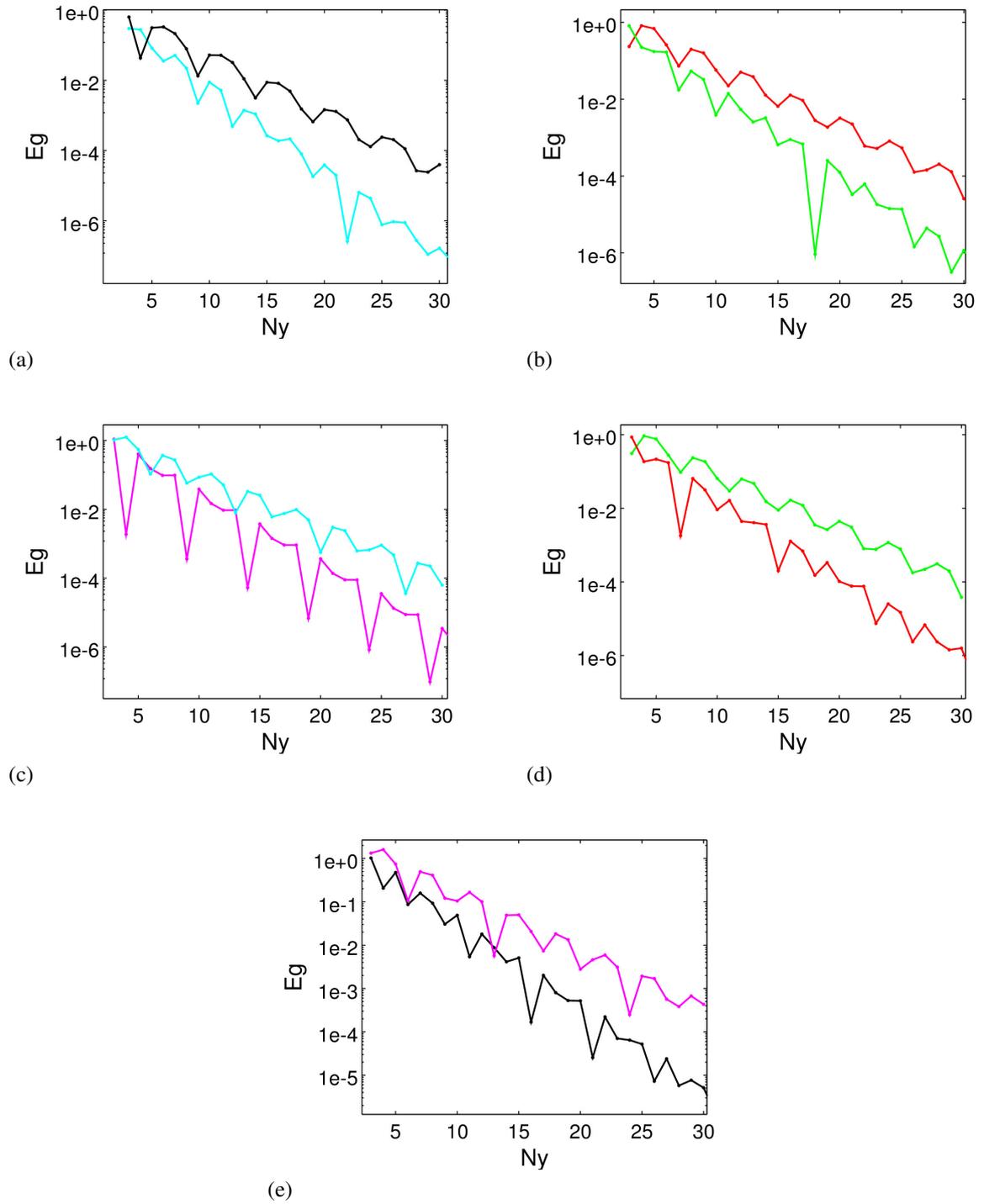


Figura 75: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para diferentes tipos de borda. Fixamos o valor de Δ para 1.0

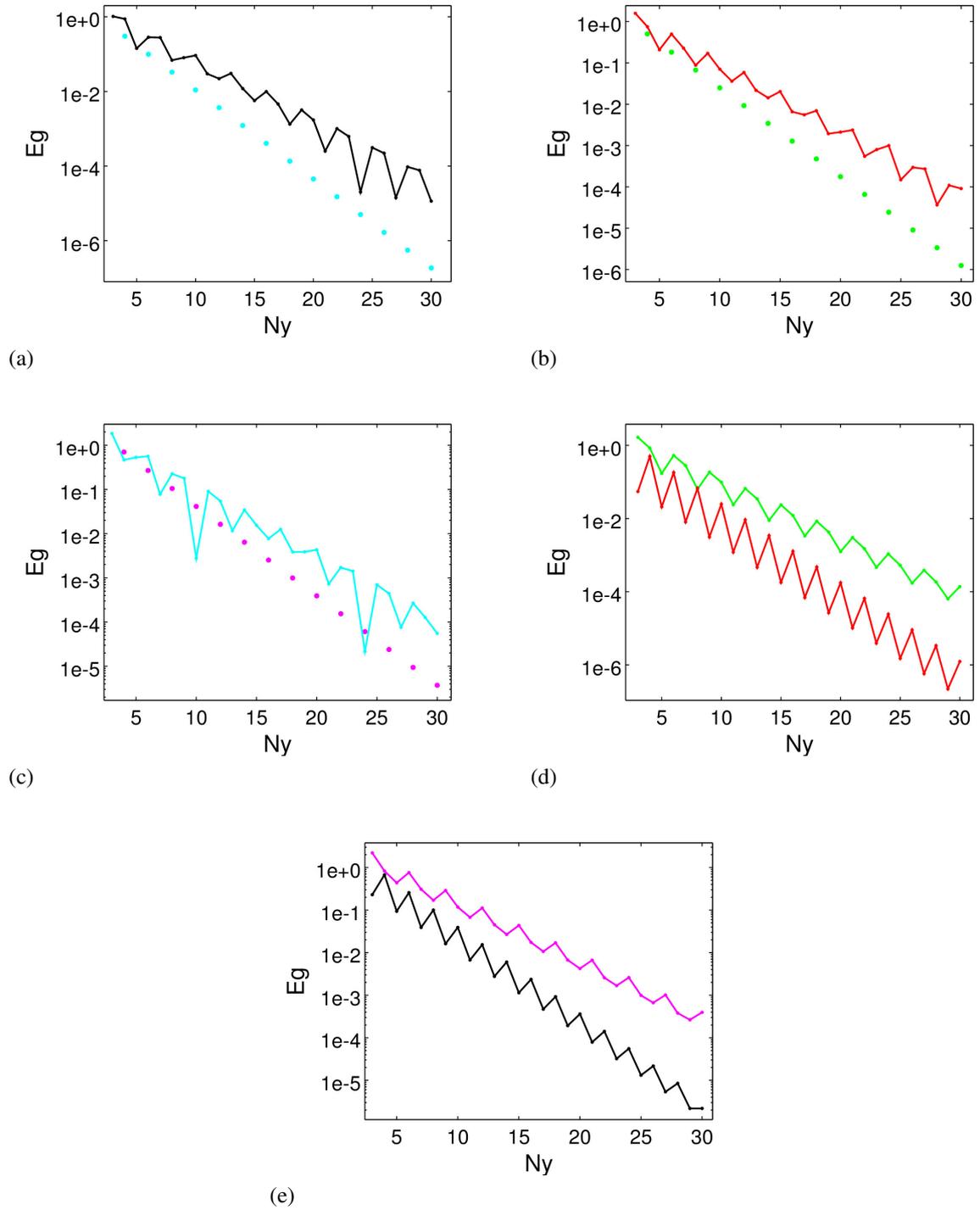


Figura 76: Magnitude do *gap* de energia E_g dos estados de borda em função de N_y , para diferentes tipos de borda. Fixamos o valor de Δ para 2.0

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho foram estudadas as propriedades de um Isolante Topológico Z_2 bi-dimensional descrito para uma rede quadrática, tanto para as rede infinitas quanto para um número limitado de linhas atômicas na direção Oy . A pesquisa tomou como ponto de partida a presença das interações devido a perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos. As consequências dessa perturbação ficam notórias através dos gráficos ao longo do trabalho, que evidenciam a dependência da energia com os parâmetros relacionados a amplitude de *hopping* entre as interações de segundos e terceiros vizinhos.

Nos Capítulos (3 e 4) mostramos que Hamiltoniana *tight-binding* inscrita numa rede quadrada provou ser um modelo válido para estudar Isolantes Topológicos bidimensionais. Onde ela foi aplicada à duas geometrias de borda diferentes, que pertencem a mesma classe topológica denominada Z_2 . Verificamos que, devido ao efeito da perturbação causada pelos termo de acoplamento entre as interações de segundos e terceiros vizinhos, as bandas de energia variam drasticamente em função dos parâmetros de *hopping* relacionados com as interações entre segundos e terceiros vizinhos. Como vimos nas Figuras (), o aumento cadenciado dos parâmetros de acoplamento produzem uma mudança total da energia para todos os estados, modificando assim, a região topológica onde ocorrem as transições de fase do modelo, variando o *range* onde o material se comporta como isolante topológico. Quando comparamos o caso das interações entre primeiros vizinhos, com o caso das interações entre primeiros vizinhos e com o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, observamos que as interações com o termo de acoplamento fornecem muito mais possibilidades da existência de pontos de transição de fase.

No contexto da rede quadrada finita observamos que o efeito das interações entre segundos e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico descrito em uma rede quadrada e com geometria de borda em *zigzag*, é semelhante ao efeito causado pelas interações entre segundos e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico descrito em uma rede quadrada e com geometria de borda reta. Em ambos os casos o efeito causado pelas interações entre segundos e terceiros depende da fase topológica do material. Para $-4(B_2 - B_3) < \Delta < 4(B + B_2 - B_3)$ a perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz o aumento do tamanho *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico, e para $4(B + B_2 - B_3) < \Delta < 8B - 4(B_2 + B_3)$ o efeito perturbação causada pelas interações entre segundos vizinhos induz a diminuição do *gap* no *bulk* para um Isolante Topológico.

O estudo do comportamento dos estados de borda para um isolante topológica Z_2 sob o efeito da perturbação causada pelo termo de acoplamento devido as interações entre se-

gundos e terceiros vizinhos, nos conduziu à seguinte conclusão, para os casos com geometria de borda reta a localização dos modos de borda, é modificada desde do ponto Γ localizado na zona central das estruturas de bandas em $k_x = 0$, até os pontos localizados na zona periférica das estruturas de bandas X_1 em $k_x = \pi$ e X_2 em $k_x = -\pi$. O aumento cadenciado da força dos parâmetros de interação entre segundos e terceiros vizinhos produzem uma mudança nos níveis de energia. Como discutimos anteriormente, nas proximidades do ponto Γ da zona de Brillouin é observado um *shift* nas energias da relação de dispersão para um isolante topológico com somente interações entre primeiros vizinhos. Isto é devido a perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros, aumentando, assim, o tamanho do *gap* no bulk, nas proximidades dos pontos X_1 e X_2 da zona de Brillouin o efeito causada pela perturbação, faz com que o tamanho do *gap* no bulk diminua. Para os casos com geometria de borda em *zigzag*, observamos que um par de modos de borda sem *gapless* sempre aparece na região topologicamente não trivial. Em contraste com o caso da geometria de borda reta, os estados de borda com geometria em *zigzag* sempre aparecem na vizinhança de $k_x = 0$. O aumento cadenciado dos parâmetros de *hopping* relacionados com as interações entre segundos e terceiros vizinhos, produzem uma mudança nos níveis de energia. Como discutimos no Capítulo (4), nas proximidades do ponto Γ da zona de Brillouin são observados *shifts* nas energias da relação de dispersão para um isolante topológico com somente interações entre primeiros vizinhos, isto é devido a perturbação causada pelas interações entre segundos e terceiros, aumentando assim o tamanho do *gap* no *bulk*. Nas proximidades do ponto M da zona de Brillouin, o efeito causado pela perturbação, faz com que o tamanho do *gap* no *bulk* diminua.

No Capítulo (5), analisamos as propriedades do efeito do tamanho finito para um Isolante Topológico. Podemos inferir que o termo de acoplamento devido as interações entre e segundos e terceiros vizinhos, modifica a extensão da fase topológica de um Isolante Topológico para ambas geometrias de borda estudadas. Esse termo de acoplamento é responsável para produzir uma perturbação no modelo de interações com somente primeiros vizinhos de tal forma que, além de variar o tamanho das fases topológicas, como discutido no Capítulo (4), essas perturbações também é responsável por aumentar o valor do *gap* nos estados de borda. Também concluímos que a dependência de N_y e E_g é sensível tanto ao parâmetro Δ do material, quanto ao valor da intensidade dos parâmetros de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos e da geometria da borda.

Portanto, podemos observar, com este trabalho, os efeitos das interações entre segundos e terceiros vizinhos para um Isolante Topológico bidimensional em diferentes geometrias de borda e concluímos que apesar de menos intensas em relação às interações de troca dos primeiros vizinhos, esses tipos de interações se tornam relevantes na tentativa de descrevermos um Isolante Topológico mais realista.

Todas estas propriedades discutidas acima fazem dos Isolantes Topológicos, materiais que podem vir a revolucionar a Ciência e a Tecnologia nos próximos anos. Talvez, as aplicações tecnológicas de curto prazo sejam na eletrônica, onde as possibilidades de aplicações destes materiais são imensas devido as suas propriedades extraordinárias. Inúmeras possibilidades como fluxo de corrente sem dissipação, corrente eletrônica *spin*-polarizada e controle de propriedades eletrônicas com luz colocam estes materiais como fortes candidatos a substituírem o silício nos dispositivos eletrônicos e instigam pesquisadores a criarem novos componentes eletrônicos que possam usufruir de tais propriedades.

Este trabalho foi apresentado em dois eventos Científicos, XXXIII Encontro de Físicos do Norte e Nordeste, com o título *Efeito de Tamanho finito em Isolante Topológicos Z_2 com Interações entre Primeiros Segundos e Terceiros Vizinhos* e no XXXVIII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada. com o título *Finite Size Effect in Z_2 Topological Insulator with Interaction between Seconds Neighbors* na qual esse trabalho foi agraciado com o prêmio *Best Student Poster Award in the area of Materials Physics*. Esse trabalho também foi divulgado na *Physics Letters A - Volume 381, Issues 25–26, 12 July 2017, Pages 2123–2126, DOI: 10.1016/j.physleta.2017.04.027*

APÊNDICE A - DETERMINAÇÃO DOS TERMOS DA HAMILTONIANA *TIGHT BINDING*, DEVIDO AS INTERAÇÕES ENTRE PRIMEIRO, SEGUNDOS E TERCEIROS VIZINHOS

Neste apêndice determinamos a os termos da Hamiltoniana *tight binding* para uma rede quadrada devido às interações entre primeiro, segundos e terceiros vizinhos. Para a construção desta Hamiltoniana *tight binding* vamos levar em conta as interações entre primeiros vizinhos e a perturbação proporcionada pelo termo de acoplamento devido às interações entre segundos e terceiros vizinhos. Para essa demonstração vamos começar com a versão mais simplificada da nossa Hamiltoniana *tight binding* com somente interações entre primeiros vizinhos sem o termo de acoplamento, para ilustrar a forma de fazer o cálculo das energias. Vamos denotar as funções de onda em cada sítio da rede como $\psi_{n,m}$, onde n e m são inteiros. Por enquanto, iniciamos a observação dos primeiros vizinhos, levando em consideração somente as interações do orbital s , que são responsáveis pela seguinte representação matemática:

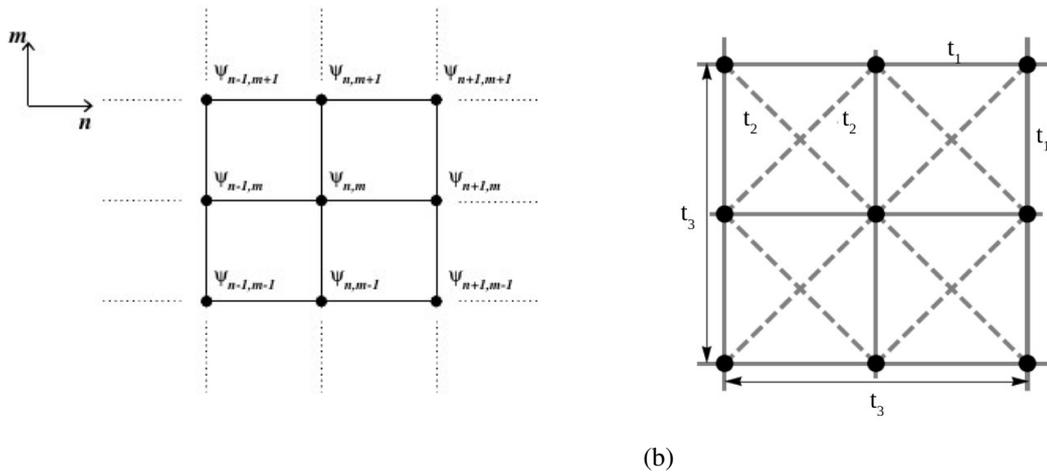


Figura 77: (a) Representação de uma rede quadrada infinita. (b) Representação das interações entre primeiros segundos e terceiros vizinhos numa rede quadrada infinita

$$E(s)\psi_{n,m} = -t_s\psi_{n+1,m} - t_s\psi_{n-1,m} - t_s\psi_{n,m+1} - t_s\psi_{n,m-1}. \quad (\text{A.1})$$

Como a rede é infinita, podemos escrever a função de onda para cada ponto como:

$$\psi_{n,m} = \exp(ik_x n) \exp(ik_y m). \quad (\text{A.2})$$

Em seguida, substituindo (A.1) na equação (A.2), obtemos

$$E(s) \exp(ik_x n) \exp(ik_y m) = -t_s \{ \exp(ik_x(n+a)) \exp(ik_y m) + \exp(ik_x(n-a)) \exp(ik_y m) \\ + \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m+a)) + \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m-a)) \} \quad (\text{A.3})$$

o que resulta em

$$E(s) = -t_s \{ \exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a) + \exp(ik_y a) + \exp(-ik_y a) \} \quad (\text{A.4})$$

fornecendo

$$E(s) = -2t_s \{ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \}. \quad (\text{A.5})$$

Esta é a relação de dispersão para um Isolante Topológico, contemplando somente as interações entre primeiros vizinhos em relação ao orbital s . Por fim, vejamos o termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos em relação ao orbital s . Para isto, tomamos a seguinte relação:

$$E(s) \psi_{n,m} = -t_s^{(2)} \psi_{n+1,m+1} - t_s^{(2)} \psi_{n+1,m-1} - t_s^{(2)} \psi_{n-1,m+1} - t_s^{(2)} \psi_{n-1,m-1} \\ - t_s^{(3)} \psi_{n+2,m} - t_s^{(3)} \psi_{n-2,m} - t_s^{(3)} \psi_{n,m+2} - t_s^{(3)} \psi_{n,m-2}. \quad (\text{A.6})$$

Portanto, ao substituir a equação (A.2) na equação (A.6)

$$E(s) \exp(ik_x n) \exp(ik_y m) = -t_s^{(2)} \{ \exp[ik_x(n+a)] \exp[ik_y(m+a)] + \exp[ik_x(n+a)] \exp[ik_y(m-a)] \\ + \exp[ik_x(n-a)] \exp[ik_y(m+a)] + \exp[ik_x(n-a)] \exp[ik_y(m-a)] \} \\ - t_s^{(3)} \{ \exp(ik_x(n+2a)) \exp(ik_y m) + \exp(ik_x(n-2a)) \exp(ik_y m) \\ + \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m+2a)) + \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m-2a)) \} \quad (\text{A.7})$$

que resulta em

$$E(s) = -t_s^{(2)} \{ \exp(ik_x a) [\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a)] + \exp(-ik_y a) [\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a)] \} \\ - t_s^{(3)} \{ \exp(i2k_x a) + \exp(-i2k_x a) + \exp(i2k_y a) + \exp(-i2k_y a) \}, \quad (\text{A.8})$$

fornecendo

$$E(s) = -4t_s^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} - 2t_s^{(3)} \{ \cos(2k_x a) + \cos(2k_y a) \}. \quad (\text{A.9})$$

Finalmente, das equações (A.5) e (A.9), determinamos a relação de dispersão para o orbital s , dada por

$$E(s) = -2t_s \{ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \} - 4t_s^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} - 2t_s^{(3)} \{ \cos(2k_x a) + \cos(2k_y a) \}. \quad (\text{A.10})$$

Esta é a relação de dispersão para um Isolante Topológico, contemplando as interações entre primeiros vizinhos e o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos para o orbital s .

Vamos observar agora a interação entre os primeiros vizinhos para o orbital p , de forma análoga ao visto para o orbital s . Assim temos,

$$E(p)\psi_{n,m} = -t_p\psi_{n+1,m} - t_p\psi_{n-1,m} - t_p\psi_{n,m+1} - t_p\psi_{n,m-1}. \quad (\text{A.11})$$

Portanto, ao substituir a equação (A.2) na equação (A.11)

$$\begin{aligned} E(p) \exp(ik_x n) \exp(ik_y m) &= -t_p \{ \exp(ik_x(n+a)) \exp(ik_y m) + \exp(ik_x(n-a)) \exp(ik_y m) \\ &+ \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m+a)) + \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m-a)) \}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

o que resulta em

$$E(p) = -t_p \{ \exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a) + \exp(ik_y a) + \exp(-ik_y a) \}, \quad (\text{A.13})$$

fornecendo

$$E(p) = -2t_p \{ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \}. \quad (\text{A.14})$$

Esta é a relação de dispersão para um Isolante Topológico, contemplando somente as interações entre primeiros vizinhos em relação ao orbital p . Novamente, vejamos o termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos, desta vez em relação ao orbital p , analogamente ao caso do orbital s . Para tanto, tomamos a seguinte relação:

$$\begin{aligned} E(p)\psi_{n,m} &= -t_p^{(2)}\psi_{n+1,m+1} - t_p^{(2)}\psi_{n+1,m-1} - t_p^{(2)}\psi_{n-1,m+1} - t_p^{(2)}\psi_{n-1,m-1} \\ &- t_p^{(3)}\psi_{n+2,m} - t_p^{(3)}\psi_{n-2,m} - t_p^{(3)}\psi_{n,m+2} - t_p^{(3)}\psi_{n,m-2}. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Portanto,

$$\begin{aligned} E(p) \exp(ik_x n) \exp(ik_y m) &= -t_p^{(2)} \{ \exp[ik_x(n+a)] \exp[ik_y(m+a)] + \exp[ik_x(n+a)] \exp[ik_y(m-a)] \\ &+ \exp[ik_x(n-a)] \exp[ik_y(m+a)] + \exp[ik_x(n-a)] \exp[ik_y(m-a)] \} \\ &- t_p^{(3)} \{ \exp(ik_x(n+2a)) \exp(ik_y m) + \exp(ik_x(n-2a)) \exp(ik_y m) \} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

$$+ \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m + 2a)) + \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m - 2a))\}$$

que resulta em

$$E(p) = -t_p^{(2)} \{ \exp(ik_x a) [\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a)] + \exp(-ik_y a) [\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a)] \} \\ - t_p^{(3)} \{ \exp(i2k_x a) + \exp(-i2k_x a) + \exp(i2k_y a) + \exp(-i2k_y a) \} \quad (\text{A.17})$$

fornecendo

$$E(p) = -4t_p^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} - 2t_p^{(3)} \{ \cos(2k_x a) + \cos(2k_y a) \} \quad (\text{A.18})$$

Finalmente das equações (A.14) e (A.18), obtemos a relação de dispersão para o orbital p , dada por

$$E(p) = -2t_p \{ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \} - 4t_p^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} - 2t_p^{(3)} \{ \cos(2k_x a) + \cos(2k_y a) \} \quad (\text{A.19})$$

Esta é a relação de dispersão para um Isolante Topológico, contemplando a interação entre primeiros vizinhos e o termo de acoplamento dos segundos vizinhos para o orbital p .

Coletando as contribuições para a relação de dispersão escritas nas equações (A.10) e (A.19) podemos estabelecer a relação de dispersão para os orbitais s e p , como

$$E(s, p) = -2t_s \{ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \} - 2t_p \{ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \} \\ - 4t_s^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} - 4t_p^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} \\ - 2t_s^{(3)} \{ \cos(2k_x a) + \cos(2k_y a) \} - 2t_p^{(3)} \{ \cos(2k_x a) + \cos(2k_y a) \}. \quad (\text{A.20})$$

O cálculo das energias devido a interação *spin*-órbita (relacionado o orbital s com o orbital p), devido as interações entre primeiros vizinhos, é demonstrado pelas seguintes representações matemáticas (como visto na seção (3.2), equação (3.3), o termo de *hopping* que envolve a interação *spin*-órbita depende da orientação do vetor de onda da rede)

$$E(so)\psi_{n,m} = t_1\psi_{n+1,m} - t_1\psi_{n-1,m} + it_1\psi_{n,m+1} - it_1\psi_{n,m-1}. \quad (\text{A.21})$$

Portanto,

$$E(so) \exp(ik_x n) \exp(ik_y m) = t_1 \{ \exp(ik_x(n + a)) \exp(ik_y m) - \exp(ik_x(n - a)) \exp(ik_y m) \\ + i \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m + a)) - i \exp(ik_x n) \exp(ik_y(m - a)) \} \quad (\text{A.22})$$

o que resulta em

$$E(so) = t_1 \{ \exp(ik_x a) - \exp(-ik_x a) + i \exp(ik_y a) - i \exp(-ik_y a) \}, \quad (\text{A.23})$$

fornecendo

$$E(so) = 2it_1 \{ \sin(k_x a) + i \sin(k_y a) \}, \quad (\text{A.24})$$

que é contribuição para a relação de dispersão de um Isolante Topológico, contemplando a interação *spin*-órbita, devido as interações entre primeiros vizinhos relacionando o orbital s com o orbital p .

O cálculo das energias devido a interação *spin*-órbita para as interações de primeiros vizinhos, relacionando o orbital p com o orbital s , é determinado de maneira análoga ao caso demonstrado acima, assim temos:

$$E(so)\psi_{n,m} = -t_1^* \psi_{n+1,m} + t_1^* \psi_{n-1,m} + it_1^* \psi_{n,m+1} - it_1^* \psi_{n,m-1}. \quad (\text{A.25})$$

Portanto,

$$\begin{aligned} E(so) \exp(ik_x n) \exp(ik_y m) = t_1^* \{ & - \exp(ik_x (n+a)) \exp(ik_y m) + \exp(ik_x (n-a)) \exp(ik_y m) \\ & + i \exp(ik_x n) \exp(ik_y (m+a)) - i \exp(ik_x n) \exp(ik_y (m-a)) \} \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

o que resulta em

$$E(so) = t_1^* \{ - \exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a) + i \exp(ik_y a) - i \exp(-ik_y a) \}, \quad (\text{A.27})$$

fornecendo

$$E(so) = 2it_1^* \{ - \sin(k_x a) + i \sin(k_y a) \}, \quad (\text{A.28})$$

que é a relação de dispersão para um Isolante Topológico, contemplando a interação *spin*-órbita, devido as interações entre primeiros vizinhos relacionando o orbital p com o orbital s , onde verificamos que é o hermiteano conjugado da equação (A.24).

Vamos agora determinar o termo de *hopping* responsável pela interação *spin*-órbita, oriundo do termo de acoplamento devido as interações entre segundos vizinhos. Primeiramente, analisamos as interações entre o orbital s em relação ao orbital p . Esse termo de *hopping* pode ser determinado utilizando o mesmo procedimento visto na equação (A.21), assim temos:

$$\begin{aligned} E(so) = \frac{t_2}{\sqrt{2}} [& \exp(ik_y a) (\exp(ik_x a) - \exp(-ik_x a)) + \exp(-ik_y a) (\exp(ik_x a) - \exp(-ik_x a))] \\ & + \frac{it_2}{\sqrt{2}} [\exp(ik_y a) (\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a)) - \exp(-ik_y a) (\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a))] \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

$$+t_3 \{ \exp(i2k_x a) - \exp(-i2k_x a) + i \exp(i2k_y a) - i \exp(-i2k_y a) \}$$

fornecendo

$$E(so) = 2i\sqrt{2}t_2 (\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a)) + 2it_3 \{ \sin(2k_x a) + i \sin(2k_y a) \}. \quad (\text{A.30})$$

Esta é a relação de dispersão para um Isolante Topológico, contemplando a interação *spin*-órbita para o termo de acoplamento entre segundos e terceiros vizinhos, relacionando o orbital s com o orbital p . Por último, vamos determinar o termo correspondente à interação *spin*-órbita devido ao acoplamento entre segundos vizinhos. Desta vez iremos levar em consideração as interações entre o orbital p em relação ao orbital s , de modo semelhante ao caso anterior. Assim temos:

$$\begin{aligned} E(so) &= \frac{t_2^*}{\sqrt{2}} [-\exp(ik_y a) (\exp(ik_x a) - \exp(-ik_x a)) - \exp(-ik_y a) (\exp(ik_x a) - \exp(-ik_x a))] \\ &+ \frac{t_2^*}{\sqrt{2}} [\exp(ik_y a) (\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a)) - \exp(-ik_y a) (\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a))] \\ &+ t_3^* \{ -\exp(i2k_x a) + \exp(-i2k_x a) + i \exp(i2k_y a) - i \exp(-i2k_y a) \}. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

fornecendo

$$E(so) = 2i\sqrt{2}t_2^* (-\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a)) + 2it_3^* \{ -\sin(2k_x a) + i \sin(2k_y a) \}. \quad (\text{A.32})$$

Esta é a relação de dispersão para um Isolante Topológico, contemplando a interação *spin*-órbita para o termo de acoplamento entre segundos vizinhos relacionando o orbital p com o orbital s .

Podemos agora determinar uma Hamiltoniana *tight binding* para um isolante topológico, incluindo, além das interações entre primeiros vizinhos, o termo de acoplamento devido as interações entre segundos e terceiros vizinhos, logo temos:

$$\begin{aligned} H_k &= \sum_k \left(\left(\epsilon_0^{(s)} - 2t_s (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t_s^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2t_s^{(3)} (\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)) \right) a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + (A_1(k) + A_2(k) + A_3(k)) a_{k,s}^\dagger b_{k,p} \right. \\ &+ \left(\epsilon_0^{(p)} - 2t_p (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - 4t_p^{(2)} \{ \cos(k_x a) \cos(k_y a) \} - 2t_p^{(3)} (\cos(2k_x a) + \cos(2k_y a)) \right) b_{k,p}^\dagger b_{k,p} \\ &\quad \left. + (A_1^*(k) + A_2^*(k) + A_3^*(k)) b_{k,p}^\dagger a_{k,s} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

onde $A_1(k) = 2it_1[\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)]$, $A_2(k) = 2i\sqrt{2}t_2 (\sin(k_x a) \cos(k_y a) + i \sin(k_y a) \cos(k_x a))$ e $A_3(k) = 2it_1^3[\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)]$

REFERÊNCIAS

- [1] X. G. Wen, “*Quantum Field Theory of Many-Body Systems - From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons*”, Oxford University Press, (2004).
- [2] P. M. Chaikin and T.C. Lubensky, “*The Quantum Theory of Fields*”, Cambridge University Press, (1995).
- [3] X. L. Qi and S.C. Zhang, “*The quantum spin Hall effect and topological insulators*”, Phys. Today, 63, 33 (2010).
- [4] C. Kane and J. Moore, “*Topological insulators*”, Physics World, february, 32 (2011).
- [5] J. E. Moore, “*The birth of topological insulators*”, Phys. Today, 63, 33 (2010). Nature, 464, 194 (2010).
- [6] D. J. Thoules, “*Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics*”, World Scientific (1998).
- [7] M. Nakahara, “*Spintronics: Fundamentals and applications*”, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).
- [8] M. Nakahara, “*Geometry, topology and physics*”, A. Hilger (1990).
- [9] Berry, M V “*Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*”. Proc. R. Soc. A 392, 45-57 (1984).
- [10] Anilton de B. V. Filho “*Equação de Dirac Modificada para o Estudo de Isolantes Topológicos em Diferentes Tipos de Rede*”.
- [11] M. C. Chang “*Berry phase in solid state physics*”.
- [12] J. J. Sakurai, “*Modern Quantum Mechanics*”, Addison-Wesley Publishing Company Inc. (1994).
- [13] L. Balentine, “*Quantum Mechanics: a Modern Development*”, World scientific Publishing (1998).
- [14] C. Wu, B.A. Bernevig and S.C. Zhang, “*Helical Liquid and the Edge of Quantum Spin Hall Systems*”, Phys. Rev. Lett. 96, 106401 (2006).
- [15] D. J. Thoules, M. Kohmoto, P. Nightingale and M. den Nijs, “*Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential*”, Phys. Rev. Lett. 49, 405 (1982).
- [16] M. Z. Hasan and C.L. Kane, “*Colloquium: Topological insulators*”, Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010).
- [17] C. Wu, B.A. Bernevig and S.C. Zhang, “*Helical Liquid and the Edge of Quantum Spin Hall Systems*”, Phys. Rev. Lett. 96, 106401 (2006).
- [18] C. L. Kane and E.J. Mele, “ *Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect*”, Phys. Rev. Lett. 95, 146802 (2005).

- [19] B. A. Bernevig, T. L. Hughes and S.-C. Zhang, “*Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*”, Science 314, 1757 (2006).
- [20] Shun-Qing Shen “*Topological Insulators Dirac Equation in Condensed Matters* ”
- [21] Anilton de B. V. Filho, Raimundo N. Costa Filho “*Topological insulators with second and third-neighbor couplings*” Phys. Lett. A. (2017)
- [22] Ken-Ichiro Imura, Ai Yamakage, Shijun Mao, Akira Hotta, and Yoshio Kuramoto “*Zigzag Edge Modes in a Z_2 Topological Insulator: Reentrance and Completely Flat Spectrum*”, Phys. Rev. B. 82, 085118 (2010).
- [23] Ken-Ichiro Imura, Ai Yamakage, Shijun Mao and Yoshio Kuramoto “*Flat Edge Modes of Graphene and of Z_2 Topological Insulator* ”, Nanoscale Research Letters 6:358 (2011).
- [24] K. Wakabayashi “*PhD Thesis* ”, University of Tsukuba (2000).
- [25] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe “*Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge*”, J. Phys. Soc. Jpn. 65, 1920 (1996)
- [26] Zhou B., Lu H. Z., Chu R. L., Shen S. Q. and Niu Q. “*Finite Size Effects on Helical Edge in a Quantum Spin-Hall System*”, Phys. Rev. Lett. 101, 246807 (2008).
- [27] C. X. Liu, X. L. Qi, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, Chu R. L., Shen S. Q. and Niu Q. “*Model Hamiltonian for Topological Insulators*”, Phys. Rev. B 82, 045122 (2010).
- [28] J. Linder, T. Yokoyama, A. Sudb “*Anomalous Finite Size Effects on Surface States in the Topological Insulator Bi_2Se_3* ”, Phys. Rev. B 80, 205401 (2009)
- [29] H. Z. Lu, W. Y. Shan, W. Yao, Q. Niu, S. Q. Shen “*Massive Dirac fermions and spin physics in an ultrathin film of topological insulator*”, Phys. Rev. B 81, 115407 (2010).
- [30] W. Y. Shan, H.-Z. Lu, S. Q. Shen, “*Effective continuous model for surface states and thin films of three dimensional topological insulators*”, New J. Phys. 12, 043048 (2010).
- [31] C. X. Liu, H. Zhang, B. Yan, X. L. Qi, T. Frauenheim, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, “*Oscillatory crossover from two dimensional to three dimensional topological insulators*”, Phys. Rev. B 81 041307 (2010).
- [32] K. Park, J. J. Heremans, V. W. Scarola, D. Minic, “*Robustness of topologically protected surface states in layering of $Bi_2Te_3Bi_2Te_3$ thin films*”, Phys. Rev. Lett. 105 186801 (2010).
- [33] O. V. Yazyev, J. E. Moore, S. G. Louie, “*Spin Polarization and Transport of Surface States in the Topological Insulators Bi_2Se_3 and Bi_2Te_3 from First Principles*”, Phys. Rev. Lett. 105 266806 (2010).
- [34] H. Jin, J. H. Song, A. J. Freeman, “*Stability of the Bi_2Se_3 (111) topological state: Electron-phonon and electron-defect scattering*”, Phys. Rev. B 83 125319 (2011).
- [35] J. Chang, L. F. Register, S. K. Banerjee, B. Sahu “*Density functional study of ternary topological insulator thin films*”, Phys. Rev. B 83 235108 (2011).