

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ÁREA DE FÍSICA APLICADA

**Teorias Gerais de Isolantes Topológicos: Um Estudo
Teórico**

Leandro Santos Nunes

**INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS E CIÊNCIAS EXATAS
RIO CLARO**

2026

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“Júlio de Mesquita Filho”
Instituto de Geociências e Ciências Exatas
Câmpus de Rio Claro

LEANDRO SANTOS NUNES

**TEORIAS GERAIS DE
ISOLANTES
TOPOLÓGICOS: UM
ESTUDO TEÓRICO**

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Instituto de Geociências e Ciências Exatas do
Câmpus de Rio Claro, da Universidade
Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”,
como parte dos requisitos para obtenção do
título de Mestre em Física.

Orientador: Luiz Antonio Barreiro

Rio Claro - SP
2026

N972t Nunes, Leandro Santos
Teorias gerais de isolantes topológicos : um estudo
teórico / Leandro Santos Nunes. -- Rio Claro, 2026
137 p. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista
(UNESP), Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Rio
Claro
Orientador: Luiz Antonio Barreiro

1. isolantes topológicos. 2. efeito Hall. 3. teoria
topológica de bandas. 4. teoria topológica de campos. 5.
invariantes topológicos. I. Título.

IMPACTO POTENCIAL DESTA PESQUISA

Esse trabalho tem enorme potencial científico por estudar vários pontos relevantes no que trata das teorias gerais dos chamados isolantes topológicos que são materiais extremamente estudados atualmente e que tiveram suas teorias recentemente iniciadas. Dessa maneira serve como um instrumento de uso para estudo teórico e de referência por outros profissionais de física em seus estudos.

POTENTIAL IMPACT OF THIS RESEARCH

This work holds immense scientific potential, as it examines several key aspects of the general theories surrounding so-called topological insulators - materials that are currently the subject of extensive research and whose theoretical framework has only recently been established. Consequently, it serves as a valuable tool for theoretical study and a reference for other physics professionals in their own research.

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“Júlio de Mesquita Filho”
Instituto de Geociências e Ciências Exatas
Câmpus de Rio Claro

LEANDRO SANTOS NUNES

TEORIAS GERAIS DE ISOLANTES TOPOLÓGICOS: UM ESTUDO TEÓRICO

Dissertação de Mestrado apresentada
ao Instituto de Geociências e Ciências
Exatas do Câmpus de Rio Claro, da
Universidade Estadual Paulista “Júlio de
Mesquita Filho”, como parte dos
requisitos para obtenção do título de
Mestre em Física.

Comissão Examinadora

Prof. Dr. LUIZ ANTONIO BARREIRO
IGCE / UNESP/Rio Claro (SP)

Prof. Dr. FILIPE MATUSALÉM DE SOUZA
ITA / São José dos Campos (SP)

Prof. Dr. MAKOTO YOSHIDA
IGCE / UNESP/Rio Claro (SP)

Conceito: Aprovado.

Rio Claro (SP), 23 de julho de 2026.

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a minha mãe Magda e avó Ana que fizeram de tudo para eu conseguir alcançar meus sonhos acadêmicos. Também dedico a minha namorada, Vanessa Natali, a qual estive presente em todos os momentos de dificuldade me ajudando. Quero também dedicar ao resto da minha família que sempre me ajudou da forma que puderam.

AGRADECIMENTOS

Começo essa seção agradecendo a Unesp que nesses oito anos foi minha casa, seja física (moradia e campus), seja virtual durante a pandemia. A Unesp contribuiu de forma relevante na minha formação acadêmica. Agradeço também ao meu orientador porque sempre quando possível de maneira prestativa e calma me auxiliou, instruiu e sanou dúvidas.

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

EPIGRAFE

“Veni, vidi, vici.” (Júlio César, 47 a.C.).

“Tengo miedo de la oscuridad

Porque soy otra piedra en la arena

Que algún día desaparecerá

Y la paz romperá mi' cadenas.” (Milo J, 2025).

RESUMO

Motivada pelos avanços recentes na área de materiais quânticos, esta dissertação apresenta um estudo teórico dos principais fundamentos físicos e matemáticos dos isolantes topológicos. Inicialmente, são revisados conceitos essenciais da física do estado sólido, como estrutura de bandas, teorema de Bloch, zona de Brillouin e simetria de reversão temporal, indispensáveis à compreensão das propriedades eletrônicas desses materiais. Em seguida, discutem-se diferentes manifestações do efeito Hall — clássico, quântico inteiro, anômalo e quântico de spin — como etapas conceituais relevantes para a compreensão da emergência de fases topológicas da matéria. O trabalho dedica especial atenção à teoria topológica de bandas, com ênfase em grandezas geométricas e invariantes topológicos, como a fase e a curvatura de Berry, o número de Chern e o invariante Z_2 , bem como à correspondência bulk-boundary e à robustez dos estados de borda. Por fim, são revisados elementos da teoria topológica de campos e modelos teóricos empregados na descrição de isolantes topológicos bidimensionais e tridimensionais. Desse modo, a dissertação oferece uma síntese teórica sistematizada dos fundamentos que descrevem as propriedades eletrônicas e topológicas desses materiais.

Palavras-chave: isolantes topológicos; efeito Hall; teoria topológica de bandas; teoria topológica de campos; invariante topológicos.

ABSTRACT

Motivated by recent advances in the field of quantum materials, this dissertation presents a theoretical study of the main physical and mathematical foundations of topological insulators. First, essential concepts of solid-state physics are reviewed, including band structure, Bloch's theorem, the Brillouin zone, and time-reversal symmetry, all of which are indispensable for understanding the electronic properties of these materials. Different manifestations of the Hall effect — classical, integer quantum, anomalous, and quantum spin Hall — are then discussed as relevant conceptual steps toward understanding the emergence of topological phases of matter. Special attention is given to topological band theory, with emphasis on geometric quantities and topological invariants such as the Berry phase and Berry curvature, the Chern number, and the Z_2 invariant, as well as on the bulk-boundary correspondence and the robustness of edge states. Finally, elements of topological field theory and theoretical models employed in the description of two-dimensional and three-dimensional topological insulators are reviewed. In this way, the dissertation provides a systematic theoretical synthesis of the foundations underlying the electronic and topological properties of these materials.

Keywords: topological insulators; Hall effect; topological band theory; topological field theory; topological invariants.

Title: General theories of topological insulator: a theoretical study.

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ASO	Acoplamento spin-órbita
BHZ	Bernevig-Hughes-Zhang
EH	Efeito Hall clássico
EHA	Efeito Hall anômalo
EHQA	Efeito Hall quântico anômalo
EHQI	Efeito Hall quântico inteiro
EHQS	Efeito Hall quântico de spin
EHS	Efeito Hall de spin
IHQA	Isolante Hall quântico anômalo
IHQS	Isolante Hall quântico de spin
IT	Isolante topológico
KM	Kane-Mele
PRT	Polarização de reversão temporal
SRT	Simetria de reversão temporal
TKNN	Thouless-Kohmoto-Nightingale-den Nijs
TRIM	Time reversal invariant momenta
TTB	Teoria topológica de bandas
TTC	Teoria topológica de campos
ZB	Zona de Brillouin

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	12
2	REFERENCIAL TEÓRICO	18
2.1	Introdução	18
2.2	Um breve (e incompleto) resumo de teoria de bandas.....	19
2.2.1	<i>Teorema e Hamiltoniano de Bloch</i>	19
2.2.2	<i>Rede recíproca e Zona de Brillouin.....</i>	21
2.2.3	<i>Isolantes, condutores e semicondutores.....</i>	24
2.3	Simetria de Reversão Temporal.....	25
2.4	Um pouco de Topologia	30
2.4.1	<i>Aspectos de Topologia geral.....</i>	30
2.5	Topologia e matéria condensada	32
2.5.1	<i>Efeito Hall e alguns modelos de interesse</i>	32
2.5.2	<i>Efeito Hall Clássico (EH).....</i>	32
2.5.3	<i>Níveis de Landau</i>	35
2.5.4	<i>Efeito Hall Anômalo (EHA).....</i>	37
2.5.5	<i>Efeito Hall Quântico Inteiro (EHQI) e modelo de Haldane</i>	38
2.5.6	<i>Efeito Hall Quântico de Spin (EHQS) e modelo de Kane-Mele.....</i>	42
3	TEORIAS GERAIS DOS ISOLANTES TOPOLÓGICOS.....	45
3.1	Topologia em Mecânica Quântica e Teoria Topológica de Bandas	
(TTB)	45	
3.1.1	<i>Teoria Topológica de Bandas (TTB).....</i>	45
3.1.1.1	<i>Fase de Berry</i>	45
3.1.1.2	<i>Descrição discreta</i>	46
3.1.1.3	<i>Descrição continua</i>	47
3.1.1.4	<i>Fórmula TKNN e Número de Chern.....</i>	52
3.1.1.5	<i>Estados de borda e correspondência bulk-boundary.....</i>	57
3.1.1.6	<i>Polarização elétrica e pump de corrente.....</i>	58
3.1.1.7	<i>Topologia das bandas $\mathbb{Z}_2$.....</i>	60
3.1.2	<i>Teoria Topológica de Campos (TTC)</i>	69
3.1.2.1	<i>Teoria Básica</i>	69
3.1.2.1.1	<i>Teoria de Chern-Simons em (2+1) D</i>	69
3.1.2.1.2	<i>Teoria de Chern-Simons em (3+1) D</i>	71
3.1.3	<i>Isolantes Topológicos.....</i>	74
3.1.3.1	<i>Isolantes 2-D.....</i>	74
3.1.3.1.1	<i>Férmions de Dirac e a conexão com baixas energias</i>	75
3.1.3.1.2	<i>Modelo de Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ).....</i>	76
3.1.3.1.3	<i>Isolante de Chern ou isolante Hall quântico anômalo (IHQA).....</i>	78
3.1.3.1.4	<i>Isolante topológico ($\mathbb{Z}_2$ ou isolante Hall quântico de spin (ISHQ)).....</i>	82

3.1.3.1.5	Transição de fase entre o isolante de Chern e o IHQS.....	85
3.1.3.2	Isolantes 3-D.....	87
3.1.3.2.1	Isolante 3D fraco.....	87
3.1.3.2.2	Isolante 3D forte.....	89
3.1.3.3	Exemplos de ITs reais.....	90
3.1.3.3.1	Poços de <i>CdTe/HgTe/CdTe</i>	90
3.1.3.3.2	Seleneto de bismuto (Bi_2Se_3), telureto de bismuto (Bi_2Te_3) e telureto de antimônio (Sb_2Te_3).....	91
4	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	96
	REFERÊNCIAS.....	100
	APÊNDICE A - TRANSIÇÕES DE FASE E QUEBRAS DE SIMETRIAS	107
	APÊNDICE B - BANDAS DE ENERGIA	109
	APÊNDICE C - OUTRAS TRANSFORMAÇÕES DISCRETAS IMPORTANTES ...	114
	APÊNDICE D - HAMILTONIANO DE UMA PARTÍCULA EM UM CAMPO MAGNÉTICO	118
	APÊNDICE E - ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA E EQUAÇÃO DE DIRAC.....	125
	APÊNDICE F - UM TIPO DE EFEITO HALL DE INTERESSE	129
	APÊNDICE G - TEOREMA DE KRAMER	131
	APÊNDICE H - TRANSPORTE PARALELO	133
	APÊNDICE I - TEOREMA DE BLOCH	135
	APÊNDICE J - ARTIGO DE SUPERCONDUTIVIDADE.....	137

1 INTRODUÇÃO

Esta dissertação de mestrado surge da necessidade de sintetizar os aspectos cruciais das teorias gerais que caracterizam os **isolantes topológicos (ITs)**, frequentemente dispersos na literatura. Nesse contexto, o objetivo é investigar os conceitos centrais que fundamentam essas fases, procurando apresentá-los, sempre que possível, de forma didática e acessível.

A história dos isolantes topológicos tem origem nos estudos do **efeito Hall clássico (EH)**, descoberto em 1879 por Edwin Hall. Esse efeito consiste no surgimento de uma **diferença de potencial transversal** em um condutor quando se aplica um campo magnético na direção z , perpendicular a uma corrente elétrica longitudinal. A razão entre essa tensão transversal e a corrente elétrica é a **resistência Hall**, uma grandeza fundamental na caracterização dos sistemas tratados nesse trabalho.

Nas décadas seguintes, inúmeros avanços ampliaram o conhecimento nesse campo de pesquisa. Já em 1881, E. Hall observou o que viria a ser conhecido como **efeito Hall anômalo (EHA)**. Esse fenômeno ocorre na ausência de campo magnético externo, sendo decorrente da magnetização intrínseca do material, M_z , bem como efeitos eletrônicos ligados à estrutura de bandas e ao **acoplamento spin-órbita (ASO)** que dão origem à **corrente Hall anômala**.

Na década de 1950, Landau e Ginzburg desenvolveram sua teoria fenomenológica sobre as transições de fase da matéria que se baseia na caracterização das fases a partir de **parâmetros de ordem locais**. Esses parâmetros são **grandezas físicas** como a magnetização ou a polarização elétrica, cujo comportamento nas proximidades da transição de fase pode ser caracterizado por expoentes críticos. Nessa abordagem, a energia livre é expandida em série de potências do parâmetro de ordem, sendo mantidos somente termos condizentes com a simetria particular do problema (YEOMANS, 1992).

Sob essa perspectiva, a teoria de Landau caracteriza **diferentes estados da matéria** por meio dos valores assumidos pelo parâmetro de ordem que se manifesta como não nulo para fases ordenadas e nulo para desordenadas. Assim, podem ser verificadas mudanças qualitativas e quantitativas entre essas fases (ver apêndice A).

No início da década de 1980, von Klitzing, Dorda e Pepper (1980) descobriram o **efeito Hall Quântico Inteiro (EHQI)** em gases quânticos bidimensionais em

dispositivos do tipo MOSFET de silício sob baixíssimas temperaturas e fortes campos magnéticos. Posteriormente Tsui, Stormer e Gossard (1982) estudando experimentalmente heteroestruturas de $GaAs/Al_x Ga_{1-x}As$ descobriram o efeito Hall quântico fracionário extremamente importante na investigação das propriedades dos efeitos Hall quânticos.

O EHQI é uma variante do efeito Hall clássico, no qual surgem **estados propagantes nas bordas** que possuem órbitas abertas chamadas de **órbitas saltitantes** (skipping orbits) que colidem com as bordas físicas e saltam para frente. Por outro lado, **os estados de bulk realizam órbitas fechadas (ciclotrônicas)** e ficam localizados (descrição semiclássica). A quantização dessas órbitas dá origem a níveis discretos de energia conhecidos como **níveis de Landau**.

Laughlin (1981) propôs seu famoso argumento (de mesmo nome) que traz uma explicação para a **quantização da condutividade Hall** como consequência da **invariância de gauge e a existência de um gap (intervalo) de mobilidade**. Ele fez um experimento mental (gedanken experiment) de uma fita 2D metálica em forma de um toro (torus) de comprimento L e que é atravessada em todos os pontos relativos por um campo magnético H_0 normal à sua superfície. Ao passar um fluxo magnético quântico pelo comprimento do cilindro apesar do potencial vetorial mudar o Hamiltoniano retorna ao equivalente inicial e há o transporte de carga líquida pelas bordas do material.

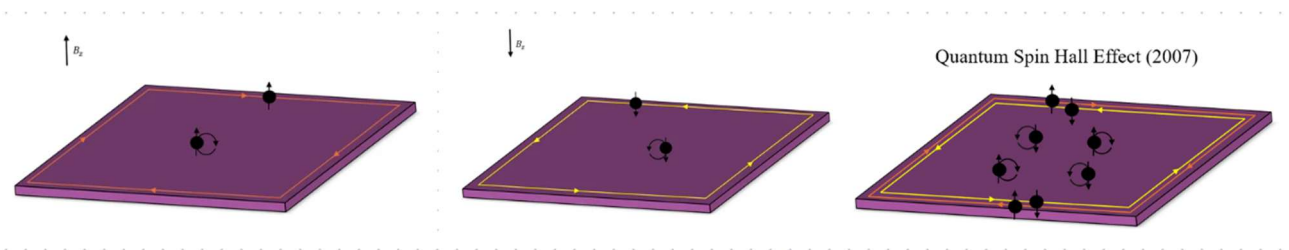
Ainda na década de 1980 Thouless et al. (1982) deram uma explicação para a quantização do EHQI, e mostraram que ela está diretamente relacionada a um **invariante topológico, o invariante TKNN**. O TKNN é chamado de primeiro **número de Chern**. Além disso, Thouless procurou dar uma explicação para o pump (bombeamento) de corrente nesses materiais, o **bombeamento de corrente de Thouless**, segundo o qual o transporte de cargas é quantizado devido puramente à topologia do ciclo.

Em contraste com a abordagem clássica de transições de fase, **sistemas topológicos podem ter as mesmas simetrias e mesmo assim apresentar propriedades físicas diferentes**. No contexto da teoria de Landau, um sistema ferromagnético, por exemplo, é caracterizado pela magnetização M e de forma espontânea quebra a simetria de rotação de spin durante a mudança de fase paramagnética-ferromagnética abaixo da temperatura de Curie, indo de um estado desordenado ($M = 0$) a um ordenado ($M \neq 0$). O efeito Hall quântico inteiro rompeu

com esse paradigma já que sua caracterização não depende de um parâmetro de ordem local. Em vez disso, as fases topológicas são caracterizadas por **invariantes topológicos** que são definidos a partir de **propriedades geométricas das funções de onda quânticas e da topologia global do espaço de estados**.

Na metade da década de 2000 Kane e Mele (2005) mostraram teoricamente que o recém-descoberto grafeno poderia, em baixas temperaturas e a partir do efeito de **acoplamento spin-órbita**, passar de um estado semimetálico para um novo estado da matéria que chamaram de **isolante Hall quântico de spin (IHQS)**. Esse estado mantém a **simetria de reversão temporal (SRT)** preservada e pode ser visto como duas cópias do efeito Hall quântico inteiro, tal que os **elétrons helicoidais das bordas** com diferentes spins se movem em sentidos opostos.

Figura 1: Representação esquemática dos estados de borda no lado esquerdo efeito Hall quântico com campo magnético positivo, no centro efeito Hall quântico com campo magnético negativo. Do lado direito efeito Hall quântico de spin com pares de estados de Kramer protegidos pela SRT.



Fonte: Produção própria do autor.

Para a classe de materiais que respeitam a simetria de reversão temporal quem os caracteriza é o **invariante Z_2** introduzido primeiramente por Kane e Mele (2005) que em 2D é delimitado por quatro pontos nos quais o Hamiltoniano comuta com a SRT chamados de **time reversal invariant momenta (TRIMs)** e em 3D por oito pontos TRIMs. Os **invariantes de Chern e Z_2** na chamada teoria topológica de bandas - formulação discreta de isolantes topológicos - caracterizam as diferentes fases topológicas. Em abordagens recentes baseadas na **teoria de Landau estendida** esses invariantes são interpretados como **parâmetros de ordem topológicos** para esses sistemas **diferindo conceitualmente dos parâmetros de ordem locais da teoria de Landau**.

Em 2006 Shou-Cheng Zhang e seu grupo (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006) previram teoricamente que os **poços quânticos de $HgTe$** devido a suas propriedades poderiam apresentar o **efeito Hall quântico de spin**. Essa previsão se confirmou experimentalmente com o trabalho de König et al. (2007) para várias

larguras dos poços quânticos de *HgTe* demonstrando assim o primeiro isolante topológico descoberto. Dessa forma foi desenvolvida a **teoria topológica de bandas (TTB)**, a partir da construção dos invariantes topológicos (Chern e Z_2), que é uma das teorias gerais que descrevem as propriedades dos isolantes topológicos e teve sua formulação construída principalmente após 2005 com a descoberta do grafeno.

De maneira paralela a essas descobertas Zhang e Hu (2001) buscaram generalizar o estado Hall quântico 2D para uma versão 4D com a simetria de reversão temporal preservada e com um invariante topológico inteiro como pontua Ando (2013). Poucos anos após Bernevig et al. (2002) construíram a teoria de campos efetiva para esse sistema. Posteriormente a introdução da topologia Z_2 foi demonstrado que sistemas 2D e 3D podem ser deduzidos do modelo 4D. A **teoria topológica de campos (TTC)** se mostrou importante para descrever as propriedades e respostas eletromagnéticas dos ITs (Qi et al., 2008).

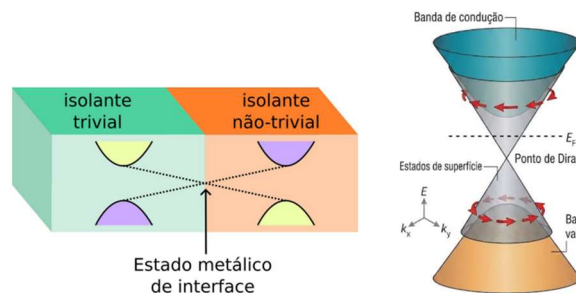
Os materiais topológicos são chamados assim por possuírem uma **estrutura de bandas não trivial** e apresentarem certas **características de robustez que são insensíveis a deformações contínuas**. Assim suas características são independentes de aspectos geométricos suaves, ou seja, são **invariantes sob deformações** que não alterem o Hamiltoniano do material preservando o gap entre as bandas e as simetrias relevantes do sistema (Qi; ZHANG, 2011).

Os isolantes topológicos são materiais que possuem o **bulk isolante e as bordas condutoras**, além de **inversão nas bandas de energia**, existência de um **gap de separação** e em muitos dispersão aproximadamente linear para os estados de borda. Um aspecto vital que está ligado a existência desses materiais é a presença do **acoplamento spin-órbita (ASO)** que atua como um campo magnético interno e é responsável por abrir o gap em diversas classes de isolantes topológicos.

Todos os avanços citados acima demonstram que as fases topológicas da matéria, mais especificamente os isolantes topológicos inauguraram uma nova era no estudo das fases da matéria. A classificação tradicional das fases da matéria baseada na teoria de Landau dos parâmetros de ordem locais não é suficiente para caracterizar completamente essa classe de materiais. Nos isolantes topológicos, a fase é caracterizada a partir do invariante topológico calculado a partir da estrutura eletrônica do sistema. Nesse campo, muito avanço foi feito nas últimas décadas, entretanto os fundamentos teóricos de pesquisa permanecem dispersos e muitas vezes são apresentados de forma pouco acessível. Nesse contexto surge esta dissertação para

sistematizar algumas das principais ideias e apresentar uma visão didática das principais teorias que fundamentam os ITs.

Figura 2: A esquerda representação esquemática da interface entre um isolante trivial e um isolante topológico com as respectivas bandas de valência (roxo) e condução (amarelo) na ordem que pertencem nesses sistemas. Do lado direito representação esquemática de um cone de Dirac formado pela estrutura de bandas de um isolante topológico com a representação da energia das bandas de valência (laranja) e condução (azul) e dos estados de superfície (transparentes), em vermelho estão as setas representando os estados de spin helicoidal.



Fonte: Figura do lado esquerdo FAZZIO (2025, p. 3), já na direita elaborado pelo próprio autor.

Nosso problema de pesquisa partiu da seguinte pergunta: “O que é um isolante topológico?”. A partir disso buscamos entender o que caracteriza esses materiais, o que motivou a busca por eles e como está o estado da arte no cenário contemporâneo. Além disso, buscamos entender como a topologia e a matéria condensada se encontram nesse campo de estudo.

O objetivo geral desse trabalho é estudar de maneira aprofundada e didática as teorias gerais que caracterizam os chamados isolantes topológicos. Já os objetivos específicos consistem em ilustrar de forma didática os conceitos e modelos motivadores por trás dos isolantes topológicos, mostrar alguns modelos de isolantes topológicos e tratar de alguns isolantes topológicos reais.

O estudo desses materiais é importante porque eles revolucionaram o conhecimento sobre o que são fases da matéria ao se estabelecer uma grande conexão entre a mecânica quântica, estado sólido e a topologia. Além disso, apesar de ser uma área de desenvolvimento extremamente recente, os possíveis resultados que esses materiais podem proporcionar a diversas áreas dos setores de energia, computação quântica (LAHTINEN; PACHOS, 2017; LOWRANCE, 2019; STERN; LINDNER, 2013), spintrônica e outras tantas mais.

O capítulo 2 apresenta uma breve construção de tópicos importantes, que são

a base do que iremos tratar, como o teorema de Bloch, a Zona de Brillouin (ZB), as diferenças entre isolantes e condutores. Em seguida, discute-se sobre a simetria de reversão temporal, e como em sistemas periódicos que a obedecem, estes possuem pontos especiais TRIMs e a sua importância.

Ainda nesse capítulo é discutido um pouco sobre topologia geral e segue-se com a aplicação dela em matéria condensada. Nesse ponto também são apresentados os principais conceitos de alguns protótipos de ITs, que são algumas variantes do efeito Hall e os chamados modelos de Haldane, Kane-Mele, apresentando na medida do possível uma revisão da literatura.

O capítulo 3 aborda as teorias gerais dos isolantes topológicos, lidando primeiramente com a construção discreta chamada de teoria topológica de bandas (TTB), partindo da fase Berry, perpassando a correspondência bulk-boundary e indo até o conceito de pump de corrente. Na sequência, é apresentada teoria contínua chamada de teoria topológica de campos (TTC), na qual são discutidas algumas ações efetivas e Lagrangianas junto com as correntes para alguns modelos de ITs de interesse em 2D e 3D.

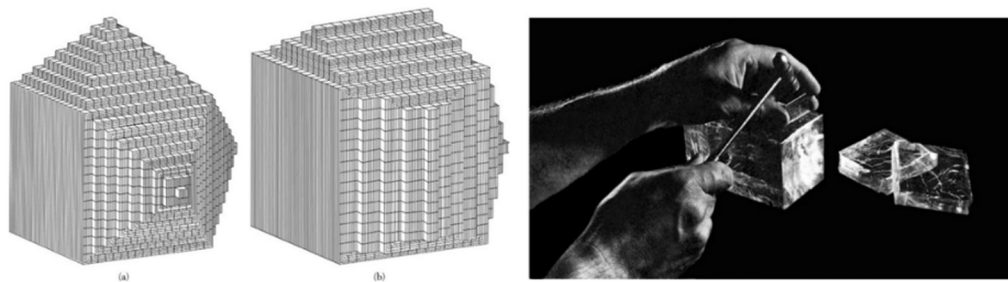
O capítulo 4 apresenta a conclusão do trabalho, na qual são sintetizados e discutidos os principais resultados obtidos, bem como a relevância e conexão com o problema de pesquisa.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Introdução

Os materiais cristalinos são extremamente importantes na física do estado sólido, estando entre os grupos de materiais mais estudados. A importância desses materiais reside no fato de muitos sólidos possuírem estrutura periódica, de forma que muitos metais e semicondutores são cristais. A partir do estudo desses materiais pudemos entender melhor suas propriedades eletrônicas e gerais (ASHCROFT; MERMIN, 1976; KITTEL, 2005; SNOKE, 2009).

Figura 3: (a) e (b) exemplos de crescimento de cristal com diferentes clivagens. Ao lado direito temos um cristal de sal de cozinha.



Fonte: Adaptada de KITTEL (2005, p. 2).

A **aproximação adiabática de Born-Oppenheimer** baseia-se na grande diferença entre as massas dos núcleos atômicos e dos elétrons. Como consequência, os núcleos atômicos se movem em uma escala temporal muito mais lenta que o movimento eletrônico, o que permite considerar em primeira aproximação as posições dos núcleos atômicos como fixas no espaço enquanto os elétrons evoluem em seu potencial.

Nessas condições, o Hamiltoniano pode ser tratado de forma aproximada, desacoplando-se as componentes nuclear e eletrônica. Assim, a função de onda total é fatorizada em uma função de onda nuclear e outra eletrônica. Além disso, são desprezados os termos de acoplamento não adiabáticos que estão associados à variação da função de onda eletrônica com as coordenadas nucleares, simplificando significativamente a resolução da equação de Schrödinger

As propriedades eletrônicas do sistema podem ser determinadas pela diagonalização do Hamiltoniano eletrônico para uma configuração fixa dos núcleos (COURTEILLE, 2026).

2.2 Um breve (e incompleto) resumo de teoria de bandas

2.2.1 Teorema e Hamiltoniano de Bloch

Hamiltonianos de sistemas periódicos podem ser escritos a partir da caracterização de uma célula unitária que se repete por toda a extensão do cristal. A diagonalização do Hamiltoniano de uma célula unitária nos fornece as autoenergias e autoestados do sólido cristalino e por conseguinte a informação das propriedades de interesse sejam elas eletrônicas, de transporte etc.

O Hamiltoniano eletrônico total do sistema é escrito como (ROCHA, 2014),

$$H = \sum_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}), \quad (2.1)$$

no qual $H(\mathbf{R})$ é justamente o Hamiltoniano da **célula unitária** que se repete de maneira **periódica** pelo sistema cristalino e $\mathbf{R}$ são os vetores da periodicidade do cristal,

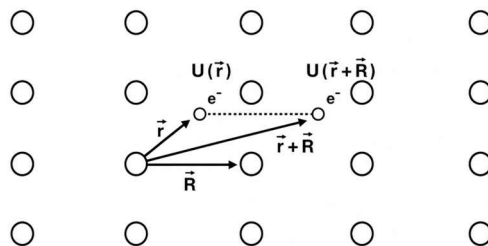
$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^D n_i \mathbf{a}_i, \quad (2.2)$$

onde D é a dimensão da periodicidade do cristal, o termo n_i são números inteiros e $\mathbf{a}_i$ são os vetores da base que descrevem os cristais.

Nesse contexto surge o chamado **teorema de Bloch** que se constitui como algo vital no estudo de sistemas cristalinos e por conseguinte da física de estado sólido. Em sistemas periódicos, i.e., que possuem atrelados a si a simetria de translação podemos escrever seu potencial na forma

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Figura 4: A periodicidade do potencial U advém da periodicidade da rede. $\mathbf{R}$ é um vetor da rede que localiza os íons. $\mathbf{r}$ é a coordenada do elétron.



Fonte: Reproduzida de OLIVEIRA; JESUS (2005, p. 130).

Como todos os pontos de uma rede de Bravais são equivalentes é lógico se pensar que $\psi_k(\mathbf{r})$ e $\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ que são funções em $\mathbf{r}$ e $\mathbf{r} + \mathbf{R}$ devem obedecer

$$|\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})|^2 = |\psi_k(\mathbf{r})|^2, \quad (2.4)$$

i.e., as densidades de probabilidade das duas deve ser igual. Porém, como temos pontos diferentes a função de onda desses pontos irá diferir por um fator de fase global. A prova parte de que o Hamiltoniano e o operador de translação comutam, $[H(\mathbf{r}), T_R] = 0$, por serem periódicos e ao atuarmos o operador de translação T_R sobre $\psi_k(\mathbf{r})$ encontramos: $T_R \psi_k(\mathbf{r}) = \psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ assim podemos escrever,

$$\begin{aligned} T_R[U(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r})] &= U(\mathbf{r} + \mathbf{R})T_R\psi_k(\mathbf{r}) \\ &= U(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (2.5a)$$

como $\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ e ψ_k diferem por um fator de fase global, que escreveremos como $\exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}))$, de forma que obtemos,

$$T_R[U(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r})] = U(\mathbf{r})\psi_k(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}. \quad (2.5b)$$

de maneira que a solução da equação de Schroedinger será então da forma,

$$\psi_k(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \psi_k(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}}. \quad (2.6)$$

O teorema (como mostrado acima) nos diz que os autoestados de um Hamiltoniano periódico são dados a partir de uma onda plana modulada por uma função que possui a mesma periodicidade do Hamiltoniano. **Uma prova concisa do teorema de Bloch se encontra no apêndice G.** Considerando que os autoestados do Hamiltoniano possuem tal simetria é possível inferir que o Hamiltoniano obedece a seguinte propriedade,

$$T_R H(\mathbf{r}) T_R^{-1} = H(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (2.7a)$$

para potenciais periódicos. No caso do espaço de quasimomentum, por fim, encontramos

$$H(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} H e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.7b)$$

2.2.2 Rede recíproca e Zona de Brillouin

Ainda se tratando de materiais periódicos um conceito natural que surge é o da chamada **Zona de Brillouin** que é por definição uma **célula de Wigner-Seitz na rede recíproca** e se constitui como **a região definida entre os planos que passam pelas bissetrizes das linhas que conectam os vizinhos mais próximos em uma dada rede recíproca a partir da origem** e que nos evidencia todos os vetores de onda K que podem ser **difratados pelo cristal**. Em 1D ela está entre $\pm \frac{\pi}{a'} = |Q|/2$, onde Q é o conjunto de vetores da rede recíproca. O vetor de onda de um elétron em um sólido deve respeitar $K < |Q|/2$ em qualquer direção a fim de ser refletido por um refletor de Bragg.

Figura 5: Rede recíproca em 2D na qual as linhas que conectam os vizinhos mais próximos foram bissectadas por planos para formar uma célula de Wigner-Seitz.



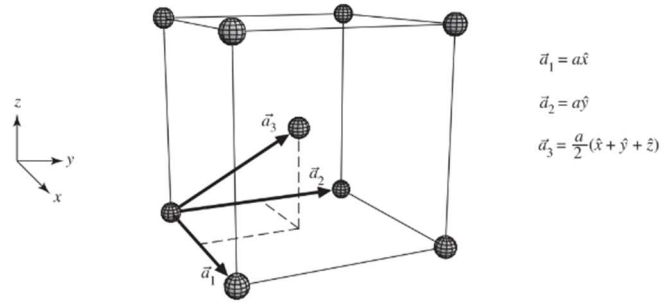
Fonte: Reproduzida de SNOKE (2009, p. 26).

O espaço (ou rede) recíproco (dimensões do inverso da distância) por outro lado se constitui como **todos os vetores de onda K os quais produzem ondas planas com a periodicidade de uma dada rede de Bravais** (arranjo infinito de pontos orientados identicamente a partir de qualquer ponto da rede), como nos fala Ashcroft e Mermin (1976). O conjunto de todas as localidades da célula unitária,

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (2.8)$$

com n_1, n_2, n_3 números inteiros e $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ os denominados vetores primitivos da rede. O conjunto de todos os vetores $\mathbf{R}$ acima e em (2.2) definem a rede de Bravais para um dado cristal.

Figura 6: Vetores primitivos de uma rede de um cubo de corpo centrado (CCC).



Fonte: Reproduzida de SNOKE (2009, p. 21).

Assim, para $\mathbf{Q} \in E_R$ (espaço recíproco) quando temos um **sistema cristalino**, **a onda deve refletir a periodicidade da rede de Bravais**,

$$e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})} = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}, \quad \forall \mathbf{r}, \mathbf{R} \in E_R. \quad (2.9)$$

De forma que o espaço recíproco é visto como o conjunto de vetores $\mathbf{K}$ que satisfaz,

$$e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}} = 1, \quad \forall \mathbf{R} \in E_R. \quad (2.10)$$

assim a condição (2.9) é satisfeita quando (2.10) é verdadeira conforme Oliveira e Jesus (2005). Podemos ver isso a partir de,

$$e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{R})} = e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} \rightarrow e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}} = e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}} \blacksquare. \quad (2.11)$$

E assim, para isso ser verdade devemos ter então,

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}} = 1 &\rightarrow \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) + i \sin(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}) = 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathbf{Q} \cdot \mathbf{R} = 2\pi N, \quad \forall \mathbf{R} \in E_R, \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde $N \in \mathbb{Z}$. O resultado anterior pode ser satisfeito a partir de,

$$\mathbf{Q} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3, \quad (2.13)$$

com $m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z}$. De maneira que os vetores de $\mathbf{Q}$ são dados por,

$$\mathbf{b}_i = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}. \quad (2.14)$$

O numerador nos dá um vetor perpendicular tanto a $\mathbf{a}_j$ quanto a $\mathbf{a}_k$ e o denominador é o volume da célula primitiva, respectivamente. Obtemos então a seguinte condição,

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (2.15)$$

que nos retorna o resultado (2.12). Esses aspectos acima derivam da condição de interferência construtiva de Bragg, que é expressa como,

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (2.16)$$

isto é, a diferença de percurso entre os raios refletidos por diferentes planos deve ser igual a um dado número inteiro n de comprimentos de onda λ . A equação acima é satisfeita quando $\lambda \leq 2d$ (KITTEL, 2005). Também temos a construção de Von Laue da difração a qual não prioriza nenhum seccionamento do cristal em planos da rede e não possui imposição da condição de reflexão especular, veja Ashcroft e Mermin (1976).

Para um feixe de onda elásticas, o vetor de onda dos feixes incidente e difratado valem $\mathbf{k}$ e $\mathbf{k}'$. A mudança no vetor de onda (vetor de espalhamento) será $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. Quando o vetor de espalhamento é igual a um dos vetores da rede recíproca $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{Q}$, $-\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ também o será. Chamando $-\Delta\mathbf{k}$ de $\mathbf{K}$ e considerando que a condição para $\mathbf{k}'$ e $\mathbf{k}$ terem a mesma magnitude é dada por,

$$k = |\mathbf{k} - \mathbf{K}|. \quad (2.17)$$

Podemos escrever então,

$$\mathbf{k} + \mathbf{Q} = \mathbf{k}' \Rightarrow \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{K}} = \frac{1}{2}K, \quad (2.18)$$

isto é, a componente do vetor de onda incidente $\mathbf{k}$ na direção de $\mathbf{K}$ deve ser metade do comprimento de $\mathbf{K}$. Ou de outra forma,

$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{Q} + Q^2, \quad (2.19)$$

que é a condição de espalhamento.

2.2.3 Isolantes, condutores e semicondutores

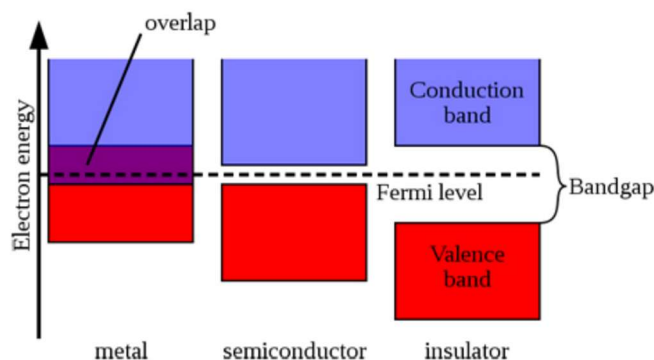
No limite da primeira Zona de Brillouin, quando olhamos o modelo do elétron quase livre (gás livre de Fermi) vemos que ele se divide em dois ramos (níveis) nos quais há a presença de um gap de energia de $2U$ entre eles. Dentro desses níveis de energia o nível de energia do estado ocupado mais alto é chamado de nível de Fermi.

Para isolantes a região de excitação eletrônica possui um gap grande, além de o limite da primeira zona de Brillouin corresponder ao nível de Fermi. A banda de valência está completamente preenchida e a de condução completamente vazia, e devido ao grande gap o material não possui portadores de carga livres que podem ser excitados até a banda de condução.

No caso de condutores temos a existência de estados $k > k_F$ (onde k_F são os estados de Fermi), tal que ao excitarmos tais partículas elas ultrapassam a 1ª ZB e vão a banda superior (quando separadas). Como a energia mais baixa da banda de condução ϵ_c é em geral (para metais) menor que a energia de Fermi ϵ_F , a banda de valência é totalmente preenchida, porém, somente uma fração da banda condução é preenchida, tal que temos muitos canais abertos na banda de condução. Em muitos casos temos a sobreposição dessas bandas de energia para esses materiais.

No caso dos semicondutores temos que a energia de Fermi se encontra entre os níveis de energia da banda de valência e de condução, $\epsilon_c > \epsilon_F > \epsilon_v$, onde ϵ_v é o maior nível de energia da banda de valência, ou seja, está na metade do gap. Além disso, o seu gap de energia é pequeno.

Figura 7: Ocupação dos estados eletrônicos nas bandas de valência e condução em certas classes de materiais. No caso do metal há uma sobreposição das bandas de condução e valência, para semicondutores o gap é extremamente pequeno e para isolantes o gap é grande.



2.3 Simetria de Reversão Temporal

As leis da física são invariantes independentemente do sistema tomado, sendo assim ao invertermos a seta temporal as leis devem continuar invariantes. Dada a transformação $\mathbb{T}$ em um dado sistema físico, essa transformação leva a variável tempo para o valor negativo de si mesmo, ou seja, inverte seu sinal,

$$t \rightarrow -t, \quad (2.20)$$

e mantém os valores relativos as coordenadas invariantes. Para o caso de uma partícula com spin $\hat{s}$, momentum linear $\hat{p}$ e posição $\hat{r}$, temos as seguintes relações após a aplicação de $\mathbb{T}$,

$$\hat{s} \rightarrow -\hat{s} \quad (2.21)$$

$$\hat{p} \rightarrow -\hat{p} \quad (2.22)$$

$$\hat{r} \rightarrow \hat{r}, \quad (2.23)$$

portanto,

$$\mathbb{T} \hat{p} = -\hat{p} \mathbb{T}, \quad (2.24)$$

ou ainda

$$\{\mathbb{T}, \hat{p}\} = 0 \quad (2.25)$$

de forma que

$$\mathbb{T} \hat{p} \mathbb{T}^{-1} = -\hat{p}. \quad (2.26)$$

Também podemos escrever o operador reversão temporal como,

$$\mathbb{T} = \mathbb{T}^\mu{}_\nu = \begin{bmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.27)$$

O operador $\mathbb{T}$ possui as seguintes propriedades,

$$\mathbb{T}^\mu{}_\nu = (\mathbb{T}^{-1})^\mu{}_\nu, \quad (2.28)$$

$$\mathbb{T}^2 = \mathbb{I}. \quad (2.29)$$

No caso de partículas de spin $\frac{1}{2}$ temos,

$$\mathbb{T}^2 = -1. \quad (2.30)$$

Essa propriedade leva a degenerescência de Kramers (veja o apêndice H).

Levando em conta que $\mathbb{T}$ deve estar relacionado a um operador unitário esperamos também que,

$$\mathbb{T} \equiv U(\mathbb{T}). \quad (2.32)$$

Para um campo escalar $\phi(x)$ temos (teorias de spin zero),

$$\mathbb{T}^{-1}\phi(x)\mathbb{T} = \phi(\mathbb{T}x), \quad (2.33)$$

e,

$$\mathbb{T}^{-2}\phi(x)\mathbb{T}^2 = \phi(x), \quad (2.34)$$

ou ainda (no caso de teorias de spin- $\frac{1}{2}$),

$$\mathbb{T}^{-1}\phi(x)\mathbb{T} = -\phi(\mathbb{T}x). \quad (2.35)$$

A forma pela qual decidir qual das equações usar segundo Sredinicki (2007) é definir as transformações sobre a densidade Lagrangiana tal que ela seja par. De forma que caímos no caso de teorias de spin zero e $\frac{1}{2}$. Assim, não tendo ambiguidade quanto a dualidade de equações possíveis no caso da paridade e da reversão temporal.

Levando em conta o fato de que o momentum linear canônico é dado por $\hat{\mathbf{p}} = i\nabla \frac{d}{dt}$, vem,

$$\mathbb{T}\hat{\mathbf{p}}\mathbb{T}^{-1} = \mathbb{T}\left(i\nabla \frac{d}{dt}\right)\mathbb{T}^{-1} = \nabla \frac{d}{dt} \overbrace{\mathbb{T}i\mathbb{T}^{-1}}^{=-i} = -\hat{\mathbf{p}}. \quad (2.36)$$

Como o spin canônico é dado por $\hat{\mathbf{s}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$, podemos escrever,

$$\mathbb{T}\hat{\mathbf{s}}\mathbb{T}^{-1} = \mathbb{T}\left(\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\hat{\sigma}}\right)\mathbb{T}^{-1} = -\hat{\mathbf{s}}, \quad (2.37)$$

onde $\boldsymbol{\hat{\sigma}} = \sigma_x + \sigma_y + \sigma_z$, são as matrizes de Pauli dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

portanto,

$$\mathbb{T} \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \right) \mathbb{T}^{-1} = \frac{\hbar}{2} \mathbb{T} (\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) \mathbb{T}^{-1} = \frac{\hbar}{2} (\mathbb{T} \sigma_x \mathbb{T}^{-1} + \mathbb{T} \sigma_y \mathbb{T}^{-1} + \mathbb{T} \sigma_z \mathbb{T}^{-1}), \quad (2.39)$$

assim,

$$\mathbb{T} \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma} \right) \mathbb{T}^{-1} = \frac{\hbar}{2} \overbrace{(-\sigma_x - \sigma_y - \sigma_z)}^{=-\hat{\sigma}} = -\hat{\mathbf{s}}. \quad (2.40)$$

Assim o operador reversão temporal $\mathbb{T}$ inverte o sinal da unidade imaginária i , o que faz dele um operador antiunitário,

$$\mathbb{T}^{-1} i \mathbb{T} = -i. \quad (2.41)$$

Podemos entender que esse operador deve conter em si o complexo conjugado, chamando $\mathbb{T}$ de Θ , pois estamos lidando agora com o espaço de Hilbert, podemos escrever

$$\Theta = UK, \quad (2.42)$$

com Θ = operador antinunitário, U = *operador unitário* e K = *complexo conjugado*. De forma que,

$$K^{-1} \hat{s}_x K = \hat{s}_x \quad (2.43)$$

$$K^{-1} s_y K = -\hat{s}_y \quad (2.44)$$

$$K^{-1} \hat{s}_z K = \hat{s}_z, \quad (2.45)$$

onde somente $s_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y$ possui **componentes complexas** e por isso **inverte seu sinal**. Podemos escrever U como,

$$U = \exp(-i\pi \hat{s}_y), \quad (2.46)$$

obtemos então,

$$\Theta = \exp(-i\pi \hat{s}_y) K. \quad (2.47)$$

A equação anterior possui autovalores $\pm i$ e,

$$\Theta^2 = -1, \quad (2.48)$$

como esperado. Para um sistema de elétrons,

$$\Theta = \prod_i \exp(-i\pi\hat{s}_{iy})K. \quad (2.49)$$

Sendo que temos o seguinte [QFT for the gifted amateur],

$$n^\circ \text{ ímpar de elétrons: autovalores} = \pm i; \Theta^2 = -1 \quad (2.50)$$

$$n^\circ \text{ par de elétrons: autovalores} = \pm 1; \Theta^2 = 1. \quad (2.51)$$

O valor de $\Theta^2 = 1$ **leva diretamente ao teorema de Kramers, i.e., ao sistema ser duplamente degenerado**. Além disso, quando se trata dos ITs, mais especificamente, dos **estados de borda**, a contagem do número desses estados que cruzam o nível de Fermi define a paridade do chamado **invariante Z_2 , número ímpar de elétrons que cruzam o nível de Fermi na zona de Brillouin indica que o sistema é topológico**, caso contrário, um número par de elétrons cruzam o nível de Fermi, então, o sistema é trivial.

Na aplicação do operador reversão temporal ao Hamiltoniano de Bloch $H(\mathbf{k})$ obtemos (SATO; ANDO, 2017) o seguinte resultado para todos os pontos $\mathbf{k}$ da Zona de Brillouin,

$$\Theta H(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = H(-\mathbf{k}). \quad (2.52)$$

Entretanto, temos pontos nos quais o operador reversão temporal Θ comuta com o operador Hamiltoniano. Esses pontos são chamados de **TRIM** (acrônimo do inglês para time reversal invariant momenta) que em português significa **momenta invariante sob reversão temporal** (ROCHA, 2014; SATO; ANDO, 2017), e são denotados por Λ_α com $\alpha = 1, \dots, N$, onde N é o número de TRIMs que existem na ZB, de forma que,

$$[\Theta, H(\Lambda_\alpha)] = 0, \quad (2.53)$$

i.e., são compatíveis, além disso,

$$H(\Lambda_\alpha) = H(-\Lambda_\alpha). \quad (2.54)$$

De forma que as coordenadas Λ_α na ZB são,

$$\Lambda_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^D n_i \mathbf{b}_i, \quad n_i = 0, 1, \quad (2.55)$$

sendo que $N = 2^D$, com D igual a dimensão da ZB. A **representação matricial do operador de RT na base dos estados de Bloch** vem a partir da consideração da seguinte matriz,

$$w_{ij}(\mathbf{k}) = \langle u_{i,-\mathbf{k}} | \Theta | u_{j,\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.56)$$

com i, j sendo os índices das bandas. Os elementos de matriz dados em (2.56) estão relacionados com os estados de Bloch a partir de

$$|u_{j,-\mathbf{k}}\rangle = \sum_j w_{ij}^*(\mathbf{k}) \Theta |u_{j,\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.57)$$

Um aspecto importante é que a matriz $w_{ij}(\mathbf{k})$ é unitária,

$$\sum_i w_{ik}^\dagger(\mathbf{k}) w_{il}(\mathbf{k}) = \delta_{kl}, \quad (2.58)$$

com a seguinte propriedade

$$w_{lk}(\mathbf{k}) = -w_{kl}(-\mathbf{k}). \quad (2.59)$$

A equação (2.59) acima nos confirma que nos pontos TRIM, usando (2.54),

$$w_{lk}(\Lambda_\alpha) = -w_{kl}(\Lambda_\alpha), \quad (2.60)$$

ou seja, essa matriz se torna antissimétrica. Assim, analisando o caso simples de duas bandas, as quais estão relacionadas pela SRT, a matriz de RT na base dos estados de Bloch nos dá o seguinte resultado no ponto Λ_α ,

$$w(\Lambda_\alpha) = \begin{pmatrix} 0 & w_{12}(\Lambda_\alpha) \\ -w_{12}(\Lambda_\alpha) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

A **conexão de Berry** (não-abeliana), que veremos mais para frente seu significado, do modelo é dada por,

$$A_{ij}(\mathbf{k}) = -i \langle u_{i,\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{j,\mathbf{k}} \rangle, \quad (2.62)$$

tal que encontramos após algumas manipulações o seguinte resultado,

$$\text{tr}[A(\mathbf{k})] = \text{tr}[A(-\mathbf{k})] + i \text{tr}[w^\dagger(\mathbf{k}) \nabla_{\mathbf{k}} w(\mathbf{k})]. \quad (2.63)$$

De forma que a relação (2.63) é usada no cálculo de um dos **invariantes topológicos** que trataremos mais a frente, o chamado **invariante Z_2** .

2.4 Um pouco de Topologia

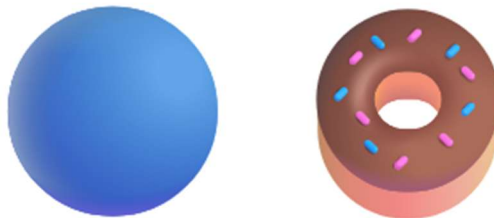
2.4.1 Aspectos de Topologia geral

Podemos definir a topologia como a área da matemática que trata do estudo das deformações em estruturas/corpos de interesse e suas possíveis implicações. Um exemplo clássico e simples é o de que para a topologia uma caneca e uma rosquinha representam o mesmo padrão estrutural, ou seja, não há diferença entre elas.

A topologia **classifica** as formas a partir do **número de furos (ou genus) g** , e esse fator indica a classe a qual cada forma pertence. Devido a isso, quando furamos uma certa forma estamos trocando a sua classe, e mais estamos causando uma deformação que não é suave nela, dado que estamos alterando sua forma topológica.

Uma bola possui genus (furos) $g = 0$, enquanto uma rosquinha possui genus $g = 1$, o que evidência que topologicamente são de classes diferentes. Na figura abaixo ilustramos isso.

Figura 8: Ilustração de uma bola a esquerda com genus $g = 0$ e uma rosquinha a direita com genus $g = 1$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O teorema de Gauss-Bonnet nos evidência então a **ligação existente entre a geometria diferencial e a informação geométrica, mais especificamente a curvatura Gaussiana (local) com a topologia global que terá como resultado a característica topológica, também chamada de característica de Euler** (SHAHVERDI; VUORENMAA, 2023). O teorema nos diz que a integral de curvatura gaussiana K sobre uma superfície 2-D S depende somente da topologia da superfície, no caso de superfícies fechadas, compactas e orientáveis,

$$\int_S K dA = 2\pi\chi(S) = 2 - 2g, \quad (2.64)$$

i.e., a integral sob a curvatura Gaussiana de uma dada superfície 2-D será igual a 2π vezes a característica de Euler da dada superfície. A característica de Euler $\chi(S)$ para uma dada superfície 2-D é dada por,

$$\chi(S) = V - E + F, \quad (2.65)$$

com V sendo a quantidade de vértices, E o número de arestas e F o número de faces. Para superfícies com contornos o teorema de Gauss-Bonnet é dado por,

$$\int_S K dA + \int_{\partial S} k_g ds = 2\pi\chi(S), \quad (2.66)$$

onde ∂S é o contorno e k_g é a chamada curvatura geodésica que está relacionada à taxa de mudança do ângulo entre o vetor tangente a curva e o campo vetorial paralelo (SALM, 2015).

Na teoria do **transporte paralelo** (veja o apêndice) ao **transportar um vetor sobre um laço fechado o vetor não retorna apontando na direção inicial**. Essa diferença angular é chamada de **holonomia** ou defeito angular. O teorema de Gauss-Bonnet estabelece uma relação entre o local e o global: do ponto de vista geométrico, **a soma de todas essas holonomias sobre uma superfície fechada está relacionada à característica de Euler da superfície**. No contexto de estados de Bloch, o transporte paralelo dá origem à fase de Berry (próximo capítulo), obtida pela integral da conexão de Berry ao longo de um caminho no espaço de parâmetros, que pode ser fechado ou aberto, dependendo da formulação adotada.

No contexto da Física, o que trabalhamos acima se manifesta nos **invariantes topológicos**, os quais se caracterizam por serem **quantidades topologicamente quantizadas**. Em sistemas periódicos em geral são expressos como integrais de quantidades geométricas definidas sobre a zona de Brillouin.

2.5 Topologia e matéria condensada

2.5.1 Efeito Hall e alguns modelos de interesse

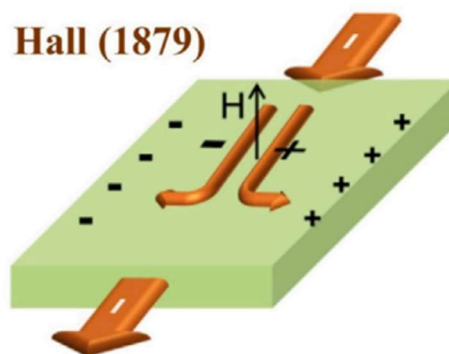
Descoberto na década de 80 o efeito Hall é um fenômeno no qual ao passar um campo magnético perpendicular a um sistema (circuito), surge um campo elétrico no sentido de um lado (cargas positivas) ao outro (cargas negativas) do circuito. Podemos dividir o efeito Hall em vários, porém trataremos dos seguintes tipos:

- Efeito Hall Inteiro ou Clássico (EH);
- Efeito Hall Anômalo (EHA);
- Efeito Hall Quântico Inteiro (EHQI);
- Efeito Hall Quântico de Spin (EHQS);

2.5.2 Efeito Hall Clássico (EH)

Descoberto em 1879 por Edwin Hall é o fenômeno no qual ao incidirmos um forte campo magnético perpendicular em uma amostra de material há o surgimento de um campo eletrostático que vai de uma ponta a outra do material e como temos um fluxo de corrente atravessando o material podemos medir uma voltagem (tensão) que é perpendicular tanto ao campo magnético quanto a corrente, e é a chamada tensão Hall (SIMON, 2013).

Figura 9: Ilustração esquemática do efeito Hall clássico.



Fonte: Reproduzida de BANDYOPADHYAY; JOSEPH; NARAYAN (2024, p. 3). Licenciado sob Creative Commons 4.0 (CC BY-NC 4.0).

Sabemos que a equação que caracteriza o comportamento de uma partícula sob um campo elétrico e magnético é (SIMON, 2013),

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} - \frac{\mathbf{p}}{\tau}, \quad (2.67)$$

com τ sendo o tempo de relaxação. De forma mais visual podemos pensar em um material 2-D, de comprimento L (direção x) e largura M (direção y), tal que “ligamos” um forte campo magnético na direção transversa (eixo z),

$$\mathbf{B} = B_z. \quad (2.68)$$

Junto disso temos a aplicação de uma tensão ao longo do material, V_L (na direção x), e um campo elétrico E_x . Assim a relação entre a tensão V_L e esse campo E_x é,

$$V_L = LE_x. \quad (2.69)$$

Há assim o surgimento de uma força de Lorentz

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.70)$$

Na teoria de elétrons livres ainda podemos reescrever essa equação a partir da relação do momentum do elétron livre e do vetor de onda

$$m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}, \quad (2.71)$$

e por conseguinte

$$\mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}. \quad (2.72)$$

Essa força fará os elétrons de condução do material se moverem na direção y , ou seja, temos um campo eletrostático E_y nessa direção. No equilíbrio o campo E_y compensa o campo magnético, tal que

$$E_y = v_x B_z, \quad (2.73)$$

conforme Nastase (2017). Portanto da equação de movimento usando o fato de que $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ vem,

$$\mathbf{F} - \frac{\mathbf{p}}{\tau} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \frac{m\mathbf{v}}{\tau} = m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v}, \quad (2.74)$$

e assim,

$$m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \mathbf{v} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (2.75)$$

tal que as componentes em cada direção serão,

$$\left. \begin{aligned} m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_x &= -e(E_x + Bv_y) \\ m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_y &= -e(E_y + Bv_x) \\ m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) v_z &= -eE_z \end{aligned} \right\}, \quad (2.76)$$

como E é constante as derivadas parciais se anulam e encontramos (KITTEL, 2005),

$$\left. \begin{aligned} v_x &= -\frac{e\tau}{m} E_x - \frac{eB}{m} \tau v_y \\ v_y &= -\frac{e\tau}{m} E_y - \frac{eB}{m} \tau v_x \\ v_z &= -\frac{e\tau}{m} E_z \end{aligned} \right\}. \quad (2.77)$$

Os elétrons da amostra rodam em círculos em uma frequência cíclotron ω_c . Igualando a força de Lorentz (neste caso somente a parte relativa ao campo magnético), evB , à força centrífuga, $mv\omega$, vem

$$F_{Lorentz} = F_{centrifuga} \Rightarrow evB = mv\omega \Rightarrow \omega = \omega_c = \frac{eB}{m}. \quad (2.78)$$

Assim sendo, obtemos

$$\left. \begin{aligned} v_x &= -\frac{e\tau}{m} E_x - \omega_c \tau v_y \\ v_y &= -\frac{e\tau}{m} E_y - \omega_c \tau v_x \\ v_z &= -\frac{e\tau}{m} E_z \end{aligned} \right\}, \quad (2.79)$$

no caso do efeito Hall, $v_y = 0$, de forma que isso ocorre somente quando temos a presença de um campo elétrico que é transversal, i.e., vai na direção da largura do material (direção x),

$$E_y = -\omega_c \tau \frac{mv_x}{e\tau} = -\omega_c \tau \frac{p_x}{em} \Rightarrow E_y = -\omega_c \tau E_x, \quad (2.80)$$

que podemos ver a partir da equação para v_z . Assim a partir do valor da corrente na direção x, I_x que é dada por,

$$I_x = nev_x = \frac{ne^2 \tau E_x}{m}, \quad (2.81)$$

encontramos então o **coeficiente Hall** que é dado por,

$$R_H = \frac{E_y}{I_x B} \Rightarrow R_H = -\frac{1}{ne}, \quad (2.82)$$

na teoria de Drude (metais). No elétron de condução possui um valor negativo e para um buraco possui valor positivo que pode ser entendido a partir da simetria buraco-partícula. O valor de R_H refere-se à **concentração de portadores de corrente elétrica no material** (KITTEL, 2005; SIMON (2013). E que também pode ser escrita como,

$$R_H = -\frac{B}{ne|B|}. \quad (2.83)$$

Podemos também escrever a **resistência Hall** que é dada por,

$$\rho_H = \frac{ME_y}{MI_x} = -\frac{B}{ne}, \quad (2.84)$$

e por conseguinte a **condutância Hall** que é justamente o inverso da resistência Hall,

$$\sigma_H = \frac{1}{\rho_H} \Rightarrow \sigma_H = -\frac{ne}{B}. \quad (2.85)$$

Pode-se dizer que o coeficiente Hall mede a densidade de elétrons.

2.5.3 Níveis de Landau

A ideia de **níveis de Landau** surge naturalmente ao vermos que existe uma **quantização da energia de uma partícula livre carregada sob a ação de um campo magnético perpendicular em um sistema 2D**. Assim, o estudo dos múltiplos tipos de efeito Hall envolve o estudo de mecânica quântica.

Seguindo a pintura semi-clássica (SNOKE, 2009) nós vimos acima que os elétrons realizam órbitas fechadas quando estão sob a ação do campo magnético na direção perpendicular em um sistema 2D. Podemos fazer uso da natureza ondulatória do elétron de forma que podemos caracterizá-lo a partir de uma função de onda da forma,

$$\psi(t) = e^{i\phi(t)}\psi(0), \quad (2.86)$$

onde o termo $\phi(t)$ vale,

$$\varphi(t) = \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}, \quad (2.87)$$

que nada mais é que a **fase adquirida pelo elétron na trajetória** e veremos mais detalhadamente e numa perspectiva da mecânica quântica quando analisarmos a **fase de Berry**. Do teorema de Stokes,

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} \equiv \phi, \quad (2.88)$$

onde ϕ é o fluxo de campo magnético que atravessa a órbita que o elétron percorre. A função de onda deve ser única o que implica em,

$$\varphi(t) = 2\pi v, \quad v \in \mathbb{Z}. \quad (2.89)$$

Além disso, combinando (2.86) e (2.88) obtemos,

$$\varphi(t) = \frac{e}{\hbar} \phi. \quad (2.90)$$

Como devemos satisfazer a condição de $\nabla\psi \neq 0$ para termos $\mathbf{p} \neq 0$, dado que os elétrons estão em órbita, logo, devemos ter

$$\varphi(t) \neq 0. \quad (2.91)$$

Comparando as equações (2.89) e (2.90),

$$\varphi(t) = \frac{e}{\hbar} \phi = 2\pi v, \quad (2.92)$$

tal que obtemos,

$$\phi = \frac{2\pi\hbar}{e} v = \frac{h}{e} v. \quad (2.93)$$

E escrevendo $\phi_0 = h/e$, então,

$$\phi = \phi_0 v. \quad (2.94)$$

ou ainda,

$$v = \frac{\phi}{\phi_0}. \quad (2.95)$$

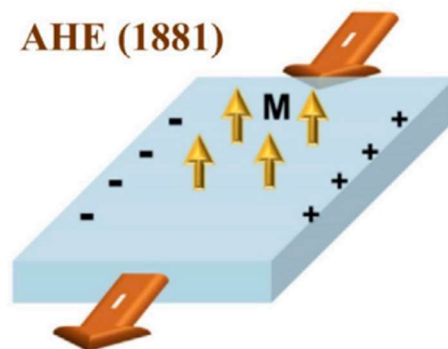
O termo ϕ_0 é o chamado **fluxo quântico**, ν é um inteiro que se refere ao **número total de estados eletrônicos em cada nível de Landau** e independe de n , ν é chamado de **fração de preenchimento** (SNOKE, 2009; NASTASE, 2017).

2.5.4 Efeito Hall Anômalo (EHA)

O efeito Hall Anômalo (EHA) foi descoberto em 1881 por Edwin Hall, e é caracterizado por ser uma **versão mais forte do EH**, de forma que a força de Lorentz pressionando os elétrons é da ordem de dez vezes mais forte em condutores ferromagnéticos que em condutores não-magnéticos. Além disso, temos o surgimento de uma **magnetização M_z** , do próprio material que causa o aparecimento de uma **corrente Hall anômala**.

Esse fenômeno se constitui como um problema de transporte de carga no qual os experimentos mostram que em materiais ferromagnéticos a resistividade Hall, ρ_{xy} , cresce de maneira rápida com o campo perpendicular fraco H_z e o valor dela satura para grandes valores desse campo.

Figura 10: Imagem esquemática do efeito Hall anômalo. Há a separação de cargas positivas e negativas pela largura do material, uma corrente passando pelo comprimento dele e uma magnetização intrínseca do material.



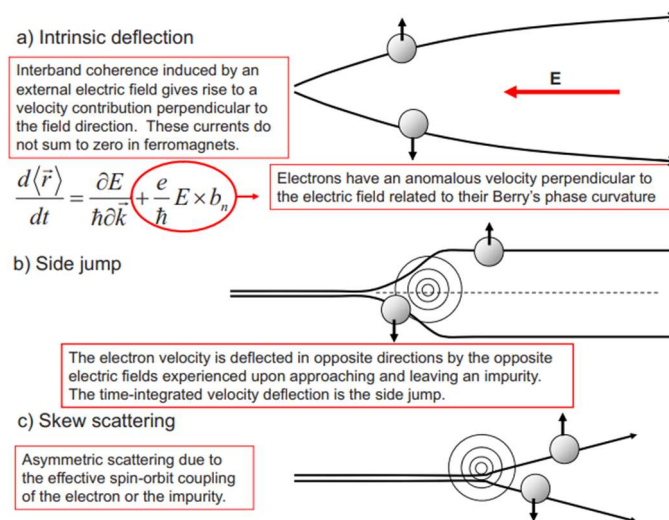
Fonte: Reproduzida de BANDYOPADHYAY; JOSEPH; NARAYAN (2024, p. 3). Licenciado sob Creative Commons 4.0 (CC BY-NC 4.0).

Os principais aspectos de interesse desse fenômeno podem ser listados como (NAGAOSA et. al, 2010):

- O EHA pode aparecer devido a três contribuições distintas, as quais no material todas estão presentes influenciando a trajetória do elétron, $\sigma_{xy}^{EHA} = \sigma_{xy}^{HA-sk}(\tau) + \sigma_{xy}^{HA-int} + \sigma_{xy}^{HA}$:

- Intrínseca: limite dc da condutividade interbandas que é não nula em condutores ferromagnéticos quando o acoplamento spin-órbita (ASO) é incluído;
- Espalhamento assimétrico (skew scattering): contribuição proporcional ao tempo de vida do transporte dos estados de Bloch e que ocorre devido a **características quirais presentes na dispersão desordenada do acoplamento spin-órbita de materiais ferromagnéticos condutores** (ASO presente no Hamiltoniano).
- Deslocamento para o lado (“side jump”): definida como a diferença entre as contribuições de campo e intrínseca e assimétrica.

Figura 11: Ilustração dos três mecanismos principais do EHA.

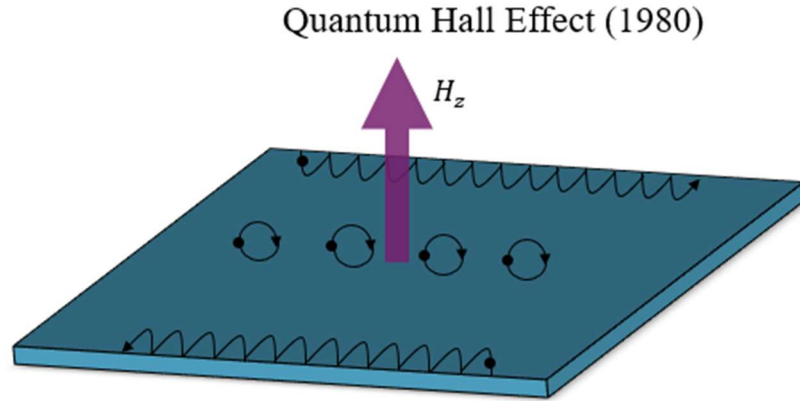


Fonte: Reproduzido de NAGAOSA (2009, p. 1542).

2.5.5 Efeito Hall Quântico Inteiro (EHQI) e modelo de Haldane

O efeito Hall quântico inteiro foi descoberto na década de 80 Von Klitzling, Dorda e Pepper (1980), (PRANGE; GIRVIN, 1987). Na **visão clássica** do efeito Hall as **partículas do interior do material seguem órbitas fechadas** e os **elétrons presentes nas bordas (ou superfícies) tem órbitas abertas**.

Figura 12: Visão clássica do efeito Hall quântico inteiro.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

No estudo de Von Klitzing, Dorda e Pepper em 1980 eles verificaram em um gás 2-D confinado na interface entre um óxido e um semiconductor num MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor, i.e., transistor de efeito de campo metal-óxido-semiconductor) que a **voltagem Hall em função do campo magnético aplicado B** não cresce de forma linear, mas sim **em forma de platôs**, nos quais a posição é independente da amostra (NASTASE, 2017). E que esses **platôs** são **quantizados em múltiplos inteiros do fator de preenchimento ν** .

Assim sendo a **resistividade transversa Hall** é dada por,

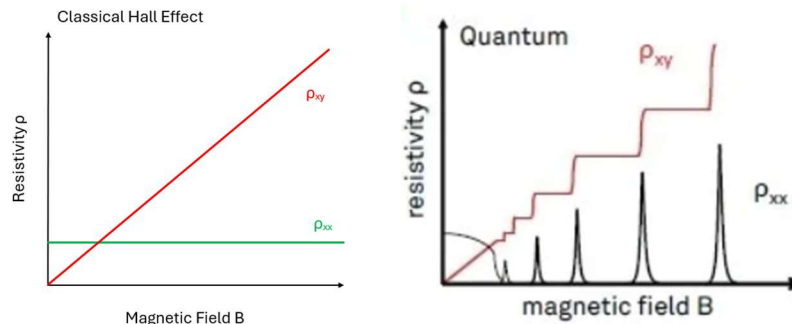
$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2 \nu} = \frac{2\pi\hbar}{e^2 \nu}, \quad \nu \in \mathbb{Z}, \quad (2.96)$$

e está relacionada a ν (eq. 2.95).

A **condutividade Hall transversa**, σ_{xy} , é dada pelo inverso da resistividade transversa,

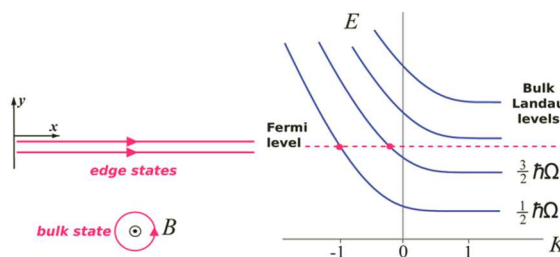
$$\sigma_{xy} = \frac{1}{\rho_{xy}} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \nu, \quad \nu \in \mathbb{Z}, \quad (2.97)$$

Figura 13: A esquerda ilustração da relação entre a resistividade transversa e o campo magnético no efeito Hall clássico. A direita ilustração da relação entre a resistividade transversa e o campo magnético aplicado no efeito Hall quântico inteiro



Fonte: Figura da esquerda produção própria do autor e figura da direita reproduzida de ZURICH INSTRUMENTS AG (2023, Fig. 2).

Figura 14: Ilustração dos canais de borda em um campo magnético “quantizante”. Os estados de borda evoluem dos níveis de Landau do bulk dados por $\frac{1}{2}\hbar\Omega, \frac{3}{2}\hbar\Omega, \dots$, dobrando para cima cruzando o nível de Fermi como função do número de onda em torno da direção x.



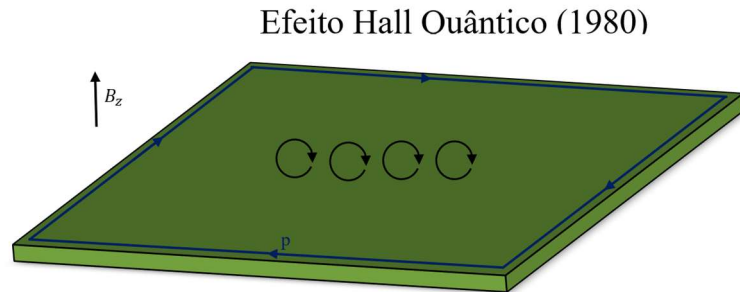
Fonte: Reproduzido de TKACHOV (2022, p. 5).

No EHQI a energia dos estados de borda é dobrada para cima e cruza o nível de Fermi. Esses estados de borda numa **visão quântica** podem ser vistos como **estados quirais** ou ainda **canais de borda quasi-1D** rodeando o interior do sistema (TKACHOV, 2022). Como a **orientação do momento p** desses canais de borda é **diretamente dependente da orientação do campo magnético B_z** esse aspecto pode ser visto como um alinhamento que **protege esses estados contra desordem**.

Os estados de borda **se movem todos em uma mesma orientação**, no limite de baixas temperaturas onde as flutuações quânticas ganham relevância como potencial fator de desordem no sistema devido a indução de espalhamento elástico, $p \rightarrow -p$, devido aos estados de borda não terem estados contra propagantes eles **não sofrem esse espalhamento reverso**. Daí o nome **quiralidade: robusteza**

quanto a direção de propagação. Essa é uma manifestação direta da quebra da SRT.

Figura 15: Imagem esquemática da visão quântica do efeito Hall quântico inteiro.

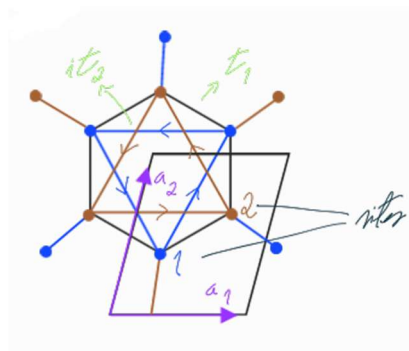


Fonte: Produção própria do autor.

No ano de 1988 Haldane propôs o primeiro **toy model** ao qual poderia ser realizada a fase de Hall quântico anômalo (EHQA) e é o modelo mais famoso de **isolante de Chern** [Emerging topological bound states in Haldane model zigzag nanoribbons - Simone Traverso, Maura Sassetti & Niccolò Traverso Ziani].

O toy model de Haldane é um modelo de **tight-binding** no qual temos um **número de Chern não-nulo** na zona de Brillouin 2D. Nesse modelo elétrons sem spin possuem amplitudes de “hopping” (salto) entre os sítios (orbitais tipo s) imersos em uma rede de favo de mel. Além disso, ele se constitui como uma **tentativa da realização do EHQI sem os níveis de Landau**, i.e., sem a presença de campo magnético.

Figura 16: Imagem esquemática do modelo de Haldane (ou rede de favo de Mel). O modelo é uma rede hexagonal com dois sítios. O sítio 1 está representado pelos círculos em azul, enquanto o sítio 2 é representado pelos círculos marrons. A ligação entre primeiros vizinhos está em preto. A ligação entre segundos vizinhos está representada pelas setas em azul e marrom.



Fonte: Produção própria do autor.

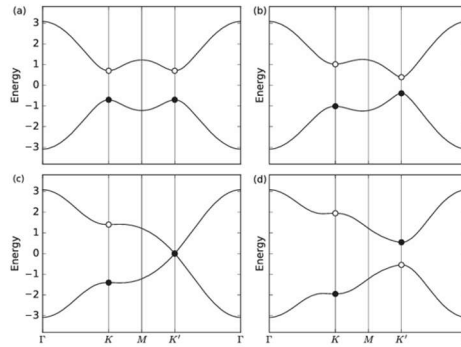
O Hamiltoniano desse modelo é dado por

$$\mathcal{H}_H = \Delta \sum_i (-1)^{\tau_i} c_i^\dagger c_i + t_1 \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_j + h.c.) + t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} (i c_i^\dagger c_j + h.c.), \quad (2.98)$$

onde τ_i com $i = 1, 2$ é o índice da sub-rede do sítio, t_1 é a força da amplitude de salto para os primeiros vizinhos e it_2 para os segundos vizinhos mais próximos.

O modelo é assumido ser semipreenchido e na ausência de t_2 o Hamiltoniano descreve sistemas não-magnéticos como os orbitais p_z da camada única de grafeno $\Delta = 0$. O modelo, além disso, descreve um material ferromagnético com uma certa magnetização orbital M_z , o termo $-it_2$ quebra a simetria TR e esse é o modelo mais simples a descrever uma fase topológica. Outro ponto de destaque é que esse modelo se constituiu como uma tentativa teórica do efeito Hall anômalo quântico. Abaixo a representação desse modelo usando o PYHTTB (Vanderbilt, p. 204].

Figura 17: Estrutura de bandas para o modelo de Haldane na eq. (2.98) considerando os valores para os termos $\Delta = 0.7$ e $t_1 = -1.0$. Em (a) $t_2 = 0$; (b) $t_2 = -0.06$; (c) $t_2 = -0.1347$; (d) $t_2 = -0.24$. Os círculos preenchidos representam estados puros característicos do sítio 1 e os círculos não preenchidos representam os do sítio 2; podemos ver em (d) a inversão de bandas K' .

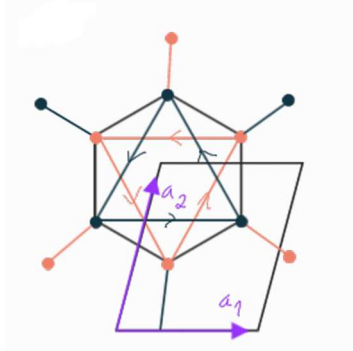


Fonte: Reproduzido de VANDERBILT (2018, p. 204).

2.5.6 Efeito Hall Quântico de Spin (EHQS) e modelo de Kane-Mele

No ano de 2005 Kane e Mele (2005) propuseram um modelo que consiste na generalização do modelo de Haldane, no qual **incluem o grau de liberdade do spin do elétron**, tal que o modelo consiste em um **par complexo conjugado dos modelos de Haldane**. O modelo foi proposto a fim de **abrir um gap no espectro de bandas de energia do grafeno**.

Figura 18: Imagem esquemática do modelo de Kane-Mele. Os estados do sítio 1 possuem spin up e são representados pelos círculos vermelhos, os círculos azuis representam os estados do sítio 2 que possuem spin down.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O modelo de Kane-Mele se baseia em a partir da abertura do gap no grafeno dar aos férmions de Dirac massa. O Hamiltoniano é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{KM} = & \Delta \sum_i (-1)^{\tau_i} c_i^\dagger c_i + t_1 \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_j + h.c.) + \lambda_{SO} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} (i c_i^\dagger \sigma_z c_j + h.c.) + \\ & + \lambda_R \sum_{\langle ij \rangle} (i c_i^\dagger \hat{e}_{\langle ij \rangle} \cdot \boldsymbol{\sigma} c_j + h.c.), \end{aligned} \quad (2.99)$$

onde o primeiro termo refere-se as energias em sítio, o segundo termo é relacionado a amplitude de saltos entre os vizinhos mais próximos, o terceiro termo é a parte spin dependente e por fim o quarto termo é o chamado termo de Rashba (que aparece motivado pela quebra de simetria especular ou de reflexão sobre o plano, i.e., presença de campo elétrico perpendicular, por exemplo). **Esse Hamiltoniano preserva tanto a SRT quanto a paridade.**

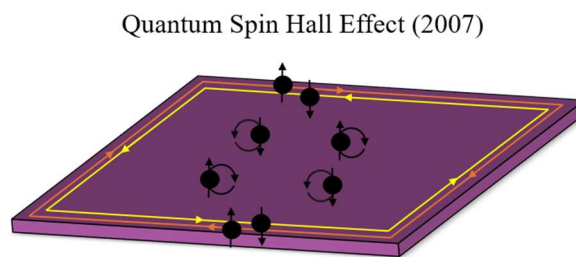
O modelo de Kane-Mele é uma generalização do modelo de Haldane, de forma que há a inserção do grau de liberdade de spin, mais especificamente a presença de spin up e down em cada sítio, ainda como falamos acima a presença do termo de Rashba, simetria especular (direita-esquerda) e a degenerescência de Kramer nos pontos TRIM Γ e M . Além disso, para um certo valor crítico do termo λ_{SO} ocorre um fechamento de gap tanto em k quanto k' de forma a ter-se uma mudança na topologia de Z_2 par para Z_2 ímpar isto é os estados passam de triviais à não-triviais.

Para materiais que não quebram a SRT os portadores de carga que estão nas bordas do material são os conhecidos pares de Kramer (veja o apêndice), além disso

temos o aparecimento do acoplamento spin-órbita. Os estados das bordas aparecem sempre em pares.

O acoplamento spin-órbita atua como um campo magnético efetivo que atua em direções opostas para diferentes spins tal que isolantes topológicos 2-D são conhecidos como Isolantes de Spin Hall Quânticos [Topological Insulators – Fundamentals and perspectives]. Esses materiais foram previstos por Kane e Mele (2005) e por Bernevig e Zhang (2006).

Figura 19: Ilustração do efeito Hall Quântico de spin.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os estados de borda são helicais, de maneira que os portadores de carga percorrem diferentes sentidos de propagação para diferentes spins (para cima ou para baixo). Os estados de bulk realizam órbitas fechadas tal que estados com spin-up percorrem órbitas fechadas em um dado sentido e estados com spin-down percorrem no sentido oposto.

3 TEORIAS GERAIS DOS ISOLANTES TOPOLÓGICOS

3.1 Topologia em Mecânica Quântica e Teoria Topológica de Bandas (TTB)

3.1.1 Teoria Topológica de Bandas (TTB)

A chamada teoria topológica de bandas é uma teoria geral não interagente de isolantes topológicos. Ela traz em sua premissa principal alguns ingredientes básicos como:

- Fase de Berry;
- Fórmula TKNN e número de Chern;
- Estados de borda e correspondência bulk-boundary;
- Polarização elétrica e pump de corrente;
- Topologia de bandas Z_2 .

3.1.1.1 Fase de Berry

A fase de Berry é uma forma de tratar e generalizar o entendimento do **efeito Aharonov-Bohm** (NASTASE, 2017), de forma extremamente simplificada o efeito citado refere-se ao caso no qual campos que possuem **invariância de calibre (liberdade na forma de escrever o campo)** e que por conseguinte possuem o aparecimento de um fator de fase global, este fator poder ser mensurado, ou seja, uma **mudança de fase quântica** pode ser medida.

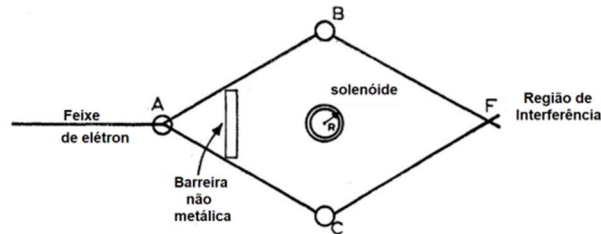
O efeito Aharonov-Bohm consiste em dois pacotes de onda eletrônicos que estão circulando um tubo solenoidal que possui um campo magnético em seu interior, assim sendo durante o percurso desses pacotes de onda o campo magnético é nulo, entretanto o potencial vetor não é, fazendo com que eles adquiram uma **fase relativa**, que é a fase de Aharonov-Bohm a qual afeta o padrão de interferência gerado pelos pacotes ao fecharem o loop (caminho fechado) (COHEN et al., 2019).

Sabemos a partir do teorema de Stokes que ao percorrer qualquer percurso fechado que envolve uma quantidade gauge-invariante ao tomar-se a integral dela encontramos o valor $2\pi\phi/\phi_0$, **fase de Aharonov-Bohm**, onde $\phi_0 = hc/e$ é o **fluxo quântico** que é encapsulado pela trajetória. Assim, no caso citado acima podemos pensar em uma quantidade que evidencie a diferença entre os caminhos feitos pelos dois elétrons tal que consigamos diferenciar elas topologicamente, essa quantidade

será: n_w - que se refere ao número de vezes que o elétron gira em torno do solenóide, também denominado de **número de enrolamento**, de forma que a fase adquirida na trajetória será $2\pi n_w \phi_s / \phi_0$, onde ϕ_s é o fluxo encapsulado pelo solenoide (STERN, 2008).

A **fase de Berry** é uma quantidade característica que surge na evolução adiabática de estados quânticos em um circuito, cíclico ou não, mais especificamente um **valor carregado pelo vetor de onda** quando evolui nesse percurso, i.e., a definição de um ângulo que vai de 0 a 2π (BERNEVIG; HUGHES, 2013; FRADKIN, 2013; NASTASE, 2017; SATO; ANDO, 2017; VANDERBILT, 2018; COHEN et al., 2019).

Figura 20: Ilustração esquemática do efeito Aharonov-Bohm.



Fonte: Adaptado de AHARONOV; BOHM (1959, p. 486).

3.1.1.2 Descrição discreta

Tomando um conjunto de n vetores que denotaremos como $\{|u_1(\mathbf{k})\rangle, \dots, |u_n(\mathbf{k})\rangle\}$, então a fase de Berry χ_b ao longo e um contorno é dada por (VANDERBILT, 2018),

$$\chi_b = -i \ln(\langle u_1(\mathbf{k}) | u_2(\mathbf{k}) \rangle \dots \langle u_{n-1}(\mathbf{k}) | u_n(\mathbf{k}) \rangle), \quad (3.1)$$

ou ainda

$$\chi_b = -i \ln \left(\prod_{i=1}^j \langle u_i(\mathbf{k}) | u_{i+1}(\mathbf{k}) \rangle \right), \quad (3.2)$$

com $|u_1(\mathbf{k})\rangle = |u_n(\mathbf{k})\rangle$, de forma que estamos considerando o caso de um ciclo. Mais para frente trataremos do caso geral. O que podemos dizer da fase de Berry é que ela é **módulo de 2π invariante sob calibre**, i.e., $\widetilde{\chi}_b = \chi_b + 2\pi n$, com n pertencente aos inteiros (que é o equivalente a dizer que o n° de elétrons de uma dada estrutura de

bandas dividido por 2 é um invariante quando consideramos o sistema como um todo, como veremos mais a frente).

Ao nos lembrarmos que para um número complexo qualquer $z = |z|e^{i\varphi}$, i.e., ele é dado pelo produto entre sua magnitude e a sua projeção nos eixos imaginário e real. Assim, o termo $Im \ln z = Im \ln(|z|e^{i\varphi}) = \varphi$, i.e., ficamos somente com a fase complexa.

3.1.1.3 Descrição continua

No limite contínuo, a fase de Berry é bem definida e assim podemos tomar uma função que indicaremos por $|u_\mu\rangle$, bem definida e suave, dependente de um parâmetro real que denotamos pelo subscrito μ .

À medida que o parâmetro μ vai de um valor real inicial, $\mu - inicial$, até um valor real final, $\mu - final$, a função $|u_\mu\rangle$ evolui no devido espaço de parâmetros, i.e., ao longo do contorno considerado, considerando que $|u_{\mu-ini}\rangle \equiv |u_{\mu-final}\rangle$.

Devido a nossa função ser bem definida podemos expandi-la em série de Taylor

$$f(x) = \sum_{i=0}^n \frac{f^{(n)}}{n!} x^n, \quad (3.3)$$

tal que obtemos,

$$|u_{\mu+d\mu}\rangle = |u_\mu\rangle + \left(d\mu \frac{\partial |u_\mu\rangle}{\partial \mu}\right) + O(d^2\mu) \dots \quad (3.4)$$

Tomamos somente até o termo de 2° ordem e ignorando os demais, assim fazendo $\ln\langle u_\mu | u_{\mu+d\mu} \rangle$, obtemos,

$$\begin{aligned} \ln\langle u_\mu | u_{\mu+d\mu} \rangle &= \ln\langle u_\mu | \left[|u_\mu\rangle + \left(d\mu \frac{\partial |u_\mu\rangle}{\partial \mu}\right) \right] \\ &= \ln\left(\langle u_\mu | u_\mu \rangle + \langle u_\mu | \left(d\mu \frac{\partial |u_\mu\rangle}{\partial \mu}\right) \right) \\ &= \ln(1 + \langle u_\mu | \partial_\mu u_\mu \rangle d\mu) \\ &= \langle u_\mu | \partial_\mu u_\mu \rangle d\mu, \end{aligned} \quad (3.5)$$

integrando a última equação, obtemos a fase Berry no limite contínuo,

$$\chi_b = -i \oint \langle u_\mu | \partial_\mu u_\mu \rangle d\mu. \quad (3.6)$$

Outra forma mais geral de pensar é a partir um sistema quântico qualquer descrito pelo Hamiltoniano $H(\Theta)$, onde Θ é um conjunto de parâmetros dependentes do tempo, $\Theta = \Theta_i(t) = (\theta_1(t), \theta_2(t), \dots, \theta_n(t))$, como campo magnético, por exemplo, tal que está instantaneamente no autoestado $|u_n(\Theta)\rangle$. Condições do nosso caso:

- A evolução se dará através de um circuito fechado ou não, como por exemplo, no caso fechado, a rotação do vetor de onda no espaço de (quasi)momentum k de um isolante de Chern;
- O vetor de onda $|u_n(\Theta)\rangle$ é modelado a partir da função $\Theta = \Theta_i(t)$ e permanece em qualquer tempo sendo o autoestado de $H(\Theta)$;
- Após a evolução temporal adiabática do sistema ele vai até um estado em um tempo $t + dt$.

Os autovalores e autoestado desse sistema são obtidos através da equação de Schrödinger,

$$H(\Theta) |u_n(\Theta)\rangle = E_n(\Theta) |u_n(\Theta)\rangle, \quad (3.7)$$

porém a evolução do sistema é governada pela seguinte equação (BERNEVIG; HUGHES, 2013),

$$H(\Theta(t)) |u_n(\Theta(t))\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |u_n(\Theta(t))\rangle, \quad (3.8)$$

e, portanto, podemos escrever (3.7) como,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |u_n(\Theta(t))\rangle = E_n(\Theta(t)) |u_n(\Theta(t))\rangle. \quad (3.9)$$

Inserindo o ansatz,

$$|u_n(\Theta(t))\rangle = e^{-i\theta(t)} |\psi_{\Theta(t)}\rangle, \quad (3.10)$$

e considerando também que,

$$\langle \psi_{\Theta(t)} | \psi_{\Theta(t)} \rangle = 1. \quad (3.11)$$

Logo, inserindo (3.10) em (3.9) vem,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\theta(t)} |\psi_{\Theta(t)}\rangle = E_n(\Theta(t)) e^{-i\theta(t)} |\psi_{\Theta(t)}\rangle, \quad (3.12)$$

o lado esquerdo de (3.12) vale,

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\theta(t)} |\psi_{\Theta(t)}\rangle &= i\hbar \partial_t (e^{-i\theta(t)} |\psi_{\Theta(t)}\rangle) \\
 &= i\hbar ([\partial_t e^{-i\theta(t)}] |\psi_{\Theta(t)}\rangle + e^{-i\theta(t)} \partial_t |\psi_{\Theta(t)}\rangle) \\
 &= i\hbar (-i\dot{\theta}(t) e^{-i\theta(t)} |\psi_{\Theta(t)}\rangle + e^{-i\theta(t)} \partial_t |\psi_{\Theta(t)}\rangle) \\
 &= \hbar e^{-i\theta(t)} (\dot{\theta}(t) |\psi_{\Theta(t)}\rangle + i \partial_t |\psi_{\Theta(t)}\rangle). \tag{3.13}
 \end{aligned}$$

Portanto, substituindo (3.13) em (3.12)

$$\hbar e^{-i\theta(t)} (\dot{\theta}(t) |\psi_{\Theta(t)}\rangle + i \partial_t |\psi_{\Theta(t)}\rangle) = E_n(\Theta(t)) e^{-i\theta(t)} |\psi_{\Theta(t)}\rangle, \tag{3.14}$$

simplificando o termo $e^{-i\theta(t)}$ em (3.14) e reordenando,

$$\dot{\theta}(t) |\psi_{\Theta(t)}\rangle = \frac{1}{\hbar} E_n(\Theta(t)) |\psi_{\Theta(t)}\rangle - i \partial_t |\psi_{\Theta(t)}\rangle. \tag{3.15}$$

Multiplicando (3.15) por $\langle \psi_{\Theta(t)} |$ (pelo lado esquerdo) vem,

$$\langle \psi_{\Theta(t)} | \dot{\theta}(t) |\psi_{\Theta(t)}\rangle = \frac{1}{\hbar} \langle \psi_{\Theta(t)} | E_n(\Theta) |\psi_{\Theta(t)}\rangle - i \langle \psi_{\Theta(t)} | \partial_t |\psi_{\Theta(t)}\rangle, \tag{3.16}$$

usando (3.11) em (3.16) obtemos

$$\begin{aligned}
 \dot{\theta}(t) \overbrace{\langle \psi_{\Theta(t)} | \psi_{\Theta(t)} \rangle}^{=1} &= \frac{1}{\hbar} E_n(\Theta) \overbrace{\langle \psi_{\Theta(t)} | \psi_{\Theta(t)} \rangle}^{=1} - i \langle \psi_{\Theta(t)} | \partial_t |\psi_{\Theta(t)}\rangle \Rightarrow \\
 \Rightarrow \dot{\theta}(t) &= \frac{1}{\hbar} E_n(\Theta) - i \langle \psi_{\Theta(t)} | \partial_t |\psi_{\Theta(t)}\rangle. \tag{3.17}
 \end{aligned}$$

Integrando (3.17) de 0 a t encontramos o fator de fase $\theta(t)$,

$$\theta(t) = \int_0^t \frac{1}{\hbar} E_n(\Theta(t')) dt' + \int_0^t (-i \langle \psi_{\Theta(t')} | \partial_{t'} |\psi_{\Theta(t')} \rangle) dt'. \tag{3.18}$$

Temos essa fase total $\theta(t)$ em (3.18) que possui dois fatores de fase, um que é relativo à evolução do sistema e outro que é relativo à **mudança de estado**, esse último fator de fase é a chamada **fase de Berry**, χ_b (NASTASE, 2017; TKACHOV, 2022). Ela desempenha um papel extremamente importante no espaço de momentum, pois **caracteriza topologias não triviais** que são uma das principais características de isolantes e supercondutores topológicos (SATO; ANDO, 2017).

No caso do contorno fechado, podemos igualar o tempo t ao tempo necessário para o sistema percorrer o ciclo, t_{ciclo} , tal que para a fase de Berry,

$$\begin{aligned}\chi_b &= \int_0^t (-i\langle\psi_{\Theta(t')}\|\partial_{t'}\|\psi_{\Theta(t')}\rangle) dt' \Rightarrow \\ \Rightarrow \chi_b &= \int_0^{t_{ciclo}} \left(-i\langle\psi_{\Theta(t')}\|\partial_{t'}\|\psi_{\Theta(t')}\rangle\right) dt',\end{aligned}\quad (3.19)$$

e ainda podemos escrever como (BERNEVIG; HUGHES, 2013; TKACHOV, 2022) da seguinte forma, a fim de eliminar o parâmetro t' ,

$$\chi_b = \oint (-i\langle\psi_{\Theta(t')}\|\nabla_{\Theta}\|\psi_{\Theta(t')}\rangle) \frac{d\Theta}{dt'} dt', \quad (3.20)$$

tal que obtemos

$$\chi_b = \oint (-i\langle\psi_{\Theta}\|\nabla_{\Theta}\|\psi_{\Theta}\rangle) d\Theta. \quad (3.21)$$

Escrevendo o integrando de (3.21) como,

$$\mathbf{A}_{\Theta}^{(n)} = -i\langle\psi_{\Theta}\|\nabla_{\Theta}\|\psi_{\Theta}\rangle, \quad (3.22a)$$

(3.22a) é a chamada **conexão de Berry** ou **vetor potencial de Berry** que se constitui como o **deslocamento de fase da função de onda**. No espaço de quasimomentum,

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{(n)} = -i\langle\psi_{\mathbf{k}}\|\nabla_{\mathbf{k}}\|\psi_{\mathbf{k}}\rangle. \quad (3.22b)$$

Para a fase de Berry obtemos por fim,

$$\chi_b = \oint d\Theta \cdot \mathbf{A}_{\Theta}^{(n)}. \quad (3.23)$$

Devemos lembrar ainda que o vetor de Berry é uma quantidade invariante sob transformação de calibre, tal que,

$$\mathbf{A}_{\Theta}^{(n)} \rightarrow \mathbf{A}_{\Theta}'^{(n)} = \mathbf{A}_{\Theta}^{(n)} - \partial_{\Theta}\varphi(\Theta), \quad (3.24)$$

assim, aplicando (3.24) em (3.23) vem,

$$\chi_b' = \oint d\Theta \cdot \mathbf{A}_{\Theta}^{(n)} - \oint d\Theta \cdot \partial_{\Theta}\varphi(\Theta), \quad (3.25)$$

tal que a segunda integral em (3.25) vale (no caso de um circuito fechado),

$$-\oint d\boldsymbol{\Theta} \cdot \partial_{\boldsymbol{\Theta}} \varphi(\boldsymbol{\Theta}) = -\left(\varphi(\boldsymbol{\Theta}(T)) - \varphi(\boldsymbol{\Theta}(0))\right) = 2\pi N, \quad (3.26)$$

com $N \in \mathbb{I}$, devido a condição de unicidade de $\exp(i\varphi(\boldsymbol{\Theta}))$, ou seja, de que $\varphi(\boldsymbol{\Theta}(T)) = \varphi(\boldsymbol{\Theta}(0))$ [Bernevig], [Superconductors: a review]. Então, tomando o caso de um circuito fechado $\mathcal{C}$ em um espaço de parâmetros de dimensão $\Theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ que é o principal foco deste tópico, temos a partir da aplicação do teorema de Stokes em (3.20) o seguinte resultado (BERNEVIG; HUGHES, 2013),

$$\chi_b = \int d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times (-i\langle\psi_{\boldsymbol{\Theta}}|\nabla|\psi_{\boldsymbol{\Theta}}\rangle)) = -i \int dS_i \epsilon_{ijk} \nabla_j (\langle\psi_{\boldsymbol{\Theta}}|\nabla_k|\psi_{\boldsymbol{\Theta}}\rangle), \quad (3.27a)$$

$$\chi_b = -i \int d\mathbf{S} \cdot (\langle\nabla\psi_{\boldsymbol{\Theta}}|\times|\nabla\psi_{\boldsymbol{\Theta}}\rangle). \quad (3.27b)$$

O termo $\langle\nabla\psi_{\boldsymbol{\Theta}}|\times|\nabla\psi_{\boldsymbol{\Theta}}\rangle$ é a chamada **curvatura de Berry**. No espaço de (quasi) momentum de dimensão dois podemos escrever (TKACHOV, 2022),

$$\chi_b = \int \mathbf{A}_k \cdot d\mathbf{k} = \int (\nabla \times \mathbf{A}_k)_k dk_i dk_j. \quad (3.28)$$

O caso de circuito fechados é de extrema importância porque mostra como mesmo após o sistema retornar ao ponto inicial **existe um valor carregado pelo vetor de onda e este é uma quantidade mensurável**, que é nula somente se ela for em si um inteiro (BERNEVIG; HUGHES, 2013).

Como definimos $A_{\boldsymbol{\Theta}}^{(n)}$ como um rotacional em (3.28), então podemos relacionar o mesmo a um certo fluxo de Berry, ϕ_b , através da superfície de caminho S para a fase de Berry χ_b ao redor do contorno C , no caso de um espaço de parâmetros 2D, tal que,

$$\phi_b = \int A_{\boldsymbol{\Theta}}^{(n)} dS = \oint d\boldsymbol{\Theta} \cdot \mathbf{A}_{\boldsymbol{\Theta}}^{(n)} = \chi_b, \quad (3.29)$$

sendo que usamos a equação (3.23). E para a **curvatura (ou campo de força da conexão) de Berry**, a definimos como se segue usando (3.27a),

$$\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{\Theta}}^{(n)} = \nabla \times (-i\langle\psi_{\boldsymbol{\Theta}}|\nabla|\psi_{\boldsymbol{\Theta}}\rangle), \quad (3.30a)$$

$$\boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{\Theta}}^{(n)} = \nabla \times \mathbf{A}_{\boldsymbol{\Theta}}^{(n)}. \quad (3.30b)$$

A mesma pode ser vista como a densidade de fluxo magnético no espaço de parâmetros. Para o caso 2D usando (3.27b) vem,

$$F_{ij}^{(n)} = \langle \nabla_i \psi_{\boldsymbol{\theta}} | \times | \nabla_j \psi_{\boldsymbol{\theta}} \rangle - (i \leftrightarrow j), \quad (3.31a)$$

ou de outra forma,

$$F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k}) = \partial_{k_i} A_{k_j}^{(n)}(\mathbf{k}) - \partial_{k_j} A_{k_i}^{(n)}(\mathbf{k}), \quad (3.31b)$$

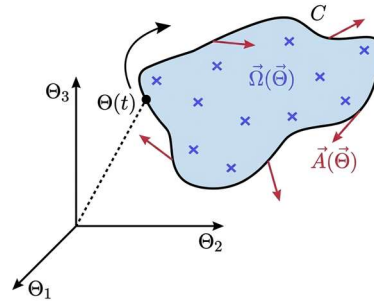
i.e.,

$$F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k}) = (\nabla \times \mathbf{A}_k)_k. \quad (3.31c)$$

No caso de um espaço de parâmetros 3D e usando a notação de pseudovetores obtemos (VANDERBILT, 2018),

$$\chi_b = \int_S \mathbf{A}_{\boldsymbol{\theta}}^{(n)} \cdot d\mathbf{S}. \quad (3.32)$$

Figura 21: Evolução adiabática e cíclica de um sistema quântico. Um parâmetro $\mathbf{R}$ é tracejado ao longo do loop fechado C no espaço de parâmetros. O vetor $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ é a conexão de Berry que se constitui como um campo vetorial que é definido ao longo do caminho C (setas vermelhas). $\vec{\Omega}(\mathbf{R})$ é a curvatura de Berry (cruzes azuis) que é uma densidade de fluxo advinda do fluxo que a conexão de Berry gera através da superfície S delimitada pelo caminho C (azul claro).



Fonte: Adaptado de SPRINKART et al. (2024, p. 691). Licenciado sob Creative Commons 4.0 (CC BY 4.0).

3.1.1.4 Fórmula TKNN e Número de Chern

Em 1982 D.J. Thouless, M. Kohmoto, M.P. Nightingale e M. den Nijs (1982) lançaram o artigo chamado Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional

Periodic Potential, nesse artigo derivam uma fórmula importante conhecida como TKNN (Thouless-Kohmoto-Nightingale-den Nijs) e que serviu para caracterizar os estados do efeito Hall em termos de múltiplos inteiros usando a fórmula de Kubo no caso de potenciais periódicos. Essa fórmula elucida uma questão que surge quando pensamos se o **valor quantizado obtido no efeito hall quântico inteiro (EHQI) e o obtido no número de Chern (Ch) pertencem a mesma classe** e a resposta que obtemos é que sim (THOULESS et al., 1982; HASAN; KANE, 2010; SATO; ANDO, 2017; TKACHOV, 2022).

O invariante de TKNN é derivado a partir da chamada fórmula de Kubo da condutividade quando aplicada a um potencial periódico 2D. A fórmula de Kubo foi desenvolvida em 1957-1959 e **são funções de correlação que descrevem resposta linear**, que no caso em específico referem-se a **equações para condutividade elétrica nos sólidos** (MAHAN, 2000).

Da fórmula de Kubo,

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{ie^2\hbar}{a} \sum_{l,m} \frac{f(E_l) - f(E_m)}{E_l - E_m} \frac{\langle l|v_\alpha|m\rangle\langle m|v_\beta|l\rangle}{\hbar\omega + E_l - E_m}, \quad (3.33)$$

com $\langle l|v_\alpha|m\rangle$ sendo o elemento matricial da projeção α do operador velocidade v_α entre os estados quânticos $|l\rangle$ e $|m\rangle$ com energias E_l e E_m .

A condutividade Hall (transversa) σ_{xy} , no limite de frequência e temperaturas nulas é,

$$\sigma_{xy} = -\frac{ie^2\hbar}{a} \sum_{l,m} [\Theta(\mu - E_l) - \Theta(\mu - E_m)] \frac{\langle l|v_x|m\rangle\langle m|v_y|l\rangle}{(E_l - E_m)^2}, \quad (3.34)$$

onde μ é o nível de Fermi, entre os dois níveis arbitrários de energia E_l e E_m e $\Theta(E)$ é a função escada unitária. E resulta em

$$\sigma_{xy} = -\frac{ie^2}{\hbar a} \sum_{E_l < \mu} \langle l|xy - yx|l\rangle. \quad (3.35)$$

Ao realizarmos algumas operações (obter o valor de $\langle l|xy|l\rangle$ e definir a conexão de Berry) considerando a zona de Brillouin retangular com condições periódicas encontramos a fórmula TKNN (TKACHOV, 2022),

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \int_{BZ} \frac{dk_x dk_y}{2\pi} (\nabla \times \mathbf{A}_k)_z. \quad (3.36)$$

O invariante TKNN é visto como o 1º número de Chern. O teorema de Chern estabelece que, no limite contínuo, **o fluxo de Berry calculado em uma certa região (variedade) S fechada 2D é quantizada em 2π vezes um número inteiro, i.e.,**

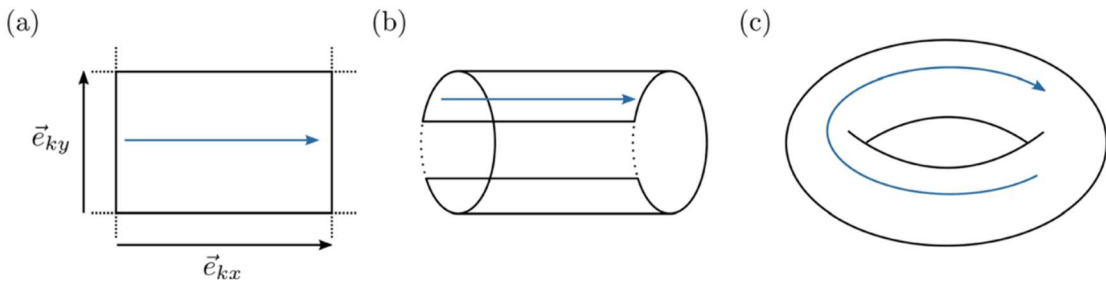
$$\oint_S \mathbf{A}_\Theta^{(n)} \cdot d\mathbf{S} = 2\pi Ch, \quad (3.37)$$

onde Ch é o número de Chern (VANDERBILT, 2018).

O **número de Chern** é definido como a **integral sobre a Zona de Brillouin (ZB) em duas dimensões da curvatura (ou campo de força da conexão) de Berry**, que no caso da n -ésima banda ocupada será, usando (3.29),

$$Ch^{(n)} = \frac{1}{2\pi} \int_{ZB-2d} dk_i dk_j F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k}). \quad (3.38)$$

Figura 22: Representação da topologia do espaço recíproco, onde um vetor de onda $\mathbf{k}$ viaja na direção x . (a) Ao vetor de onda $\mathbf{k}$ atravessar de uma célula a outra, é como se ele entrasse na mesma célula novamente, porque o espaço recíproco é periódico e as células unitárias são indistinguíveis. Dessa forma, primeiro o espaço recíproco infinito pode ser modelado como um espaço finito ao se conectar as células unitárias ao longo dos lados paralelos a $\mathbf{e}_{kx}$, (b) então, se conecta ao longo dos lados paralelos a $\mathbf{e}_{ky}$, (c) de forma que o espaço recíproco tem a topologia equivalente à de um toro, onde o vetor de onda percorre um caminho fechado.



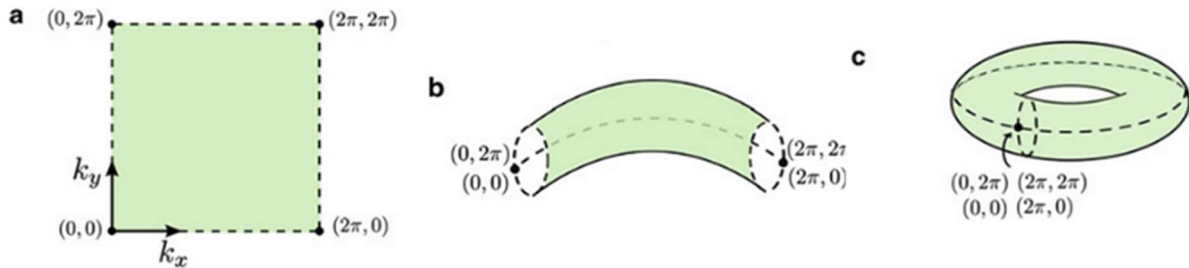
Fonte: Reproduzido de SPRINKART et al. (2024, p. 693). Licenciado sob Creative Commons 4.0 (CC BY 4.0).

Podemos considerar a zona de Brillouin em 2D como um toro. No espaço real a periodicidade do potencial cristalino conduz ao teorema de Bloch, equação (2.4). Além da periodicidade da rede cristalina no espaço real, existe uma periodicidade equivalente no espaço recíproco de forma que a condição $\psi_n(\mathbf{k}) = \psi_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})$ é válida, quando rigorosamente os autovalores de energia da n -ésima banda são dados por

$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k} + \mathbf{G})$, constituindo a estrutura de bandas do sistema cristalino. Como $\mathbf{G}$ é um vetor da rede recíproca, essa condição implica que na propagação do vetor de onda entre as células unitárias é como se na visão dele ele adentrasse a mesma célula unitária infinitas vezes, já que elas são indistinguíveis. Como resultado a zona de Brillouin possui a topologia de um torus em que o vetor de onda $\mathbf{k}$ percorre um caminho fechado em sua superfície (SPRINKART ET AL., 2024).

O número de Chern acima é associado a cada banda de energia, no caso do índice de Chern ser não nulo o sistema é chamado de **isolante de Chern ou isolante Hall quantum-anômalo**. Assim, podemos entender agora o significado físico do número de Chern que é o de **caracterizar a contribuição de cada banda de energia preenchida por elétrons (para o efeito Hall quântico inteiro ou outros efeitos Hall quânticos)**. E, portanto, ele atua efetivamente para a TTB como um parâmetro de ordem para materiais que quebram a SRT no sentido de indicar se são ITs conforme os elementos citados.

Figura 23: Equivalência da primeira zona de Brillouin a um torus. As quatro extremidades do retângulo viram um único ponto na superfície do torus.



Fonte: Adaptado de SHEN (2012, p. 212).

A equação acima ainda pode ser escrita como se segue usando o teorema de Stokes,

$$Ch^{(n)} = \frac{1}{2\pi} \int_{\partial R} d\mathbf{k} \cdot \partial_{\mathbf{k}} \varphi(\mathbf{k}), \quad (3.39)$$

sendo que ∂R é o contorno da região R .

O fator de fase da solução da eq. de Bloch é uma função única, como podemos ver por (3.10), em ∂R de maneira que o número de $Ch^{(n)}$ deve ser um inteiro.

Seguindo a abordagem de Ando (2013), o número total de Chern Ch de bandas ocupadas para um isolante 2D é dado por,

$$Ch = \sum_{E_n \in E_f} Ch^{(n)}. \quad (3.40)$$

Junto desse aspecto conseguimos então relacionar a condutância Hall (transversal) ao número de Chern tal que,

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar} Ch, \quad Ch \in \mathbb{Z}. \quad (3.41)$$

Um aspecto de extrema importância é a transformação de reversão temporal da conexão de Berry e do campo de força da conexão de Berry totais para as bandas ocupadas como se segue,

$$\sum_{E_n \in E_f} A^{(n)}(\mathbf{k}) \rightarrow \sum_{E_n \in E_f} A^{(n)}(-\mathbf{k}), \quad (3.42)$$

$$\sum_{E_n \in E_f} F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k}) \rightarrow - \sum_{E_n \in E_f} F_{ij}^{(n)}(-\mathbf{k}). \quad (3.43)$$

E por conseguinte, para o número de Chern, usando (3.38) e (3.43),

$$Ch^{(n)} = \frac{1}{2\pi} \int_{ZB-2d} dk_i dk_j F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k}), \quad (3.44)$$

$$Ch^{(n)} = \frac{1}{2\pi} \int_{ZB-2d} dk_i dk_j \left[\sum_{E_n \in E_f} F_{ij}^{(n)}(\mathbf{k}) \right], \quad (3.45)$$

$$Ch^{(n)} = -\frac{1}{2\pi} \int_{ZB-2d} dk_i dk_j \left[\sum_{E_n \in E_f} F_{ij}^{(n)}(-\mathbf{k}) \right], \quad (3.46)$$

$$Ch^{(n)} = -Ch^{(n)}, \quad (3.47)$$

O que nos leva a $Ch^{(n)} = 0$ e nos evidencia que $Ch^{(n)} \neq 0$ somente quando há quebra da SRT, e assim **a quebra da SRT é necessária para o número de Chern ser não nulo e termos a existência do efeito Hall.**

3.1.1.5 Estados de borda e correspondência bulk-boundary

Da ideia apresentada quando lidamos com o efeito Hall Quântico Inteiro vimos que os estados de borda propagantes podem ser entendidos como elétrons realizando trajetórias semicirculares nas quais colidem com as bordas em uma frequência aproximadamente ciclotron.

Halperin (1982) nos mostra que **a propriedade topológica no bulk do material aparece nas bordas do material como estados metálicos que são protegidos topologicamente**, além disso os estados de borda são **localizados dentro do raio aproximadamente ciclotron, mas são estendidos ao redor do perímetro da amostra**.

Mesmo **na presença de desordem moderada** os estados de borda permanecem estendidos e continuam a carregar corrente pela amostra por serem **estados quirais – se propagam somente em uma direção e são robustos contra desordem** devido a não termos “back scattering”, i.e., estados contra-propagantes que possam causar espalhamento.

Nesses materiais temos o seguinte aspecto de interesse vital:

- **Interior (bulk): temos uma estrutura de bandas com intervalos de energia;**
- **Contornos (bordas): sem intervalos de energia - é justamente a região da interface onde o invariante topológico muda.**

A correspondência bulk-boundary nos diz que (HASAN; KANE, 2010) **a diferença no número de modos de movimento** da direita e da esquerda (mudança do número de Chern na interface) depende somente da **estrutura topológica dos estados de bulk** e não pode ser alterada,

$$\Delta n = n_d - n_e, \quad (3.48)$$

com Δn sendo a diferença no número de Chern pela interface.

Uma outra forma de ver isso é através de Hatsugay (1993). O invariante TKNN foi definido originalmente em um sistema infinito sem bordas e a condutância é a integral do número de Chern sob a zona de Brillouin magnética, de forma que esse invariante é descrito em termos das funções de onda do bulk. Já nos sistemas com bordas usamos o **número de enrolamento (winding number)**, n_w , a fim de determinar a condutância numa superfície de Riemann.

O principal resultado é que a condutância da n-ésima banda preenchida é dada por,

$$\sigma_{xy}^{n,bulk} = \frac{e^2}{h} [I(C_j) - I(C_{j-1})] \Rightarrow \sigma_{xy}^{n,edge}, \quad (3.49)$$

onde $I(C_j)$ é a vorticidade da banda de cima e $I(C_{j-1})$ é a vorticidade da banda logo abaixo. **Vorticidade** aqui é o nome que damos ao **campo de vórtices “criado” ao escrevermos a integral sob a curvatura de Berry usando o teorema de Stokes**, i.e., como uma integral de linha em torno das superfícies no caminho tomado (FÜNFHAUS et al., 2022), de forma que estamos **contando o número de enrolamentos**.

3.1.1.6 Polarização elétrica e pump de corrente

A polarização elétrica $\mathbf{P}$ é um conceito importante em eletrodinâmica e é definida como o momento de dipolo elétrico por volume em um material dielétrico e refere-se à separação relativa de cargas de sinal oposto, i.e., deformação da nuvem eletrônica de um estado de equilíbrio a outro, devido a um campo elétrico externo ou cargas livres no material.

Na evolução adiabática cíclica considerando a 1ª lei de Maxwell (NUNES, 2023) e seguindo Shen (2012), temos que,

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = -\rho(t), \quad (3.50)$$

onde $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$, sendo $\mathbf{E}$ o campo elétrico, $\mathbf{P}$ a densidade de polarização e o termo $\rho(t)$ é a densidade de carga dependente do tempo. Considerando o caso de um sólido sem campo elétrico líquido da equação da continuidade, $\partial_t \rho = -\nabla \cdot \mathbf{j}$. Assim, reorganizando a equação anterior e colocando esses últimos resultados,

$$\nabla \cdot (\partial_t \rho - \mathbf{j}) = 0, \quad (3.51)$$

onde $\mathbf{j}$ é a densidade de corrente macroscópica. A densidade de polarização na evolução adiabática cíclica será,

$$\Delta P_\alpha = \int_0^T j_\alpha dt, \quad (3.52)$$

a equação acima é a base da teoria moderna de polarização e está conectada a fase de Berry, $j_\alpha = \sigma_H \epsilon_{\alpha\beta} E_\beta$. Considerando o teorema adiabático quântico (SHEN, 2012), $\partial_t a_n = 0$ (a_n são os autoestados instantâneos), i.e., no processo de evolução

adiabática cíclica o sistema ao partir de um estado inicial permanecerá no mesmo posteriormente. No caso geral em que o vetor de parametrização possui a propriedade $\partial_t \mathbf{R}(t) = 0$ e na introdução de um campo elétrico externo, o cálculo da correção quântica dos estados irá cair no cálculo da velocidade média. Então, a velocidade transversa anômala (proporcional a curvatura de Berry) será dada por (SHEN, 2012),

$$v_n(q) = \frac{1}{\hbar} \nabla_q E_n(\mathbf{q}) - \Omega_{q,t}^{(n)}, \quad (3.53)$$

onde

$$\Omega_{q,t}^{(n)} = i (\langle \nabla_q u_n | \partial_t u_n \rangle - \langle \partial_t u_n | \nabla_q u_n \rangle), \quad (3.54)$$

de forma que da velocidade anômala obtemos,

$$\Delta P_\alpha = e \sum_{n=\text{todas as bandas ocupadas}} \int_0^T dt \int_{\text{ZB}} \frac{\Omega_{q,t}^{(n)}}{(2\pi)^D} \Omega_{q_\alpha,t}^{(n)}. \quad (3.55)$$

O que como relata King-Smith e Vanderbilt (1993) em seu trabalho sobre teoria de polarização dos sólidos cristalinos, quando relacionado as funções de Wannier ao considerarmos todos os centros de carga dos estados de Wannier, a polarização é dada por,

$$P = -\frac{e}{2\pi} \oint d\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}), \quad (3.56)$$

i.e., o deslocamento desse centro de carga.

O pump (bombeamento) de corrente de Thouless são bombeamentos quânticos que permitem a passagem de carga de maneira quantizada na evolução de um ciclo adiabático que varia de forma lenta no tempo. O transporte de carga no caso de sistema topológicos é quantizado e determinado pela topologia do ciclo de bombeamento (CITRO; AIDELSBURGER, 2023). Para um IT 1D no caso de uma evolução cíclica adiabática temos (SHEN, 2012),

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}, t + T) = \mathcal{H}(\mathbf{k}, t), \quad (3.57)$$

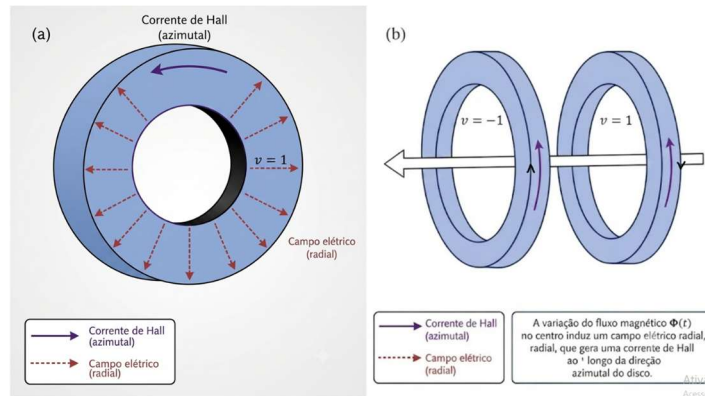
assim, a carga bombeada é sempre um inteiro e definido como um invariante topológico que conhecemos como polarização elétrica,

$$\Delta P = \frac{e}{2\pi} \oint [A(k, t) - A(k, 0)] dk \Rightarrow \Delta P = nea, \quad (3.58)$$

onde n é o número de Chern da banda ocupada, e é a carga eletrônica e a é a constante de rede.

O famoso argumento de Laughlin (LAUGHLIN, 1981; NAKAI et al., 2017) é construído a partir de uma fita de metal 2D em forma de laço de comprimento L que é sujeita a um campo magnético H_0 normal a sua superfície. Tomando então um gás de elétrons 2D que é descrito a partir do Hamiltoniano $H = (1/2m)[\mathbf{p} - e\mathbf{A}]^2$ (ver apêndice) onde o termo $\tilde{\pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$ é o chamado pseudo-momentum. A partir do processo adiabático em que um fluxo magnético quântico $\phi_0 = 2\pi\hbar/|e|$ é passado pelo comprimento do cilindro o potencial vetorial muda da seguinte forma: $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + (2\pi\hbar/|e|L, 0)$. O Hamiltoniano retorna a uma forma equivalente devido ao uso de um gauge simétrico que mantém o sistema invariante de calibre. Entretanto, durante a inserção do fluxo há transporte líquido de carga de uma borda a outra do sistema.

Figura 23: Ilustração da configuração do argumento de Laughlin.



Fonte: Elaborado pelo autor.

3.1.1.7 Topologia das bandas Z2

A partir da consideração da simetria no Hamiltoniano obtemos fases topológicas diferentes (em até 3 dimensões) dos estados de efeito Hall Quântico como coloca Ando (2013). Assim sendo **na presença de SRT**:

- Em 2-D: Fase spin Hall quântico (modelo para o 2-D Quantum Spin Hall Insulator, i.e., Isolante Topológico 2-D);
- Em 3-D: Isolante topológico;

Partindo de um modelo de duas bandas que possui a SRT e que formam um par de Kramer, os invariantes topológicos serão associados aos estados de Bloch e por consequência esses serão os invariantes Z_2 de Fu-Kane. A fim de calcular esses invariantes tomaremos um sistema 1D com constante de rede a e com estados de Bloch dados por $|u_1(k)\rangle$ e $|u_2(k)\rangle$. Além disso, considerando que os parâmetros de banda mudam com o tempo e nos retornam aos valores originais em $t = T$, de forma que o Hamiltoniano de Bloch é periódico no tempo com período T , e possui as seguintes propriedades

$$H(t + T) = H(t), \quad (3.59)$$

$$H(-t) = \Theta H(t) \Theta^{-1}, \quad (3.60)$$

porém, King-Smith e Vanderbilt com sua moderna teoria da ferroeletricidade nos dizem que a polarização de carga será dada pela integração da conexão de Berry dos estados ocupados sobre a ZB. Em nosso caso,

$$P_\rho = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A(k)}{2\pi} dk. \quad (3.61)$$

A contribuição de cada banda pode ser escrita como,

$$P_\rho = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{a_{ii}(k)}{2\pi} dk \quad (i = 1, 2), \quad (3.62)$$

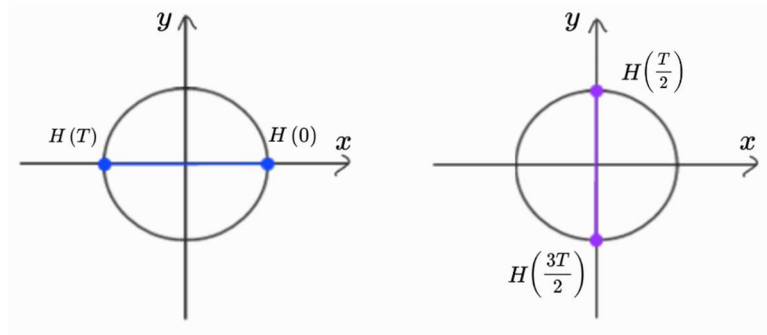
devido a $A(k) = \text{tr}(a)$. A polarização de reversão temporal é definida como

$$P_\theta = P_1 - P_2, \quad (3.63)$$

que nos retorna a diferença de polarização entre as bandas de spin-up e spin-down, já que os estados de Bloch $|u_1(k)\rangle$ e $|u_2(k)\rangle$ formam um par de Kramer. O Hamiltoniano que satisfaz (3.59) e (3.60) obedece a SRT em $t = 0$ e $t = T/2$. Devido a isso, no espaço de fase temos,

$$H(t + T) = H(t) = \begin{cases} t = 0 \Rightarrow H(T) = H(0) \\ t = \frac{T}{2} \Rightarrow H\left(\frac{3T}{2}\right) = H\left(\frac{T}{2}\right) \end{cases}, \quad (3.64)$$

Figura 24: Ilustração do resultado da equação (3.64).



Fonte: Elaborado pelo autor.

além disso,

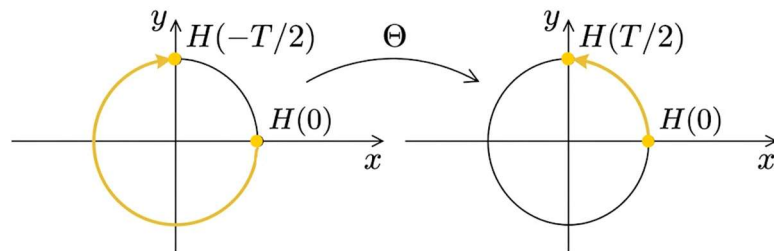
$$E(T) = E(0), \quad (3.65)$$

$$E\left(\frac{3T}{2}\right) = E\left(\frac{T}{2}\right). \quad (3.66)$$

Além disso, considerando a SRT,

$$H(-t) = \Theta H(t) \Theta^{-1} = \begin{cases} t = 0 \Rightarrow H(0) = \Theta H(0) \Theta^{-1} \\ t = \frac{T}{2} \Rightarrow H\left(-\frac{T}{2}\right) = \Theta H\left(\frac{T}{2}\right) \Theta^{-1}. \end{cases} \quad (3.67)$$

Figura 25: Ilustração esquemática do resultado da equação (3.67).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Para qualquer ponto k , com estados degenerados temos $|u_2(k)\rangle = \Theta |u_1(-k)\rangle$. Então, em $t = 0$ e $t = T/2$,

$$\Theta |u_1(k)\rangle = -e^{-i\chi(-k)} |u_2(-k)\rangle, \quad (3.68)$$

$$\Theta |u_2(k)\rangle = e^{-i\chi(k)} |u_1(-k)\rangle, \quad (3.69)$$

onde, $e^{-i\chi(-k)}$ é um fator de fase. Levando em conta as relações anteriores a matriz de reversão w que é hermitiana é dada a partir de

$$w = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\chi(k)} \\ -e^{-i\chi(-k)} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.70)$$

A polarização da banda um, P_1 , vale,

$$\begin{aligned} P_1 &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{a_{11}(k)}{2\pi} dk = \frac{1}{2\pi} \left[\int_{-\pi}^0 a_{11}(k) dk + \int_0^{\pi} a_{11}(k) dk \right], \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} dk [a_{11}(-k) + a_{11}(k)] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} dk \left[a_{22}(k) - \frac{\partial}{\partial k} \chi(k) + a_{11}(k) \right] \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \text{tr}[\mathbf{A}(k)] - \frac{1}{2\pi} [\chi(\pi) - \chi(0)]. \end{aligned} \quad (3.71)$$

O elemento de matriz $w_{12}(k)$ é escrito como $w_{12}(k) = e^{-i\chi(k)}$, tal que encontramos $\chi(k)$ como,

$$\chi(k) = i \log w_{12}(k), \quad (3.72)$$

assim, inserindo esse resultado em (3.71) vem,

$$P_1 = \int_0^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \text{tr}[a(k)] - \frac{i}{2\pi} \log \frac{w_{12}(\pi)}{w_{12}(0)}. \quad (3.73)$$

Considerando que podemos escrever a polarização de reversão temporal como $P_{\theta} = 2P_1 - P_{\rho}$, encontramos por fim,

$$P_{\theta} = \frac{1}{i\pi} \log \left[\frac{\sqrt{w_{12}(0)^2}}{w_{12}(0)} \cdot \frac{w_{12}(\pi)}{\sqrt{w_{12}(\pi)^2}} \right]. \quad (3.74)$$

O argumento dentro da função logarítmica é $+1$ ou -1 , considerando que $\log(-1) = i\pi$, então P_{θ} pode ser 0 ou 1, além disso se considerarmos o plano complexo de 0 a 2π no espaço de fase então temos que P_{θ} pode ser vista como *mod 2*.

Podemos considerar o sistema descrito acima como 1D de forma que P_{θ} representa a polarização dele nos instantes $t = 0$ e $t = T/2$, assim ao considerarmos uma mudança da polarização a função de onda $|u_n(k, t)\rangle$ pode ser vista como uma

função que mapeia o espaço 2D (k, t) (torus) para o espaço de Hilbert. A diferença de **polarização de reversão temporal (PRT)** nos instantes acima é dada por

$$\nu = P_\theta(t = T/2) - P_\theta(t = 0), \quad (3.75)$$

assim, o quanto um estado de Bloch muda de PRT é dado por,

$$(-1)^\nu = \prod_{\alpha=1}^4 \frac{w_{12}(\Lambda_\alpha)}{\sqrt{w_{12}(\Lambda_\alpha)^2}}, \quad (3.76)$$

onde os pontos Λ_α são os TRIM tomando a periodicidade em t . No caso geral de um sistema de N bandas com funções de onda dadas por,

$$\Theta|u_1^{(n)}(k)\rangle = -e^{-i\chi_n(-k)}|u_2^{(n)}(-k)\rangle, \quad (3.77)$$

$$\Theta|u_2^{(n)}(k)\rangle = e^{-i\chi_n(k)}|u_1^{(n)}(-k)\rangle, \quad (3.78)$$

tal que a PRT é dada por

$$P_\theta = \frac{1}{i\pi} \log \left[\frac{\sqrt{\det[w(0)]}}{Pf[w(0)]} \cdot \frac{Pf[w(\pi)]}{\sqrt{\det[w(\pi)]}} \right], \quad (3.79)$$

sendo Pf o Pfaffiano o qual é definido para uma matriz antissimétrica qualquer A e está relacionado ao determinante

$$Pf[A]^2 = \det[A], \quad (3.80)$$

no caso da matriz w ,

$$Pf[w(\Lambda_\alpha)] = w_{12}(\Lambda_\alpha)w_{34}(\Lambda_\alpha) \dots w_{2N-1,2N}(\Lambda_\alpha), \quad (3.81)$$

por fim o invariante topológico ν pode ser escrito como

$$(-1)^\nu = \prod_{\alpha=1}^4 \frac{Pf[w(\Lambda_\alpha)]}{\sqrt{\det[w(\Lambda_\alpha)]}}. \quad (3.82)$$

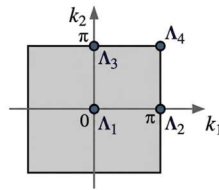
Esse invariante classifica o espaço de Hilbert em torcido $\nu = 1$ quando P_θ muda e $\nu = 0$ trivial quando P_θ não se altera. $\nu = 1$ implica no pump de spin de uma ponta ao fim de um sistema 1D, também conhecido como **pump de spin de Fu e Kane** (FU; KANE, 2006). Assim, no espaço- k 2D quando $\nu = 1$ temos um isolante topológico e quando $\nu = 0$ temos um isolante comum.

O significado físico por trás do invariante não trivial Z_2 é o aparecimento de estados de superfície topologicamente protegidos que aparece devido a diferença de topologia de bandas entre dois meios e os estados de superfície são robustos contra perturbações que mantenham a SRT.

O destacado anteriormente está conectado ao fato dos pares de Kramers nos estados de superfície “trocar os parceiros”, que é reflexo da PRT e que faz com que o estado de superfície cruze o nível de energia de Fermi dentro do gap do bulk (ANDO, 2013).

A extensão a sistemas 3D ocorre a partir do desenvolvimento por Moore e Balents usando homotopia, que trata do estudo de deformações contínuas em funções ou caminhos, que existem quatro invariantes Z_2 para sistemas 3D. Fisicamente tomando um sistema cúbico com constante de rede $a = 1$. Tomamos então seis planos (mostrado abaixo) que contém quatro TRIMs Λ_α os quais originam um invariante Z_2 assim como para os materiais 2D.

Figura 26: Momenta invariante sob reversão temporal Λ_i ($i = 1, 2, \dots$) na zona de Brillouin. (a) caso 2D e (b) caso 3D.

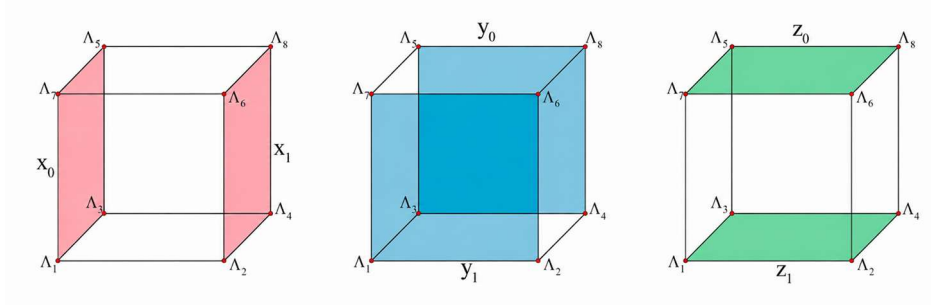


Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Rotulamos os planos como x_0, x_1, y_0, y_1, z_0 e z_1 sendo que podemos calcular o invariante Z_2 para cada um deles. Porém, os produtos x_0x_1, y_0y_1 e z_0z_1 são redundantes e fornecem o mesmo resultado do produto dos Pfaffianos nos oito pontos TRIM na ZB, de forma que encontramos a equação

$$x_0x_1 = y_0y_1 = z_0z_1 = \prod_{\alpha=1}^8 \delta(\Lambda_\alpha). \quad (3.83)$$

Figura 27: Ilustração dos pontos TRIM rotulados por Λ_α em que $\alpha = 1 \dots 8$. Planos x_0, x_1, y_0, y_1, z_0 e z_1 utilizados nos cálculos dos invariantes Z_2 em materiais 3D.



Fonte: Adaptado de FAZZIO (2025, p. 8).

Podemos então, eliminar pelo menos dois invariantes Z_2 dependentes de outros. A cada material em três dimensões pode ser associado um conjunto de quatro invariantes Z_2 ,

$$(\nu_0; \nu_1 \nu_2 \nu_3), \quad (3.84)$$

no qual o invariante ν_0 é associado ao produto do Pfaffianos em todos os TRIM e é utilizado na classificação dos ITs 3D em fracos ou fortes como veremos mais à frente. Os invariantes $(\nu_1 \nu_2 \nu_3)$ podem ser interpretados como os **índices de Miller** para uma dada direção do vetor Λ_α no espaço recíproco.

Para materiais que possuem a simetria de paridade (chamada muitas vezes de inversão) também conhecidos como materiais centrossimétricos ainda é possível definir o invariante Z_2 de uma maneira mais simples como mostraremos abaixo. A simetria de paridade nesses sistemas

$$\mathbb{P}|\mathbf{r}, \sigma\rangle = |-\mathbf{r}, \sigma\rangle, \quad (3.85)$$

veja o apêndice. Nos pontos TRIM

$$\mathbb{P}H\mathbb{P}^{-1} = H, \quad (3.86)$$

de maneira que os autoestados de Bloch nesses pontos também são autoestados do operador de paridade. Da eq. (2.62) e (2.63), nas quais calculamos a curvatura de Berry no modelo de duas bandas e seu traço tal que a curvatura de Berry do modelo de duas bandas usando (3.30b) considerando que o modelo obedece a SRT

$$\begin{aligned} \Omega(\mathbf{k}) &= \nabla_{\mathbf{k}} \times \text{tr}[\mathbf{A}(\mathbf{k})] \\ &= \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}^c(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (3.87)$$

que é a curvatura de Berry do vetor $A^c(\mathbf{k})$, além disso as simetrias de inversão e RT quando aplicadas em $\Omega(\mathbf{k})$ vem

$$\Omega(-\mathbf{k}) \xrightarrow{\mathbb{P}} +\Omega(\mathbf{k}), \quad (3.88)$$

$$\Omega(-\mathbf{k}) \xrightarrow{\mathbb{T}} -\Omega(\mathbf{k}), \quad (3.89)$$

assim como para o **campo magnético**, o que nos informa que a curvatura de Berry do sistema é $\Omega(\mathbf{k}) = 0 \forall \mathbf{k} \in ZB$. Tomando um calibre que faça $\Omega(\mathbf{k}) = 0$ obtemos então a seguinte matriz

$$v_{ij}(\mathbf{k}) = \langle u_{ik} | \mathbb{P} \Theta | u_{ik} \rangle, \quad (3.90)$$

com as propriedades de ser antissimétrica e unitária

$$v_{ij}(\mathbf{k}) = -v_{ji}(\mathbf{k}) \quad (3.91)$$

$$\sum_j v_{ij}(\mathbf{k}) v_{lj}(\mathbf{k})^* = \delta_{il}. \quad (3.92)$$

De forma que a relação entre a conexão de Berry e a matriz v

$$\frac{i}{2} \text{tr}[v^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} v] = \Omega(\mathbf{k}), \quad (3.93)$$

e que a partir de propriedades da unitariedade e do traço como $\text{tr}[v^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} v] = \nabla_{\mathbf{k}} \text{tr}(\log v) = \nabla_{\mathbf{k}} \log[\det(v)]$,

$$\begin{aligned} \Omega(\mathbf{k}) &= \frac{i \nabla_{\mathbf{k}}}{2} \log\{\det[v(\mathbf{k})]\} \\ &= i \nabla_{\mathbf{k}} \log Pf[v(\mathbf{k})], \end{aligned} \quad (3.94)$$

que colocando $Pf[v(\mathbf{k})] = 1$ obtemos $\Omega(\mathbf{k}) = 0$.

Após os cálculos dos elementos de matrizes da matriz w e de considerações relacionadas ao operador Θ

$$\Theta |u_i(\Lambda_\alpha)\rangle = \xi_{2i}(\Lambda_\alpha) |u_i(\Lambda_\alpha)\rangle, \quad (3.95)$$

$$w_{ij}(\Lambda_\alpha) = \xi_i(\Lambda_\alpha) v_{ij}(\Lambda_\alpha), \quad (3.96)$$

como o uso da propriedade $w_{ij} = -w_{ji} \neq 0$ e de que $\xi_i = \xi_j = \xi_{2n}$ com n sendo o n -ésimo par de Kramers no ponto TRIM Λ_α . Além disso, das propriedades do Pfaffiano, encontramos,

$$\delta(\Lambda_\alpha) = \prod_{n=1}^N \xi_{2n}(\Lambda_\alpha), \quad (3.97)$$

Portanto, para **materiais que possuem SRT** podemos definir então outro invariante topológico que chamamos de Z_2 e que é definido da seguinte forma em 2D,

$$(-1)^{v_{2D}} = \prod_{\alpha=1}^4 \delta(\Lambda_\alpha) = \prod_{\alpha=1}^4 \prod_{n=1}^N \xi_{2n}(\Lambda_\alpha), \quad (3.98)$$

3.1.2 Teoria Topológica de Campos (TTC)

3.1.2.1 Teoria Básica

A teoria topológica de campos (TTC) se concentra na formulação de teorias efetivas dadas por Hamiltonianos de baixas energias, assim sendo essa é uma teoria interagente para tratar os isolantes topológicos. A TTC como toda teoria de campos é definida a partir de uma ação efetiva dada por,

$$S_{efetiva} = S_{Maxwell} + S_{\theta}, \quad (3.99)$$

onde o primeiro termo da direita é o termo referente a ação da teoria de Maxwell e que é dado por,

$$S_{Maxwell} = \int dt d^3r \frac{1}{16\pi} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}, \quad (3.101)$$

e o segundo termo é devido a topologia e é conhecido como termo- θ . Os termos $F_{\mu\nu}$ e $F^{\mu\nu}$ são os tensores de campo eletromagnético. Esse termo acima é escrito como,

$$S_{\theta} = \int dt d^3r \frac{\theta e^2}{4\pi^2 \hbar c} \mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = \int dt d^3r \frac{\theta \alpha}{32\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} F_{\mu\nu} F_{\sigma\tau}. \quad (3.102)$$

Em sistemas de matéria condensada os aspectos que captam atributos universais do sistema tratado são os chamados parâmetros de ordem e veremos como que eles aparecem no caso da TTC. O termo α é a constante de estrutura fina.

3.1.2.1.1 Teoria de Chern-Simons em (2+1) D

Em (2+1) D temos duas famílias de isolantes de Chern (QI et al., 2008):

- Família 1: caracterizada pelo primeiro número de Chern tal que, $C_1 \in \mathbb{Z}$ e simetria não necessária, com principais propriedades sendo a presença do efeito Hall quântico e anomalia axial nos contornos. Sua densidade Lagrangiana é,

$$\mathcal{L} = \frac{C_1}{2\pi} A_{\mu} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_{\nu} A_{\rho}, \quad (3.103)$$

- Família 2: caracterizada pela segunda paridade (do número) de Chern tal que, $N_2 = N_3[h_0, h] \in \mathbb{Z}_2$, com simetria de reversão temporal necessária e propriedades física sendo – efeito Hall quântico de spin, metade da carga na parede de domínio de anti-fase no contorno. Sua densidade Lagrangiana é,

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2\pi} A_\mu \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu \Omega_\rho. \quad (3.104)$$

nessas equações acima os termos A_μ e A_ρ são campos externos e Ω_ρ é um vetor potencial de calibre. A teoria de Chern-Simons em (2+1) D (S eq. 115) possui a seguinte ação efetiva a qual captura todos os aspectos da física de baixas energias,

$$S_{(2+1)D} = \frac{C_1}{4\pi} \int d^2x \int dt A_\mu \epsilon^{\mu\nu\tau} \partial_\nu A_\tau, \quad (3.105)$$

isto é,

$$S_{2D} = \frac{1}{2\pi} \int d^2x dt \epsilon^{\mu\nu\tau} A_\mu \partial_\nu \Omega_\tau, \quad (3.106)$$

que é a forma independente de parâmetros. O termo Ω_τ ($\Omega = \Omega_\theta, \Omega_\phi$) é um vetor potencial de calibre dado por

$$\Omega_\mu \equiv \Omega_\theta \partial_\mu \delta\theta + \Omega_\phi \partial_\mu \delta\phi. \quad (3.107)$$

Além disso C_1 é dado por,

$$C_1 = \frac{\pi}{3} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \text{Tr}[\epsilon^{\mu\nu\rho} (G \partial_\mu G^{-1}) (G \partial_\nu G^{-1}) (G \partial_\rho G^{-1})], \quad (3.108)$$

com $G(k) \equiv G(\mathbf{k}, \omega)$ é a função de Green de partícula única com tempo imaginário. No presente caso, essa é a função de Green de um isolante topológico interagente e $\mu\nu\rho = t, x, y$. Para o limite não interagente (TTB) encontramos,

$$C_1 = \frac{1}{2\pi} \int dk_x \int dk_y f_{xy}(\mathbf{k}) \in \mathbb{Z}, \quad (3.109)$$

e possui o seguinte Lagrangiano,

$$\mathcal{L} = -\frac{2k}{4\pi} b_\mu \epsilon^{\mu\nu\lambda} \partial_\nu (a_\lambda - A_\lambda^{ex}) + \frac{Ch}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\lambda} a_\mu \partial_\nu a_\lambda. \quad (3.110)$$

onde $a_\lambda, a_\mu, a_\lambda$ são vetores de calibre da fase de Berry. A corrente nesse caso será dada por,

$$j^\mu = \frac{1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu \Omega_\rho. \quad (3.111)$$

3.1.2.1.2 Teoria de Chern-Simons em (3+1) D

Em (3+1) D (S eq. 80) a teoria de Chern-Simons nos diz que a ação é dada por

$$S_{(3+1)D} = \frac{\alpha}{32\pi^2} \int d^3x dt \theta(x, t) \epsilon^{\mu\nu\rho\tau} F_{\mu\nu} F_{\rho\tau}(x, t), \quad (3.112)$$

ou ainda

$$S_{3D} = \frac{1}{4\pi} \int d^3x dt \epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} P_3(\theta(x, t)) \partial_\mu A_\nu \partial_\sigma A_\tau. \quad (3.113)$$

Tomando a variação do funcional $S_{3D}[A, \theta]$ vem,

$$\delta S_{3D} = j^\mu = \frac{1}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \partial_\mu P_3 \partial_\sigma A_\tau. \quad (3.114)$$

Em (3+1) D o isolante topológico pertence à família 2. Esse isolante é caracterizado pela segunda paridade (do número) de Chern, $N_3 = (-1)^{C_2[h_0, h]} \in Z_2$, com propriedades físicas: metade do efeito Hall quântico nos contornos e efeito termoelétrico. A simetria necessária é a de reversão temporal. Seu Lagrangiano é dado por,

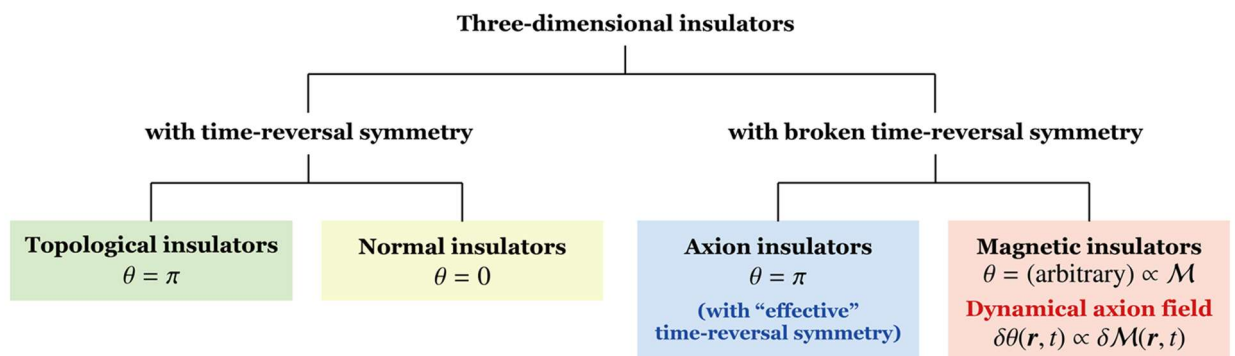
$$\mathcal{L} = \frac{1}{4\pi} P_3 \epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \partial_\mu A_\nu \partial_\sigma A_\tau. \quad (3.115)$$

O Lagrangiano geral no qual incluímos o termo eletromagnético é dado por,

$$\mathcal{L} = -b_{\mu\nu} \epsilon^{\mu\nu\lambda\rho} \partial_\nu (a_\rho - A_\rho^{ex}) + \frac{\theta}{8\pi^2} \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\mu a_\nu \partial_\lambda a_\rho - \frac{1}{4\pi^2 g^2} f_{\mu\nu} f^{\mu\nu}. \quad (3.116)$$

No caso dos isolantes 3-D o parâmetro θ que está encapsulado no termo de polarização P_3 estabelece uma distinção clara entre eles de forma que podemos chamá-lo de um parâmetro de ordem. No caso dos que possuem simetria de reversão temporal com $\theta = \pi$ são ITs e para $\theta = 0$ são isolantes comuns. No caso dos isolantes que possuem quebra de simetria de reversão temporal para $\theta = \pi$ temos os chamados **isolantes axion** e para θ arbitrário temos os **isolantes magnéticos**.

Figura 28: Ilustração da classificação dos isolantes 3D respectivamente a existência ou não da simetria de reversão temporal e do valor do parâmetro θ . Do lado esquerdo materiais com quebra de simetria de RT e do lado direito materiais que respeitam a SRT.



Fonte: Reproduzida de SEKINE; NOMURA (2021, p. 2). Licenciado sob Creative Commons 4.0 (CC BY 4.0).

Figura 29: Tabela com o sumário de algumas das principais propriedades dos isolantes topológicos. Resumo das propriedades dos isolantes topológicos. Nas Lagrangianas efetivas, os índices $\alpha, \beta, \dots = 0, 1, i, j, \dots = 0, 1, 2, \mu, \nu, \dots = 0, 1, 2, 3$ e $a, b, \dots = 0, 1, \dots, 4$. O vetor $a_i(a_\mu, \text{etc.})$ representa o potencial de gauge associado ao campo eletromagnético externo, enquanto A_i representa o potencial de gauge associado à conexão (fase) de Berry. As letras C e T denotam, respectivamente, as simetrias de partícula-buraco e de reversão temporal.

	Dimensão	Número Quântico Topológico	Teoria Efetiva	Exigência de Simetria
Família 1	2+1	1º Número de Chern $C_1 \in \mathbb{Z}$	$\mathcal{L} = \frac{C_1}{2\pi} A_\mu \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu A_\rho$	Não exigida
	1+1	1ª Paridade de Chern $N_1 = (-1)C_1[h_0, h] \in \mathbb{Z}_2$	$L = P_1 \epsilon^{\mu\nu} \partial_\mu A_\nu$	C
	0+1	1ª Paridade de Chern $N_0 = N_1[h_0, h] \in \mathbb{Z}_2$	$L = \text{Tr}[a_0]$	C
Família 2	4+1	2º Número de Chern $C_2 \in \mathbb{Z}$	$L = \frac{C_2}{24\pi^2} A_\mu \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma\tau} \partial_\nu A_\rho \partial_\sigma A_\tau$	Não exigida
	3+1	2ª Paridade de Chern $N_3 = (-1)C_2[h_0, h] \in \mathbb{Z}_2$	$L = \frac{1}{4\pi} P_3 \epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \partial_\mu A_\nu \partial_\sigma A_\tau$	T
	2+1	2ª Paridade de Chern $N_2 = N_3[h_0, h] \in \mathbb{Z}_2$	$L = \frac{1}{2\pi} A_\mu \epsilon^{\mu\nu\rho} \partial_\nu \Omega_\rho$	T

Fonte: Elaborado pelo autor, com base em QI, HUGHES e ZHANG (2008, p. 34).

Onde as propriedades físicas para os respectivos ITs é:

1. Família 1
 - a. Isolante 2+1 D: Efeito Hall quântico e anomalia axial no contorno;
 - b. Isolante 1+1 D: Metade da carga no contorno;
2. Família 2

- a. Isolante 4+1 D: Efeito Hall quântico 4D e anomalia quiral nos contornos;
- b. Isolante 3+1 D: Efeito Hall quântico e efeito TME;
- c. Isolante 2+1 D: Efeito Hall quântico de spin e meia carga de anti-fase na parede de domínio do contorno.

3.1.3 Isolantes Topológicos

Isolantes por definição são materiais que não conduzem corrente elétrica, no caso de isolantes topológicos estes são sólidos 2-D ou 3-D que possuem o bulk (interior) isolante, que no caso tem estados totalmente abertos ou “fully gapped states” (HASAN; KANE, 2010; NASTASE, 2017), entretanto a superfície (bordas) é condutora (TKACHOV, 2022). Outra maneira atraente de os definir parte de que são isolantes eletrônicos, mas que a estrutura de bandas é caracterizada por um invariante topológico que em geral é quantizado em múltiplos inteiros (FRADKIN, 2013).

Esse aspecto único presente nesses materiais pode ser compreendido através das propriedades da transformação relacionadas a reversão temporal e mais características que elucidaremos aqui. Eles não possuem em suas características principais nenhum análogo clássico de maneira que devemos analisar aspectos quânticos a fim de compreendermos como funcionam efetivamente.

O início da investigação de fases topológicas da matéria se dá efetivamente no ano de 2005 (apesar de o início da pesquisa teórica acontecer a partir do modelo de Haldane para o grafeno de 1988 (HALDANE, 1988). Trabalhos anteriores extremamente importantes de Thouless, Haldane e Kosterlitz na predição do efeito Hall quântico anômalo e a seguir com a publicação dos artigos de Kane e Mele (2005) e Fu e Kane (2006), os quais identificaram materiais isolante Hall 2D de spin com as bandas não-triviais.

O conceito de isolante topológico foi atribuído a essas duas classes de materiais - efeito hall quântico anômalo e materiais isolantes de spin Hall e após estendido aos materiais 3D isolantes não-magnéticos, chamados de isolantes topológicos fortes ou fracos (preditos na liga de $Bi_{1-x}Sb_x$ por Fu e Kane em 2007) (VANDERBILT, 2018).

3.1.3.1 Isolantes 2-D

A fim de falar dos isolantes topológicos 2D precisamos tratar brevemente sobre a equação de Dirac. No limite não relativístico ela se torna a opção viável na descrição de muitos ITs pelos mesmos possuírem a interação spin-órbita e essa ser uma consequência da eq. de Dirac não relativista (WINKLER, 2003).

Outro aspecto importante é que os Hamiltonianos que descrevem os ITs 2D e 3D possuem a mesma estrutura matemática que a equação de Dirac. A equação de

Dirac que é usada em altas energias descreve elétrons e pósitrons enquanto no contexto aqui apresentado ela é usada na descrição dos elétrons das bandas de condução e valência, sendo o espectro positivo para elétrons e o negativo para buracos, nos materiais semicondutores. De maneira geral como estabelece Shen (2012) **cada isolante topológico é governado por uma equação de Dirac.**

3.1.3.1.1 Férmions de Dirac e a conexão com baixas energias

Em 1928 Dirac apresentou sua equação relativista da mecânica quântica dada por

$$H = c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta, \quad (3.117)$$

onde

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.118)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I}_{2 \times 2} \end{pmatrix}, \quad (3.119)$$

e satisfazem,

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1, \quad (3.120)$$

$$\alpha_i \alpha_j = -\alpha_j \alpha_i, \quad (3.121)$$

$$\alpha_i \beta = -\beta \alpha_i. \quad (3.122)$$

Essa equação respeita a SRT de forma que temos tanto soluções positivas quanto negativas. A relação energia-momento e as soluções em três dimensões são escritas como,

$$E^2 = m^2c^2 + p^2c^4 \quad (3.123)$$

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{m^2c^2 + p^2c^4}, \quad (3.124)$$

tal que temos duas soluções com energia positiva E_+ que são para o elétron com spin-up e spin-down, e as soluções com energia negativa E_- para o pósitron com spin-up e spin-down. A principal diferença reside no fato de que a equação que define os isolantes topológicos terem um termo quadrático de correção de forma a fazer ela ser distinguível topologicamente, na equação de Dirac dada em (3.117) permanece

invariante sob as transformações $m \rightarrow -m$ e $\beta \rightarrow -\beta$, de forma a não se ter distinção entre partículas com massas positivas e negativas.

A equação de Dirac para ser usada na descrição de fases topológicas necessita ter atribuída a ela uma espécie de vácuo adicional como referência, algo que é desnecessário quando se leva em conta que a existência de estados ligados devem ser uma consequência física da estrutura de bandas em ITs. Dessa maneira na descrição de isolantes topológicos são usadas equações de Dirac com termos de correção e que levam em consideração aproximações de segunda ordem e ordens mais altas.

Nos modelos 2D que trabalharemos mais à frente lidaremos com Hamiltonianas de Dirac sem correção e de primeira ordem porque estas já serão suficientes para evidenciarem boa parte das propriedades e efeitos dos isolantes topológicos. É importante lembrar que em matéria condensada substituímos a velocidade c pela velocidade efetiva do elétron que aqui será usada a velocidade de Fermi v_F .

3.1.3.1.2 Modelo de Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ)

O modelo de Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) (BERNEVIG; HUGHES; ZHANG, 2006; ANDO, 2013) se configura como o modelo teórico que levou a descoberta do primeiro IT 2D, motivado pelos poços quânticos do semicondutor CdTe/HgTe/CdTe onde os orbitais s e p das bandas invertem no ponto $\mathbf{k} = 0$ como função da espessura da parede, i.e., existe uma espessura (ou largura) crítica a qual ocorre a transição de fase topológica.

Nesse modelo próximo ao nível da energia de Fermi temos o aparecimento de dois orbitais: dois orbitais s e dois orbitais $p_{m=3/2}$. Assim, temos quatro bandas: $|s, \uparrow\rangle$, $|s, \downarrow\rangle$, $|p_x + ip_y, \uparrow\rangle$ e $|p_x - ip_y, \downarrow\rangle$. Devido ao bulk do HgTe cristalizar na estrutura cúbica de blenda de zinco de forma que na descrição do modelo podemos nos ater a uma rede quadrada 2D com dois vetores ortogonais $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$, tal que o Hamiltoniano na base de quasimomentum é dado por,

$$H(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k})I + \sum_{a=1}^5 d_a(\mathbf{k})\Gamma^a, \quad (3.125)$$

onde temos os seguintes coeficientes

$$d_0(\mathbf{k}) = \frac{(\epsilon_s + \epsilon_p)}{2} - (t_{ss} - t_{sp})(\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2), \quad (3.126)$$

$$d_1(\mathbf{k}) = d_2(\mathbf{k}) = 0, \quad (3.127)$$

$$d_3(\mathbf{k}) = 2t_{sp} \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2, \quad (3.128)$$

$$d_4(\mathbf{k}) = 2t_{sp} \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1, \quad (3.129)$$

$$d_5(\mathbf{k}) = \frac{(\epsilon_s - \epsilon_p)}{2} - (t_{ss} + t_{sp})(\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2). \quad (3.130)$$

onde t_{ss} e t_{sp} são termos de hopping. Já Γ são matrizes de Dirac dadas por

$$\Gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & s_i \\ s_i & 0 \end{pmatrix}, \quad i = x, y, z, \quad (3.131)$$

$$\Gamma^4 = \begin{pmatrix} 0 & -i\mathbb{I} \\ i\mathbb{I} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.132)$$

$$\Gamma^5 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} = \Pi. \quad (3.133)$$

No caso $\Pi = \Gamma^5$ devido a ao orbital s ser par e o orbital p ser ímpar. E possuem a seguinte propriedade de simetria,

$$\Theta \Gamma^a \Theta^{-1} = \begin{cases} -\Gamma^a, & \text{quando } a = 1, 2, 3, 4 \\ \Gamma^a, & \text{quando } a = 5 \end{cases}, \quad (3.134)$$

$$\Pi \Gamma^a \Pi^{-1} = \begin{cases} -\Gamma^a, & \text{quando } a = 1, 2, 3, 4 \\ \Gamma^a, & \text{quando } a = 5 \end{cases}. \quad (3.135)$$

O espectro energético é dado a partir de

$$E(\mathbf{k}) = d_0(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\sum_a d_a^2(\mathbf{k})}. \quad (3.136)$$

Devido ao termo Γ^5 ser par sob a SRT e sob a inversão, considerando um ponto TRIM Λ_i , o sistema pode ser escrito da seguinte maneira

$$H(\mathbf{k} = \Lambda_i) = d_0(\Lambda_i)I + d_5(\Lambda_i)\Gamma^5, \quad (3.137)$$

lembrando se ainda que o teorema de Kramer estabelece que no ponto Λ_i os estados $|s, \uparrow\rangle$ e $|s, \downarrow\rangle$, e $|p_x + ip_y, \uparrow\rangle$ e $|p_x - ip_y, \downarrow\rangle$ são degenerados. Lembrando também da paridade desses estados e denotando-os como (+) e (−), para os orbitais s e p,

respectivamente. Os autovalores do Hamiltoniano $H(\mathbf{k} = \Lambda_i)$ para esses estados é dado então por

$$\begin{aligned} \langle + | H(\mathbf{k} = \Lambda_i) | + \rangle &= \langle + | d_0(\Lambda_i) I | + \rangle + \langle + | d_5(\Lambda_i) \Gamma^5 | + \rangle = \\ &= d_0(\Lambda_i) \overbrace{\langle + | I | + \rangle}^{+1} + d_5(\Lambda_i) \overbrace{\langle + | \Gamma^5 | + \rangle}^{+1} \equiv E_+ \end{aligned} \quad (3.138)$$

$$\begin{aligned} \langle - | H(\mathbf{k} = \Lambda_i) | - \rangle &= \langle - | d_0(\Lambda_i) I | - \rangle + \langle - | d_5(\Lambda_i) \Gamma^5 | - \rangle \\ &= d_0(\Lambda_i) \overbrace{\langle - | I | - \rangle}^{+1} + d_5(\Lambda_i) \overbrace{\langle - | \Gamma^5 | - \rangle}^{-1} \equiv E_- \end{aligned} \quad (3.139)$$

Temos então dois casos possíveis,

$$d_5(\Lambda_i) = \begin{cases} > 0 \Rightarrow E_+ > E_-, \text{estado ocupado } | - \rangle, \delta(\Lambda_i) = -1 \\ < 0 \Rightarrow E_+ < E_-, \text{estado ocupado } | + \rangle, \delta(\Lambda_i) = +1 \end{cases}, \quad (3.140)$$

e, portanto,

$$\delta(\Lambda_i) = -\text{sgn}[d_5(\Lambda_i)], \quad (3.141)$$

se os vetores de base tiverem módulo de π , os TRIM serão dados por: (0,0), (0,1), (1,0) e (1,1). Por fim, ao levarmos a equação de $d_5(\mathbf{k})$ nessa última obtida a consideração topológica do modelo de 4-bandas é dada a partir de

$$\epsilon_s - \epsilon_p = \begin{cases} > 4(t_{ss} + t_{sp}) \\ < 4(t_{ss} + t_{sp}) \end{cases}. \quad (3.142)$$

No primeiro caso $\delta < 0$ para todos os Λ_i tal que $\nu = 0$ e temos um isolante trivial. Como $E_+ > E_-$ o orbital s fica acima do orbital p o que é o comportamento eletrônico de um isolante comum. No segundo, por outro lado, $\delta > 0$ para $\mathbf{k} = 0$ e $\delta < 0$ para os demais Λ_i , que nos leva a $\nu = 1$, e assim temos um isolante topológico. **Aqui a inversão de bandas ocorre somente em um número ímpar de TRIMs na ZB.** No efeito Hall quântico de spin isso se constitui num **número ímpar de pares de Kramer cruzando o nível de energia de Fermi.**

3.1.3.1.3 Isolante de Chern ou isolante Hall quântico anômalo (IHQA)

O modelo mais simples de isolante topológico que trataremos nesse trabalho é o chamado isolante de Chern, o sistema mais elementar desse tipo de isolante é um

sistema 2-D de Dirac, nesse ponto seguiremos a abordagem feita por Tkachov (2022). O Hamiltoniano mais simples para o sistema descrito é,

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 d_i(\mathbf{k}) \cdot \sigma_i, \quad (3.143)$$

com $d_1(\mathbf{k}) = \hbar v_F k_x$, $d_2(\mathbf{k}) = \hbar v_F k_y$, $d_3(\mathbf{k}) = m$. Onde σ_i são os vetores-matrizes de Pauli, v_F e m são a velocidade, mais especificamente é a velocidade de Fermi, e a massa da partícula, respectivamente. Seguindo vem,

$$\begin{aligned} H(\mathbf{k}) &= (\hbar v_F k_x, \hbar v_F k_y, m) \cdot (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \\ H(\mathbf{k}) &= \hbar v_F (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + m \sigma_z. \end{aligned} \quad (3.144)$$

Os autoestados e autovalores do Hamiltoniano vem da equação

$$E\psi(\mathbf{k}) = d_i(\mathbf{k}) \cdot \sigma_i \psi(\mathbf{k}) = \sqrt{(\hbar v_F)^2 \mathbf{k}^2 + m^2} (\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \psi(\mathbf{k}), \quad (3.145)$$

com $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = d(\mathbf{k})/|d(\mathbf{k})|$. O termo $\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ é chamado de matriz de spin ou simplesmente helicidade. A partir do uso de coordenadas esféricas (ρ, ϕ, θ) com $(k_x = k \cos(\phi), k_y = k \sin(\phi), u_k = (u_{\parallel} \cos(\phi), u_{\parallel} \sin(\phi), u_z))$ pode-se encontrar o espectro energético dado por:

$$E\psi(\mathbf{k}) = \sqrt{(\hbar v_F)^2 \mathbf{k}^2 + m^2} s \psi(\mathbf{k}) \rightarrow E(\mathbf{k}s) = s \sqrt{(\hbar v_F)^2 \mathbf{k}^2 + m^2}, \quad (3.146)$$

onde s são os autovalores reais dos autoestados da helicidade e que na equação anterior são dados por:

- $s = +1$: bandas de condução;
- $s = -1$: bandas de valência.

O termo de massa presente na equação anterior faz com que um **gap de energia** de $\Delta E = 2m$ **se abra no ponto de Dirac $k = 0$ entre as duas bandas (condução e valência)**

$$E(\mathbf{k} = 0) = \pm \sqrt{m^2} \Rightarrow E(\mathbf{k} = 0) = \pm |m|. \quad (3.147)$$

Para ver o estado de borda de maneira mais ilustrativa podemos usar a seguinte equação de Dirac,

$$E\psi(x, y) = [-i\hbar v_F (\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + m \sigma_z] \psi(\mathbf{k}), \quad (3.148)$$

num semi-espço 2D com as seguintes condições de contorno

$$\left. \begin{aligned} -\infty < y \leq 0 \\ -\infty < x < \infty \end{aligned} \right\}, \quad (3.149)$$

Assim, supondo uma solução da seguinte forma,

$$\psi(x, y) = \Phi e^{ik_x x + y/\lambda}, \quad (3.150)$$

i.e., uma onda plana (função de Bloch), com λ sendo um fator de comprimento que está relacionado diretamente ao decaimento exponencial da propagação de estados no bulk dado por uma onda se propagando ao longo da borda com vetor de onda k_x . O termo Φ é um espinor que não depende da posição. Colocando (3.150) em (3.148),

$$E\Phi = \hbar v_F k_x \sigma_x \Phi + \left(-i \frac{\hbar v}{\lambda} \sigma_y + m \sigma_z \right) \Phi, \quad (3.151)$$

onde já eliminamos o termo $e^{ik_x x + y/\lambda}$. A equação anterior pode ser separada em duas equações acopladas (levando em conta que os **estados de borda estão na direção $\mathbf{x}$**),

$$E\Phi = \hbar v_F k_x \sigma_x \Phi, \quad (3.152)$$

$$\left(-i \frac{\hbar v}{\lambda} \sigma_y + m \sigma_z \right) \Phi = \sigma_z \left(-\frac{\hbar v}{\lambda} \sigma_x + m \right) \Phi = 0, \quad (3.153)$$

na última equação usamos o fato de que $i\sigma_y = \sigma_z \sigma_x$. A partir de (3.153) podemos encontrar o espinor Φ e o fator de comprimento λ . Considerando que Φ seja um autoestado de σ_x que satisfaça

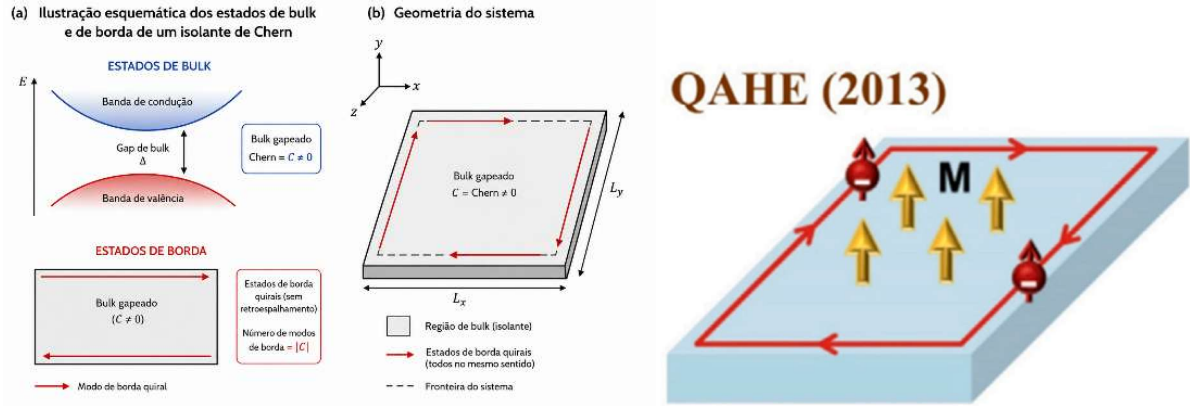
$$\sigma_x \Phi = \text{sgn}(m) \Phi, \quad (3.154)$$

i.e., o espinor estará associado a massa dos estados de borda. Assim obtemos para a equação (3.153) e para o comprimento de decaimento os seguintes resultados

$$\sigma_z \left(-\frac{\hbar v}{\lambda} \widehat{\sigma_x^{\text{sgn}(m)\Phi}} + m \Phi \right) = 0 \Rightarrow -\frac{\hbar v}{\lambda} \text{sgn}(m) + m = 0, \quad (3.155)$$

$$\lambda = \frac{\hbar v_F}{|m|} > 0, \quad (3.156)$$

Figura 30: (a) Ilustração esquemática dos estados de bulk e de borda de um isolante de Chern. (b) Geometria do sistema. Por preferência consideramos $m > 0$, tal que a quiralidade da borda vale $\text{sgn}(m) = +1$.



Fonte: Figura da esquerda elaborada pelo autor e figura da direita reproduzida de BANDYOPADHYAY; JOSEPH; NARAYAN (2024, p. 3). Licenciado sob Creative Commons 4.0 (CC BY-NC 4.0).

O requerimento para a existência dos estados de borda é que λ seja positivo que advém do fator de sinal $\text{sgn}(m)$. Colocando (3.155) em (3.152),

$$E(\mathbf{k}) = \text{sgn}(m)v_F\hbar k_x, \quad (3.157)$$

A primeira propriedade da solução acima é de que ela é **contínua** e pertence ao intervalo $-|m| < E < |m|$, i.e., **não possui gap** diferente dos estados de borda. Além disso, a direção da velocidade é determinada pelo sinal do termo de massa, $\text{sgn}(m)$, e se configura pela chamada **quiralidade da borda** que aparece devido à quebra da SRT. Por fim, a ocorrência de estados de borda sem gap pode ser explicada pela inversão da estrutura de bandas nas bordas. Considerando um estado $\psi(x, y)$ em $y < 0$ da transformação de paridade encontramos

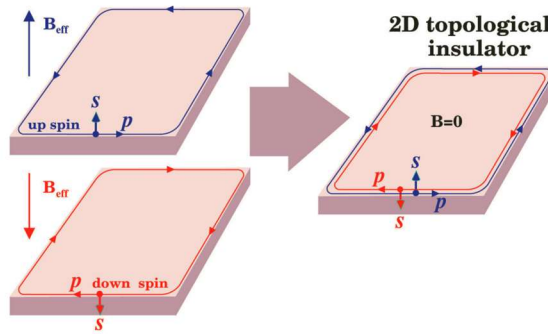
$$\psi'(x, y) \stackrel{\mathbb{P}}{\rightleftharpoons} \sigma_x \psi(x, -y), \quad (3.158)$$

porém, essa cópia espelhada do estado $\psi(x, y)$ que foi estendida a $y > 0$ faz com que a eq. (3.157) tenha uma mudança no sinal de massa. Assim, a imagem espelhada possui os ordenamentos do espectro de bandas de condução e valência em posições opostas. Nas bordas temos uma inversão de bandas que é acompanhada pelo fechamento do gap e como consequência o aparecimento de um estado de borda.

3.1.3.1.4 Isolante topológico ($\mathbb{Z}_2$ ou isolante Hall quântico de spin (ISHQ))

Os isolantes Hall quântico de spin de forma parecida aos isolantes de Chern possuem um gap de banda no bulk, porém diferente do isolante de Chern, o gap se abre sem a quebra da SRT. Esse isolante pode ser visto como dois modelos parecidos aos de Chern no qual o “locking” de spin-momentum vai em direções opostas para spins opostos (figura abaixo) porém, cada sistema é descrito por um Hamiltoniano de Dirac sem gap que possui a SRT (TKACHOV, 2022). Tomando então dois sistemas 2D na parte de cima e de baixo de uma placa 3D com um interior isolante, no limite quasi-2D o sistema pode ser descrito como,

Figura 31: Imagem esquemática ilustrando do lado esquerdo o conjunto de isolantes de Chern e do lado direito o efeito Hall quântico de spin.



Fonte: Reproduzida de TKACHOV (2022, p. 8).

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} = (x, y, 0), \quad (3.159)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -i\hbar v_F(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) & \Delta\sigma_0 \\ \Delta\sigma_0 & i\hbar v_F(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) \end{pmatrix}, \quad (3.160)$$

As entradas diagonais do Hamiltoniano são as entradas no espaço real dos subsistemas desacoplados c e b, sendo a escolha de sinais dada a partir da simetria de inversão na placa e o acoplamento entre os subsistemas dado por $\Delta\sigma_0$, com σ_0 sendo uma matrix unitária no espaço de spin. A função de onda quadri-componente pode ser escrita

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{c\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{c\downarrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{b\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{b\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (3.161)$$

na qual a base de estados usada é a dos estados de cima (c) e dos estados de baixo (b) cada um com duas componentes de spin. Quando consideramos Δ um parâmetro real o sistema obedece a SRT,

$$\mathbb{T}\hat{H}\mathbb{T}^{-1} = \hat{H}, \quad (3.162)$$

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} i\sigma_y K & 0 \\ 0 & i\sigma_y K \end{pmatrix}, \quad (3.163)$$

As soluções de interesse são aquelas as quais decaem exponencialmente das bordas, $y = 0$, para o interior do sistema: $-\infty < x < \infty$; $0 \leq y < \infty$. Podemos escrever então a densidade de corrente na direção y ,

$$j_y(\mathbf{r}) = v_F \tilde{\psi}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix} \psi(\mathbf{r}), \quad (3.164)$$

$$= i v_F \{ [\psi_{c\downarrow}^*(\mathbf{r}) \psi_{c\uparrow}(\mathbf{r}) - \psi_{c\uparrow}^*(\mathbf{r}) \psi_{c\downarrow}(\mathbf{r})] + \\ + [\psi_{b\uparrow}^*(\mathbf{r}) \psi_{b\downarrow}(\mathbf{r}) - \psi_{b\downarrow}^*(\mathbf{r}) \psi_{b\uparrow}(\mathbf{r})] \}, \quad (3.165)$$

com o requisito $j_y(x, y = 0) = 0$, tal que encontramos as seguintes relações de contorno na forma espinorial,

$$\psi(x, y = 0) = \overbrace{\begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_y \\ i\sigma_y & 0 \end{pmatrix}}^{\hat{M}} \psi(x, y = 0), \quad (3.166)$$

de forma que,

$$\mathbb{T}\hat{M}\mathbb{T}^{-1} = \hat{M}. \quad (3.167)$$

A função de onda transformada $\mathbb{T}\psi(\mathbf{r})$ satisfaz as mesmas condições de contorno que $\psi(\mathbf{r})$, i.e., o sistema preserva a SRT. A partir da análise da estrutura de bandas do bulk é possível mostrar que o acoplamento Δ entra de maneira similar ao termo de massa em um modelo de Dirac 4x4. Além disso, considerando o Hamiltoniano após uma transformação unitária,

$$\hat{H}'(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} -i\hbar v_F(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + \Delta \sigma_z & 0 \\ 0 & i\hbar v_F(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) - \Delta \sigma_z \end{pmatrix}, \quad (3.168)$$

com o espinor dado por

$$\psi'(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi_{c\uparrow}(\mathbf{r}) + \psi_{b\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{c\downarrow}(\mathbf{r}) - \psi_{b\downarrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{c\uparrow}(\mathbf{r}) - \psi_{b\uparrow}(\mathbf{r}) \\ -\psi_{c\downarrow}(\mathbf{r}) - \psi_{b\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \psi_{s\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{a\downarrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{a\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{s\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (3.169)$$

onde s e a são respectivamente soluções simétricas e antissimétricas dos estados de cima c e de baixo b . Assim, no espaço $\mathbf{k}$

$$\hat{H}'(\mathbf{k})\psi'(\mathbf{k}) = E\psi'(\mathbf{k}), \quad (3.170)$$

$$\hat{H}'(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} v_F \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} + \Delta \sigma_z & 0 \\ 0 & -v_F \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} - \Delta \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (3.171)$$

Tal que as soluções para $\mathbf{k} = 0$ são dadas por

$$\begin{pmatrix} \psi_{s\uparrow}(\mathbf{k}=0) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ para } E_{s\uparrow} = \Delta, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{a\downarrow}(\mathbf{k}=0) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ para } E_{a\downarrow} = -\Delta, \quad (3.172)$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k}=0) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ para } E_{a\uparrow} = -\Delta, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \psi_{s\downarrow}(\mathbf{k}=0) \end{pmatrix} \text{ para } E_{s\downarrow} = \Delta, \quad (3.173)$$

Essas energias são dos estados de fundo da banda de condução e do topo da banda de valência no ponto $\mathbf{k} = 0$. Além disso, temos um gap de energia de $2|\Delta|$ entre as bandas. Sob a inversão de sinal $\Delta \rightarrow -\Delta$ a estrutura de bandas muda de uma normal para uma invertida. Quando $\mathbf{k} \neq 0$ o resultado que obtemos é (TKACHOV, 2022)

$$\begin{pmatrix} \psi_{s\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \psi_{a\downarrow}(\mathbf{k}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_{1,2} \text{ para } E^{1,2}(\mathbf{k}) = \pm \text{sgn}(\Delta) \sqrt{(v_F \hbar \mathbf{k})^2 + \Delta^2}, \quad (3.174)$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \psi_{a\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \psi_{s\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}_{3,4} \text{ para } E^{3,4}(\mathbf{k}) = \mp \text{sgn}(\Delta) \sqrt{(v_F \hbar \mathbf{k})^2 + \Delta^2}, \quad (3.175)$$

onde os termos 1,2 e 3,4 correspondem aos sinais $\pm$ e $\mp$. Para $\mathbf{k} \neq 0$ temos uma mistura dos estados simétrico e antissimétrico. A partir da análise dos estados de superfície é possível mostrar que as soluções, $\psi(x, y) = \Phi e^{ik_x x - y/\lambda}$, quando normalizadas serão dadas por (TKACHOV, 2022)

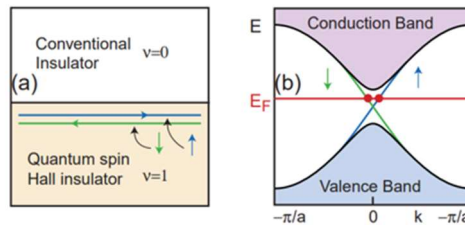
$$\psi_+(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{|\Delta|}{2\hbar v_F}} e^{ik_x x - |\Delta|y/\hbar v_F}, \quad (3.176)$$

$$\psi_-(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{|\Delta|}{2\hbar v_F}} e^{ik_x x - |\Delta|y/\hbar v_F}, \quad (3.177)$$

de forma que são estados de borda sem gap que está relacionado a estrutura de bandas invertida nas bordas. Além disso, os graus de liberdade do bulk são reduzidos na borda a somente o spin. Nessa classe de materiais temos um par de estados de borda contra-propagantes com projeções de spin opostas, que chamamos de estados helicais e são relacionados a partir da SRT

$$\psi_-(\mathbf{k}) = \mathbb{T}\psi_+(\mathbf{k}). \quad (3.178)$$

Figura 32: Estados de borda em um isolante Hall quântico de spin. (a) interface entre o isolante topológico e um isolante ordinário. (b) dispersão dos estados de borda no modelo do grafeno onde os estados de spin up e down se propagam em direções opostas.



Fonte: Reproduzido de HASAN; KANE (2010, p. 3053). Copyright © 2010 by the American Physical Society.

3.1.3.1.5 Transição de fase entre o isolante de Chern e o IHQS

Tomando o seguinte Hamiltoniano para o modelo quasi-2D de um isolante magnético

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} v_F \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} + m\sigma_z & \Delta\sigma_0 \\ \Delta\sigma_0 & -v_F \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} + m\sigma_z \end{pmatrix}, \quad (3.179)$$

onde $\Delta\sigma_0$ é o acoplamento entre a superfície de baixo e a de cima, m é a magnetização, que após uma transformação unitária na forma diagonal fica

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{d}^+(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \mathbf{d}^-(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix},$$

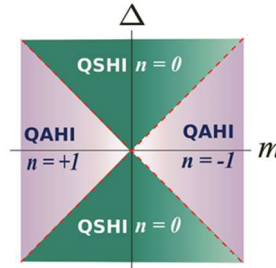
$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} v_F \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} + (m + \Delta) \sigma_z & 0 \\ 0 & -v_F \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} + (m - \Delta) \sigma_z \end{pmatrix}, \quad (3.180)$$

diferente da magnetização m o termo de energia Δ tem sinais opostos nas diagonais de forma a termos um mecanismo de invariância de RT para gerar o gap de banda. As diagonais da equação correspondem a dois isolantes de Chern com diferentes termos de massa $m \pm \Delta$ devido a presença de competição dos termos de gap. O valor para o número de Chern será (TKACHOV, 2022)

$$n = \frac{1}{2} [\text{sgn}(\Delta - m) - \text{sgn}(\Delta + m)], \quad (3.181)$$

$$n = \begin{cases} \pm 1, & |m| > \Delta \text{ (IAHQ)} \\ 0, & |m| < \Delta \text{ (ISHQ)} \end{cases} \quad (3.182)$$

Figura 33: Imagem esquemática do diagrama de fase para um isolante topológico 2D. Nesse temos duas fases topológicas distintas: isolante Hall anômalo quântico e o isolante Hall quântico de spin.



Fonte: Reproduzido de TKACHOV (2022, p. 80).

Além disso, a partir do estudo das bordas também podemos encontrar os seguintes resultados usando (3.156) e (3.157), com $m' = m \pm \Delta$,

$$\lambda_{\pm} = \frac{v_F \hbar}{|m \pm \Delta|}, \quad (3.183)$$

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = v_F \hbar k \text{sgn}(m \pm \Delta), \quad (3.184)$$

onde $k = |\mathbf{k}|$, para m e Δ positivos, por exemplo, temos o caso de $m > \Delta$, com solução,

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = v_F \hbar k, \quad (3.185)$$

que corresponde ao IHQA no qual temos um único modo de borda quiral formado a partir dos dois subsistemas isolantes de Chern com estados de borda quirais se propagando na mesma direção. Quando $m < \Delta$, encontramos a solução,

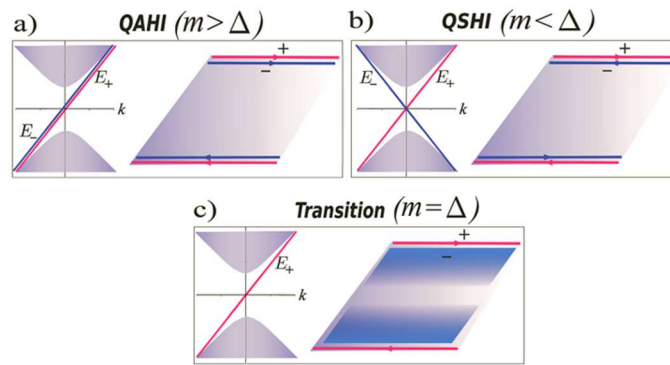
$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm v_F \hbar k, \quad (3.186)$$

que nada mais são que o par de estados helicais se propagando em direções opostas no IHQS. Por fim, quando $m = \Delta$, encontramos

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = v_F \hbar k, \quad (3.187)$$

que é o regime de transição de fase entre o IHQA e o IHQS. Tal que um dos estados de borda de um dos subsistemas de Chern é perdido se espalhando pelo bulk.

Figura 34: Imagem esquemática representando os estados de bordas em três casos distintos. (a) IHQA, (b) IHQS e (c) transição entre o IHQA e o IHQS.



Fonte: Reproduzido de TKACHOV (2022, p. 81).

3.1.3.2 Isolantes 3-D

3.1.3.2.1 Isolante 3D fraco

As versões de dimensão mais alta do efeito Hall quântico de spin são os chamados isolantes topológicos 3D. Um isolante 3D é caracterizado como vimos a partir de quatro invariantes Z_2 ($v_0; v_1 v_2 v_3$). De forma que em um cristal 3D temos T pontos invariantes $\Gamma_{1,2,3,4}$ na superfície da ZB onde os estados de superfície, quando presentes, obedecem ao teorema de Kramer. Fora da região desses pontos a ISO some com a degenerescência.

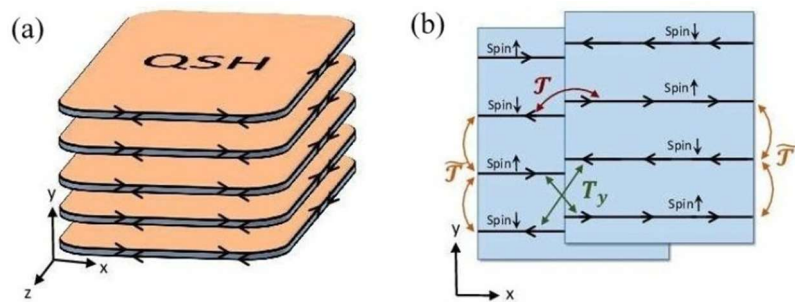
O conjunto de pontos degenerados de Kramer formam pontos de Dirac 2D na estrutura de bandas da superfície do material. Entre qualquer conjunto de pares Γ_a e

Γ_b a estrutura da superfície de estados será como na figura (36). Assim a quantidade de vezes que a superfície de Fermi intercepta a linha que conecta o par de pontos Γ_a e Γ_b , par ou ímpar, nos trará a informação da existência ou não de proteção topológica dos estados de borda. No caso de ser par os estados serão protegidos topologicamente. As alternativas descritas anteriormente são definidas pelos quatro invariantes Z_2 dos estados de bulk (correspondência bulk-boundary).

Esses se constituem de duas classes de materiais, a primeira são os chamados isolantes topológicos fracos e a segunda são os isolantes topológicos fortes. Os ITs fracos estão relacionados ao efeito Hall quântico de spin 2D de maneira que podemos enxergá-los como um conjunto de planos 2D contendo o EHQS colocados um em cima do outro que pode ser interpretado como uma construção similar para o EHQL 3D. Em sua superfície temos um contínuo de pares de Kramer enquanto o bulk permanece isolante.

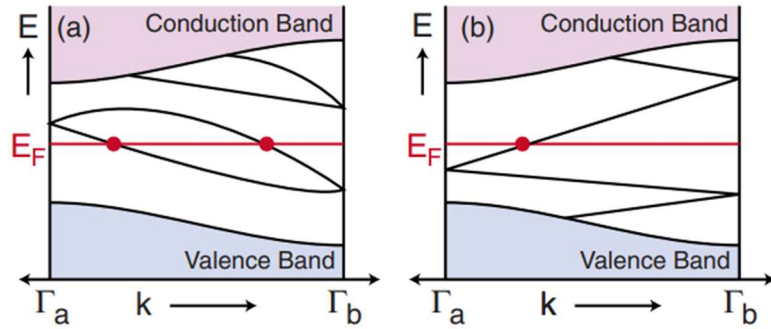
Os índices $(v_1 v_2 v_3)$ podem ser vistos como os índices de Miller que definem a orientação das camadas. Além disso, de maneira diferente do caso simples 2D dos estados helicais de borda, os estados de superfície não são protegidos pela simetria $\mathbb{T}$.

Figura 35: Representação esquemática do isolante 3D fraco como um empilhamento de isolantes Hall quânticos de spin 2D em (a) e a superfície do isolante topológico pode ser considerada como uma bicamada (b).



Fonte: Adaptado de BANDYOPADHYAY; JANA (2020, p. 40). Licenciado sob Creative Commons 4.0 (CC BY 4.0).

Figura 36: Dispersão eletrônica entre dois pontos de contorno degenerados de Kramer. Em (a) isolante trivial e em (b) isolante topológico.

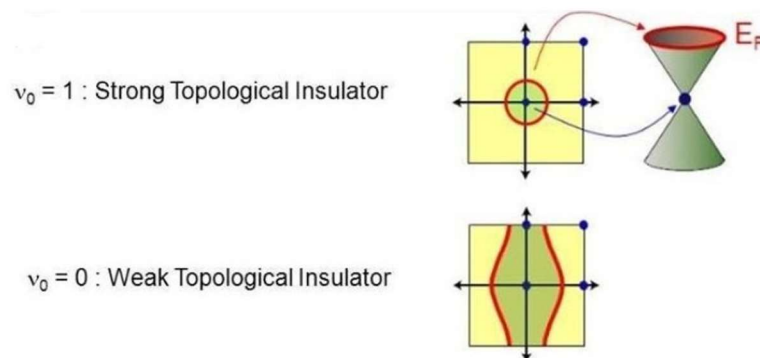


Fonte: Reproduzido de HASAN; KANE (2010, p. 3049). Copyright © 2010 by the American Physical Society.

3.1.3.2.2 Isolante 3D forte

Por outro lado, os chamados isolantes topológicos fortes não podem ser interpretados como descendentes das fases de isolantes de EHQS. Nessa classe de materiais o invariante ν_0 vale 1. Como esse invariante quantifica a paridade de vezes que os pontos Kramer são contidos pela superfície de Fermi circular que no caso dos isolantes forte é um número ímpar. O caso mais simples é $H_{superfície} = -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla$ que possui um cone de Dirac, e que no caso de ITs os pontos de Dirac parceiros residem em superfícies opostas como pontua Hasan e Kane (2010).

Figura 37: Círculos de Fermi na superfície da zona de Brillouin para um isolante topológico forte (acima) e isolante topológico fraco (abaixo). Para o caso mais simples de isolante topológico forte o círculo de Fermi engloba um único ponto de Dirac.



Fonte: Adaptado de BANDYOPADHYAY; JANA (2020, p. 40). Licenciado sob Creative Commons 4.0 (CC BY 4.0).

3.1.3.3 Exemplos de ITs reais

3.1.3.3.1 Poços de $CdTe/HgTe/CdTe$

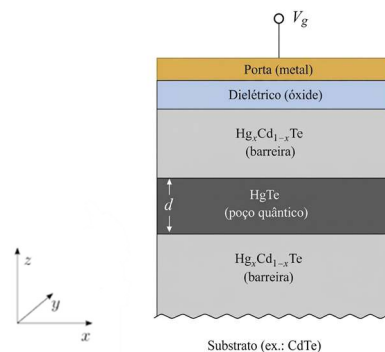
Vimos na seção 3.1.3.1.2 o modelo BHZ que é o modelo teórico que previu o efeito Hall quântico de spin nas portas quânticas de telureto de mercúrio, $HgTe$, sanduichadas com a liga de $Hg_xCd_{1-x}Te$. A descoberta experimental desse fenômeno se deu com o trabalho de König et. al. (2007) no qual os pesquisadores desenvolveram a amostra com baixa densidade e alta mobilidade dos portadores de carga. A aplicação de uma voltagem externa tornou possível os estados de condução passarem do tipo n ao tipo p em um regime isolante.

Nessas estruturas os estados com energia próximo ao nível de Fermi estão confinados na camada de telureto de mercúrio, $HgTe$, que está paralela ao plano x-y como na figura 38, além disso, a energia relacionada ao confinamento na direção z é quantizada. Os portadores de carga são livres para mover pela camada de $HgTe$ de maneira que se formam sub-bandas 2D (ASBÓTH et al., 2016).

Três situações de interesse surgem nas estruturas de portas quânticas no regime isolante relativas à espessura d delas:

- $d < 6.3$ nm – o regime isolante apresenta baixa condutância residual;
- $d = d_c = 6.3$ nm - situação de espessura crítica onde temos uma transição de fase quântica isolante-metal;
- $d > 6.3$ nm – a condutância residual aparece em platôs da ordem de $2e^2/h$ (independente da espessura da amostra que mostra ser devido aos estados de borda e é destruída por um pequeno campo magnético externo) para o regime nomeadamente isolante (topológico).

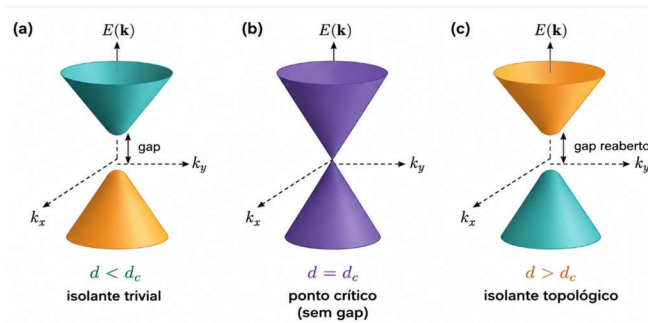
Figura 38: Ilustração esquemática dos poços quânticos de $HgTe$ de espessura d , sanduichados entre as camadas de $Hg_xCd_{1-x}Te$. Os elétrons estão confinados na camada de $HgTe$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

De forma que, na abordagem de bandas, a situação que ocorre respectivamente, a espessura da camada de HgTe, é que quando aumentamos ela até $d < d_c$, o sistema é um isolante trivial com um gap entre a banda de condução e de valência. Conforme passamos a $d = d_c$, a sub-banda de condução mais baixa e a de valência mais alta se tocam de forma que o gap se fecha e o sistema se torna metálico. Para $d > d_c$, o gap reabre com as bandas invertidas e o sistema se torna um IT.

Figura 39: Representação esquemática do cone de Dirac em diferentes configurações para diferentes valores de espessura de HgTe. Em (a) a espessura d vale $d < d_c$ e temos um isolante trivial, em (b) temos um regime de transição com o fechamento do gap quando $d = d_c$ e em (c) quando $d > d_c$ temos um isolante topológico com o gap reaberto e a presença da inversão de bandas.

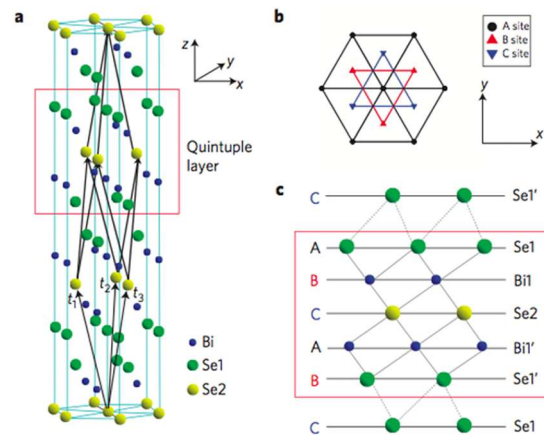


Fonte: Elaborado pelo autor, com base em ASBÓTH et al. (2016).

3.1.3.3.2 Seleneto de bismuto (Bi_2Se_3), telureto de bismuto (Bi_2Te_3) e telureto de antimônio (Sb_2Te_3)

O grupo de materiais Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 estão entre os isolantes topológicos mais estudados. A topologia de bandas desses materiais obedece $(1; 000)$ e como propriedade estrutural eles são compostos de empilhamentos de três camadas quádruplas não equivalentes conectadas por ligações de van der Waals.

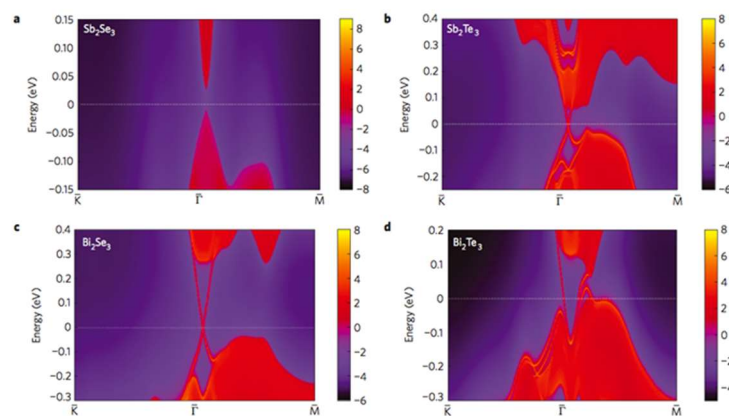
Figura 40: Representação esquemática da geometria do seleneto de bismuto, Bi_2Se_3 . (b) Vista superior da geometria do seleneto de bismuto. (c) Representação das camadas quintuplas do Bi_2Se_3 .



Fonte: Reproduzido de ZHANG et al. (2009, p. 438).

O seleneto de bismuto, Bi_2Se_3 , é um semiconductor com um gap estreito entre as bandas de 0,3 eV. Esse material possui uma estrutura extremamente simétrica entre as camadas quintuplas de Se(1) - Bi-Se(2) - Bi-Se(3). Ele é um isolante 3D com forte interação spin órbita e ligações de Van der Waals.

Figura 41: Ilustração da estrutura de bandas do bulk do (a) seleneto de antimônio, (b) telureto de antimônio, (c) seleneto de bismuto e (d) telureto de bismuto. Podemos ver claramente como o seleneto de antimônio não apresenta estados de borda sendo, portanto, uma estrutura trivial enquanto os materiais em (b), (c) e (d) apresentam estados de borda gapless e, portanto, são não triviais.



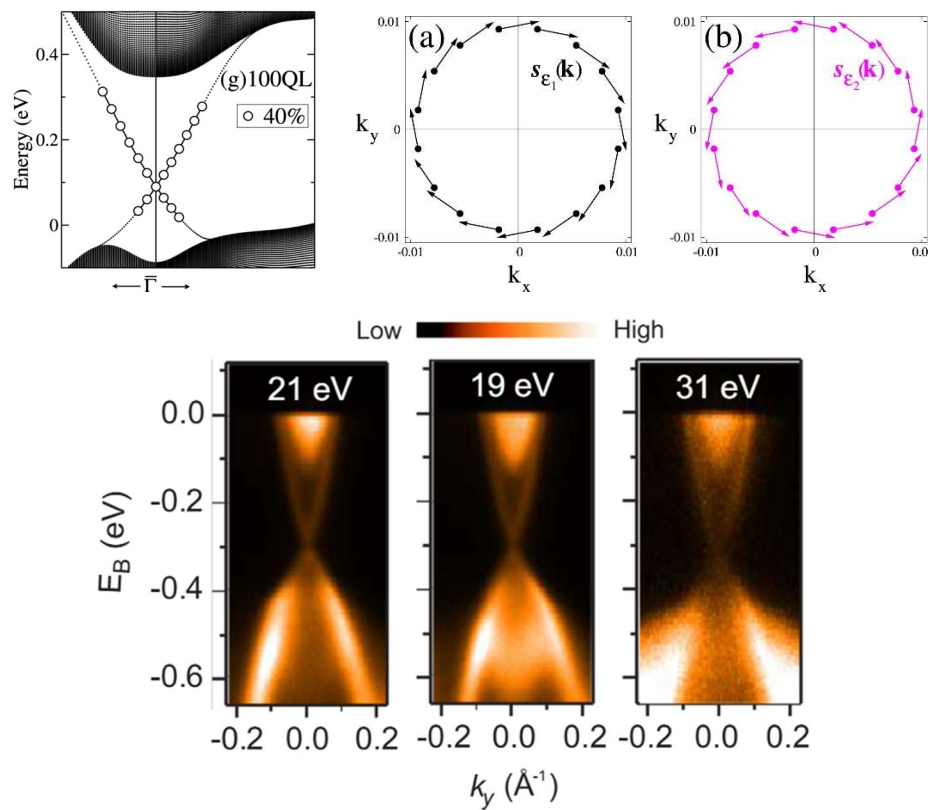
Fonte: Reproduzido de ZHANG et al. (2009, p. 441).

O telureto de antimônio, Sb_2Te_3 é outro IT bastante estudado na literatura e é um material semiconductor com um pequeno gap entre bandas de bulk de

aproximadamente 0.1-0.28 eV (THONHAUSER *et al.*, 2003; MADELUNG, 2004; BOUKAI; XU; HEATH, 2006; HSIEH *et al.*, 2009).

Figura 42: Ilustração das estruturas de bandas do bulk e da superfície para o Bi_2Se_3 com cem portas quânticas e locking de momentum-spin no plano de projeção de spin associado aos estados degenerados (a) ε_1 e (b) ε_2 para diversos valores de momentum $\mathbf{k}$ no contorno de equi-energia dos cones de Dirac. Os estados de superfície são não spin degenerados e são polarizados helicilmente. Medidas de ARPES para o Bi_2Se_3

em três cenários diferentes de exposição.

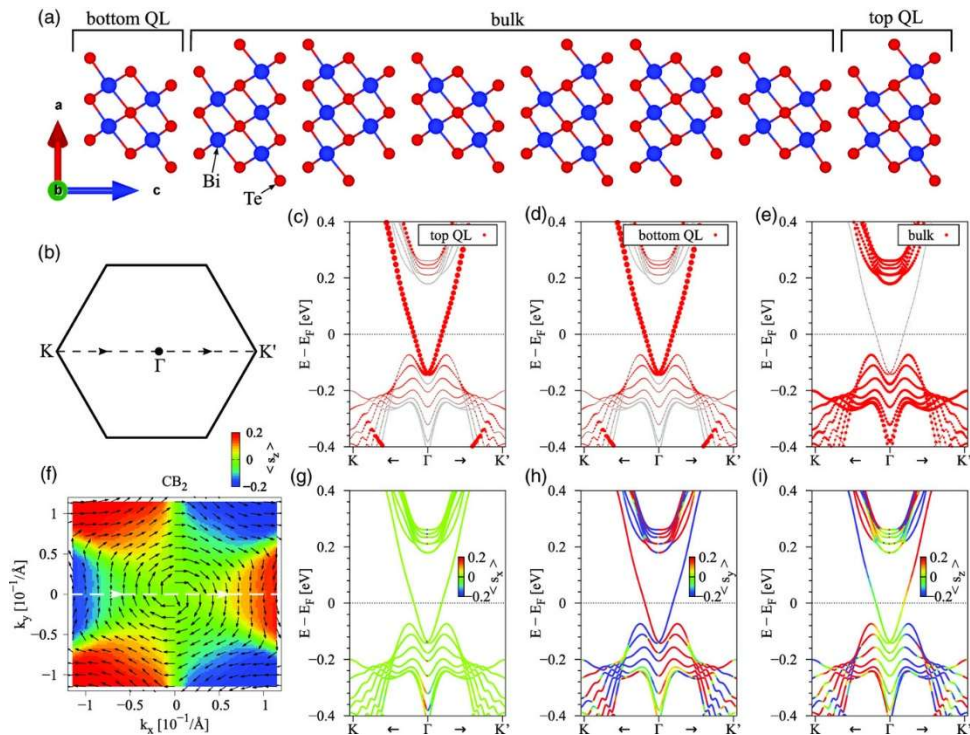


Fonte: Acima adaptada de PERTSOVA, A.; CANALI, C. M. (2014, p. 8 e 16). Licenciado sob Creative Commons 3.0 (CC BY 3.0). Abaixo reproduzida de Xia *et al.* (2009).

É importante citar o aspecto da inversão de bandas que é uma característica fundamental no comportamento dos isolantes topológicos e consiste na troca da ordem energética entre bandas de diferentes simetrias como na figura 44. Em um semiconductor convencional, como o CdTe, a banda de valência possui caráter predominantemente (p) e paridade ímpar, enquanto a banda de condução apresenta caráter predominantemente (s) e paridade par. Mas, em materiais como o HgTe, devido ao forte acoplamento spin-órbita, essa ordem é invertida: a banda de caráter (s), originalmente associada à condução, passa a situar-se abaixo da banda de caráter (s), originalmente associada à condução, passa a situar-se abaixo da banda de caráter

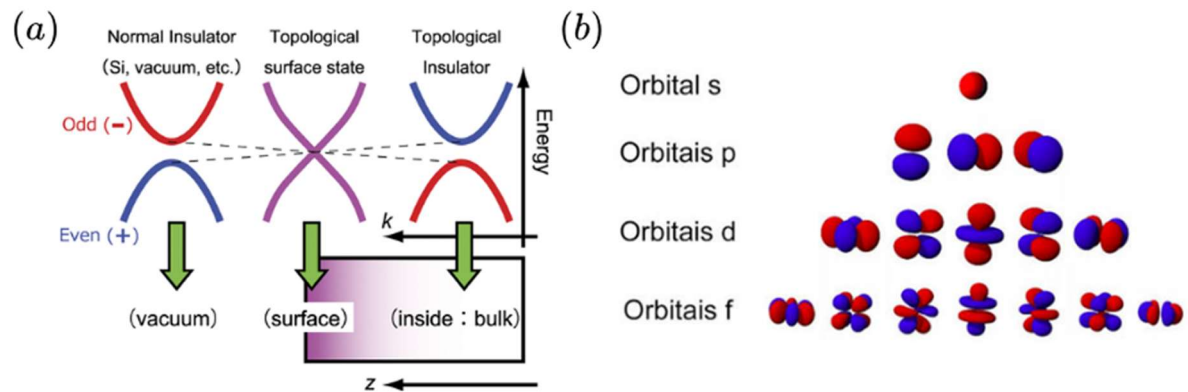
(p), que passa a ocupar a região superior. Em outras palavras, os estados de menor energia, originalmente associados aos orbitais (p), trocam de posição com os estados de caráter (s), resultando na inversão das características orbitais e das paridades das bandas. Essa inversão é consequência do forte acoplamento spin-órbita e constitui um requisito essencial para o surgimento da fase topológica, já que essa característica está relacionada a não trivialidade do Hamiltoniano.

Figura 43: Geometria e estrutura de bandas calculada do Bi_2Te_3 . (a) Vista lateral de 8 camadas quintuplas de Bi_2Te_3 , com a definição da camada quintupla superior, da camada quintupla inferior e da região com comportamento de volume (*bulk*) da estrutura. (b) Primeira zona de Brillouin da célula unitária hexagonal, indicando o caminho em k utilizado no cálculo da estrutura de bandas. (c–e) Estrutura de bandas calculada projetada sobre as três diferentes regiões da estrutura (camada quintupla superior, camada quintupla inferior e região de *bulk*), conforme definidas em (a). (f) Campo de spin-órbita das bandas de Dirac da camada quintupla superior em torno do ponto Γ . A escala de cores representa o valor esperado da componente (s_z), enquanto as setas representam as componentes de spin no plano. (g–i) O mesmo que em (c–e), porém a escala de cores representa, respectivamente, os valores esperados das componentes de spin (s_x), (s_y) e (s_z).



Fonte: Reproduzida de ZOLLNER; FABIAN (2021, p. 3).

Figura 44: Em (a) ilustração esquemática da estrutura de bandas de um isolante topológico em contato com o vácuo. Em (b) temos a representação dos orbitais atômicos espacialmente.



Fonte: Figura da esquerda reproduzida de OHTSUBO et. al (2022) e figura da direita reproduzida de BRONDANI (2019).

4 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O problema de pesquisa partiu da seguinte pergunta: o que é um isolante topológico? Na busca por responder a essa pergunta, na fundamentação teórica foi apresentada a aproximação de Born-Oppenheimer, que facilita os cálculos de estrutura eletrônica. Em seguida, tratou-se do teorema de Bloch, que descreve as soluções da equação de Schrödinger em sistemas periódicos, evidenciando o papel fundamental da simetria de translação, pois a demonstração baseia-se na comutatividade entre o operador de translação e o Hamiltoniano do sistema. Nesse capítulo inicial também foram abordadas a construção e o significado da rede recíproca e da zona de Brillouin, que são importantes na descrição das propriedades eletrônicas dos sistemas cristalinos, uma vez que estão diretamente relacionadas ao fenômeno de difração e à delimitação do momento linear dos elétrons. Além disso, foi discutida a ocupação eletrônica das bandas de valência e condução em isolantes, condutores e semicondutores, que são fundamentais para entender a diferença entre um isolante convencional e um isolante topológico. Ainda nessa etapa foi apresentada a simetria de reversão temporal (SRT), como ela inverte o sinal da unidade imaginária e que para sistemas eletrônicos com número de constituintes pares e ímpares, obtém-se $\mathbb{T}^2 = 1$ e $\mathbb{T}^2 = -1$, respectivamente. O valor de $\mathbb{T}^2 = -1$ leva diretamente a degenerescência de Kramers. Quando se lida com os estados de bordas dos isolantes topológicos o número de estados cruzando o nível de Fermi se relacionará à paridade do invariante Z_2 . Nessa construção ainda aparecem os TRIMs (time reversal invariant momenta) que são pontos especiais dentro da ZB nos quais o Hamiltoniano comuta com o operador de reversão temporal e que fundamentam matematicamente a construção do invariante Z_2 .

No trecho seguinte é trado de forma breve, porém ilustrativa a classificação topológica baseada no número genus g . E então, o teorema de Gauss-Bonnet que estabelece a ligação entre a geometria diferencial e a informação topológica de uma superfície, conectadas através da característica de Euler. Essa correspondência fundamenta o conceito de invariante topológico, já que transpõe a noção de robustez geométrica para o cenário de estrutura de bandas.

Na última parte da fundamentação são apresentadas as conexões entre topologia e matéria condensada. São discutidas algumas variantes de interesse do

efeito Hall. No efeito Hall clássico (EH) a resistência Hall varia de forma linear com o campo magnético aplicado. O EH anômalo ocorre na ausência de campo magnético externo, devido à magnetização intrínseca do material e a três contribuições distintas: deflexão intrínseca (ligada à curvatura de Berry), deslocamento lateral e espalhamento assimétrico, sendo que ocorre o surgimento de uma corrente Hall anômala.

Por outro lado, no efeito Hall quântico inteiro (EHQI) a resistência Hall varia em platôs com o campo magnético externo, isto é, ela é quantizada em múltiplos inteiros do inverso do fator de preenchimento ν . Nesse regime, os estados de bulk realizam órbitas ciclotron fechadas, enquanto os estados de borda são quirais, o que é uma manifestação direta da quebra da simetria de reversão temporal. Na tentativa de realizar o efeito Hall quântico anômalo (EHQA), surge o modelo simplificado (toy model) de Haldane (rede de favo de mel) que possui um Hamiltoniano que descreve um material ferromagnético contendo um termo complexo que quebra a SRT.

O toy model de Kane-Mele é a generalização do modelo de Haldane, porque inclui o grau de liberdade de spin e é um par complexo conjugado de modelos de Haldane. Ele constituiu uma proposta teórica de abrir um gap no grafeno e possui a propriedade de preservar tanto a SRT quanto a paridade. Esse modelo representou uma das primeiras propostas de realizar o efeito Hall quântico de spin (EHQS), caracterizado pela presença pares de Kramer nas bordas e pelo papel do acoplamento spin-órbita como um campo magnético efetivo.

Outro conceito central desenvolvido ao longo da dissertação foi a fase de Berry, entendida como uma fase geométrica adquirida pela função de onda durante a evolução adiabática ao navegar pelo espaço de estados em um ciclo. A partir dela, introduziu-se a curvatura de Berry e o correspondente número de Chern, definido como a integral sobre a zona de Brillouin em 2D da curvatura de Berry. Esse invariante topológico caracteriza a contribuição de cada banda de energia ocupada para fenômenos do tipo Hall quânticos.

Foram abordados o invariante TKNN, identificado como o primeiro número de Chern, e a correspondência bulk-boundary, segundo a qual as propriedades topológicas do bulk do material manifestam-se nas bordas por meio de estados metálicos topologicamente protegidos. Em seguida, discutiram-se a polarização e o pump de corrente de Thouless, que estabelece que a carga elétrica transportada entre as bordas durante um ciclo é quantizada e determinada pela topologia do ciclo de

bombeamento. Ainda nessa parte apresentou-se o famoso argumento de Laughlin que estabelece o fluxo de carga quantizado em uma fita metálica.

A construção do invariante Z_2 partiu de um modelo unidimensional com Hamiltoniano periódico no tempo que, em conjunto com a teoria moderna da ferroeletricidade, permite definir a polarização de reversão temporal. A partir do Pfaffiano, conduz à construção do pump de spin de Fu e Kane. Em seguida, discutiu-se a teoria topológica de campos para materiais 2D e 3D pertencentes à família AII, caracterizada pela preservação da simetria de reversão temporal. Nessa abordagem, foram apresentadas as ações efetivas, Lagrangianas e correntes correspondentes a essas classes de sistemas.

Também foi introduzido o modelo teórico BHZ, que serviu de base para a descoberta do efeito Hall quântico de spin em 2007 nos poços quânticos de HgTe. Nesse modelo de quatro bandas existe uma espessura crítica que faz ocorrer uma transição de fase topológica. Além disso, foram apresentados os modelos bidimensionais do isolante de Chern e do isolante Z_2 , com as respectivas soluções para os estados de borda e estrutura do bulk. Também foi discutido o regime de transição entre os dois sistemas. Para os sistemas tridimensionais, foram discutidos os isolantes fortes e fracos.

Por fim, na seção dedicada aos materiais, foram apresentadas as propriedades de alguns dos isolantes topológicos mais estudados na literatura. Inicialmente foram discutidas as principais características dos poços quânticos de HgTe, com ênfase na espessura crítica nesse material. Na seção seguinte foram discutidas as principais propriedades eletrônicas do seleneto de bismuto, telureto de bismuto e telureto de antimônio.

Respondendo à pergunta inicial, um isolante topológico é uma classe de materiais que apresentam o bulk isolante e estados de borda (ou de superfície) protegidos topologicamente. Esses estados podem ser quirais, quando há quebra da simetria de reversão temporal, ou helicais, quando essa simetria é preservada. Em geral, esses materiais apresentam forte acoplamento spin-órbita e seus modelos efetivos de baixa energia são de forma frequente descritos por Hamiltonianos do tipo de Dirac. Essas propriedades decorrem de uma estrutura de bandas topologicamente não trivial que é caracterizada por invariantes topológicos que distinguem diferentes fases da matéria. Dessa forma, essa classe de materiais pode ser descrita tanto pela

teoria topológica de bandas quanto pela teoria topológica de campos, evidenciando a profunda conexão entre topologia, mecânica quântica e matéria condensada.

O problema de pesquisa se constituiu em compreender os principais mecanismos das teorias gerais que caracterizam os isolantes topológicos e lidar de forma didática com os fenômenos e modelos motivadores desses materiais. Nessa perspectiva os modelos motivadores foram tratados de maneira ilustrativa e com as propriedades principais evidenciadas.

O presente estudo possui como limitação o fato de abordar os sistemas apenas do ponto de vista teórico, de modo que uma investigação computacional deixaria o trabalho ainda mais abrangente. Além disso, não foram considerados Hamiltonianos do tipo Dirac que incorporam correções de ordem superior. Apesar dos materiais reais serem descritos por Hamiltonianos mais complexos, as aproximações de primeira ordem empregadas nos modelos 2D se mostraram suficientes para ilustrar os principais efeitos físicos e propriedades topológicas discutidas ao longo da dissertação.

Como perspectivas para trabalhos futuros, pretende-se desenvolver simulações computacionais de isolantes topológicos usando softwares de simulação computacional como o Quantum EXPRESSO e estudar como se comportam as propriedades magnetoelétricas conforme perturbamos o sistema. Espera-se, assim, que esta dissertação contribua para a compreensão dos principais fundamentos físicos e matemáticos dos isolantes topológicos, servindo como material de apoio para estudantes e pesquisadores interessados nessa área de pesquisa.

REFERÊNCIAS

- ANDO, Yoichi. **Topological insulator materials**. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 82, n. 10, art. 102001, 2013. DOI: 10.7566/JPSJ.82.102001.
- ASBÓTH, János K.; OROSZLÁNY, László; PÁLYI, András. **A short course on topological insulators: band-structure topology and edge states in one and two dimensions**. Cham: Springer, 2016. (Lecture Notes in Physics, v. 919). DOI: 10.1007/978-3-319-25607-8.
- ASHCROFT, Neil W.; MERMIN, N. David. **Solid state physics**. New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- BANDYOPADHYAY, A.; JANA, D. **Dirac Materials in a Matrix Way**. *Universal Journal of Materials Science*, v. 8, n. 2, p. 35–43, 2020. DOI: 10.13189/ujms.2020.080201.
- BASSALO, José Maria Filardo. **Eletrodinâmica quântica**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2010.
- BERNEVIG, B. A.; CHERN, C. H.; HU, J. P.; TOUMBAS, N.; ZHANG, S. C. **Effective Field Theory Description of the Higher Dimensional Quantum Hall Liquid**. *Annals of Physics*, v. 300, n. 2, p. 185–207, 2002. DOI: 10.1006/aphy.2002.6292.
- BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. **Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells**. *Science*, v. 314, n. 5806, p. 1757–1761, 2006. DOI: 10.1126/science.1133734.
- BERNEVIG, B. A.; ZHANG, S.-C. **Quantum spin Hall effect**. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 10, art. 106802, 2006. DOI: 10.1103/PhysRevLett.96.106802.
- BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L. **Topological insulators and topological superconductors**. Princeton: Princeton University Press, 2013.
- BORHER, Felipe Amorim. **Isolantes topológicos: nanofitas de siliceno sob campo elétrico**. 2019. 75 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2019.
- BOUKAI, Akram I.; XU, Kun; HEATH, James R. **Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials**. *Advanced Materials*, v. 18, n. 7, p. 864–869, 2006. DOI: 10.1002/adma.200501686.
- BRONDANI, Patrícia Bulegon. **Ligações químicas, hibridização, polaridade e efeitos químicos**. Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, 2019. Disponível em: <https://patyqmc.paginas.ufsc.br/files/2019/07/Ligações-Químicas-Hibridização-Polaridade-Efeitos-Químicos.pdf>. Acesso em: 16 jul. 2026.
- CITRO, Roberta; AIDELSBURGER, Monika. **Thouless pumping and topology**. *Nature Reviews Physics*, v. 5, n. 2, p. 87–101, 2023. DOI: 10.1038/s42254-022-00545-0.
- COHEN, E.; LAROCQUE, H.; BOUCHARD, F.; NEJADSATTARI, F.; GEFEN, Y.; KARIMI, E. **Geometric phase from Aharonov–Bohm to Pancharatnam–Berry and beyond**. *Nature Reviews Physics*, v. 1, p. 437–449, 2019. DOI: 10.1038/s42254-019-0071-1.

COURTEILLE, Philippe W. **Quantum mechanics for atomic & molecular physics, quantum & atom optics**. São Carlos: Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2026. **Notas de curso**. Disponível em: <https://www.ifsc.usp.br/~strontium/Publication/Scripts/QuantumMechanicsScript.pdf>. Acesso em: 10 mai. 2025.

DE GRACIA, G. B.; PIMENTEL, B. M. **Quantum Hall effect: from the Drude conductivity model to the Chern-Simons field description**. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 45, e20230042, 2023. DOI: 10.1590/1806-9126-RBEF-2023-0042.

DYAKONOV, M. I.; PEREL, V. I. **Possibility of orienting electron spins with current**. *JETP Letters*, v. 13, p. 467–469, 1971a.

DYAKONOV, M. I.; PEREL, V. I. **Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors**. *Physics Letters A*, v. 35, n. 6, p. 459–460, 1971b. DOI: 10.1016/0375-9601(71)90171-0.

DYAKONOV, M. I. **Spin Hall effect**. In: LURYI, S.; XU, J.; ZASLAVSKY, A. (ed.). *Future Trends in Microelectronics from nanophotonics to sensors to energy*. Hoboken: Wiley, 2010. p. 251–281. DOI: 10.1002/9780470649343.ch16

FAZZIO, Adalberto. **Além do gap: a ciência dos isolantes topológicos**. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 47, supl. 3, 2025. DOI: 10.1590/1806-9126-RBEF-2025-0292.

FRADKIN, Eduardo. **Field theories of condensed matter physics**. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2013.

FU, Liang; KANE, C. L. **Time reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump**. *Physical Review B*, v. 74, n. 19, art. 195312, 2006. DOI: 10.1103/PhysRevB.74.195312.

FÜNFHAUS, Axel; KOPP, Thilo; LETTL, Elias. **Winding vectors of topological defects: multiband Chern numbers**. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 55, n. 40, art. 405202, 2022. DOI: 10.1088/1751-8121/ac8ef7.

GOERBIG, M. O. **Quantum Hall effects**. *CERN Yellow Reports: School Proceedings*, p. 1–75, 2009. DOI: 10.5170/CERN-2009-005.1.

GRIFFITHS, David J.; SCHROETER, Darrell F. **Mecânica quântica**. 3. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2011.

HALDANE, F. Duncan M. **Model for a quantum Hall effect without Landau levels: condensed-matter realization of the “parity anomaly”**. *Physical Review Letters*, v. 61, n. 18, p. 2015–2018, 1988. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.2015.

HALPERIN, B. I. **Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential**. *Physical Review B*, v. 25, n. 6, p. 2185–2190, 1982. DOI: 10.1103/PhysRevB.25.2185.

HASAN, M. Z.; KANE, C. L. **Colloquium: Topological insulators**. *Reviews of Modern Physics*, v. 82, n. 4, p. 3045–3068, 2010. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.3045.

HATSUGAI, Yasuhiro. **Chern number and edge states in the integer quantum Hall effect**. *Physical Review Letters*, v. 71, n. 22, p. 3697–3700, 1993. DOI: 10.1103/PhysRevLett.71.3697.

HSIEH, D.; XIA, Y.; QIAN, D.; WRAY, L.; MEIER, F.; DIL, H. J.; OSTERWALDER, J.; PATTHEY, L.; FEDOROV, A. V.; LIN, H.; BANSIL, A.; GRAUER, D.; HOR, Y. S.; CAVA, R. J.; HASAN, M. Z. **Observation of time-reversal-protected single-Dirac-cone topological-insulator states in Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3** . *Physical Review Letters*, v. 103, art. 146401, 2009. DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.146401.

KANE, C. L.; MELE, E. J. **$\mathbb{Z}_2$ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect**. *Physical Review Letters*, v. 95, art. 146802, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.146802.

KATO, Y. K.; MYERS, R. C.; GOSSARD, A. C.; AWSCHALOM, D. D. **Observation of the spin Hall effect in semiconductors**. *Science*, v. 306, n. 5703, p. 1910–1913, 2004. DOI: 10.1126/science.1105514.

KING-SMITH, R. D.; VANDERBILT, D. **Theory of polarization of crystalline solids**. *Physical Review B*, v. 47, n. 3, p. 1651–1654, 1993. DOI: 10.1103/PhysRevB.47.1651.

KITTEL, Charles. **Introduction to solid state physics**. 8. ed. Hoboken: Wiley, 2005.

KÖNIG, Markus et al. **Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells**. *Science*, v. 318, n. 5851, p. 766–770, 2007. DOI: 10.1126/science.1148047.

KUIPER, Pieter. **Comparison of the electronic band structures of metals, semiconductors and insulators**. *Wikimedia Commons*, 6 jun. 2007. Disponível em: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Isolator-metal.svg>. Acesso em: 11 jan. 2025.

LAHTINEN, V. T.; PACHOS, J. K. **A Short Introduction to Topological Quantum Computation**. *SciPost Physics*, v. 3, n. 3, art. 021, 2017. DOI: 10.21468/SciPostPhys.3.3.021.

LANCASTER, Tom; BLUNDELL, Stephen J. **Quantum field theory for the gifted amateur**. Oxford: Oxford University Press, 2014.

LAUGHLIN, R. B. **Quantized Hall conductivity in two dimensions**. *Physical Review B*, v. 23, n. 10, p. 5632–5633, 1981. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5632.

LOWRANCE, Andrew. **Topological Insulators and Applications to Quantum Computing**. *Journal of Young Investigators*, seção *Science News*, 1 jul. 2019. Disponível em: <https://www.jyi.org/2019-july/2019/7/1/topological-insulators-and-applications-to-quantum-computing>. Acesso em: 7 set. 2025.

MACDONALD, James. **Notes 3: Hydrogen Fine Structure**. Newark: University of Delaware, 2020. Notas de curso da disciplina PHYS425: Quantum Mechanics II. Disponível em: https://www.physics.udel.edu/~jim/PHYS425_20S/Class%20Notes/Notes_3.pdf. Acesso em 15 jun. 2025.

MACHADO, Kleber Daum. **Eletromagnetismo: volume III**. Ponta Grossa: Todapalavra Editora, 2013. v. 3.

MADELUNG, Otfried. **Semiconductors: data handbook**. 3. ed. Berlin: Springer, 2004.

MAHAN, G. D. **Many-Particle Physics**. 3. ed. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000.

MURAKAMI, Shuichi; NAGAOSA, Naoto; ZHANG, Shou-Cheng. **Dissipationless quantum spin current at room temperature**. *Science*, v. 301, n. 5638, p. 1348–1351, 2003. DOI: 10.1126/science.1087128.

NAGAOSA, Naoto; SINOVA, Jairo; ONODA, Shigeki; MACDONALD, A. H.; ONG, N. P. **Anomalous Hall effect**. *Reviews of Modern Physics*, v. 82, n. 2, p. 1539–1592, 2010. DOI: 10.1103/RevModPhys.82.1539.

NAKAI, Ryota; RYU, Shinsei; NOMURA, Kentaro. **Laughlin's argument for the quantized thermal Hall effect**. *Physical Review B*, v. 95, n. 16, art. 165405, 2017. DOI: 10.1103/PhysRevB.95.165405.

NASTASE, Horatiu. **String theory methods for condensed matter physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.

NISHIMORI, Hidetoshi; ORTIZ, Gerardo. **Elements of phase transitions and critical phenomena**. Oxford: Oxford University Press, 2011. DOI: 10.1093/acprof:oso/9780199577224.001.0001.

NUNES, Leandro Santos. **Eletrodinâmica de Einstein: aspectos teóricos e experimentais**. 2023. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Física) – Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Rio Claro, 2023. Disponível em: <https://repositorio.unesp.br/entities/publication/f651d10f-019a-4c21-b3e4-84da277f43ed>. Acesso em: 12 mar. 2025.

OLIVEIRA, Ivan S.; JESUS, Vitor L. B. de. **Introdução à física do estado sólido**. São Paulo: Livraria da Física, 2005. ISBN 978-85-88325-45-6.

ONODA, Masaru; NAGAOSA, Naoto. **Quantum transport theory of anomalous electric, thermal, and spin Hall effects in ferromagnets**. *Physical Review Letters*, v. 95, n. 10, art. 106601, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.106601.

OHTSUBO, Y.; KIMURA, S.-i.; IGA, F. **Recent progress in clean-surface formation of topological Kondo insulators and topological surface states observed there**. *Electronic Structure*, v. 4, n. 3, art. 033003, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1088/2516-1075/ac8631>.

PERTSOVA, A.; CANALI, C. M. **Probing the wavefunction of the surface states in Bi₂Se₃ topological insulator: a realistic tight-binding approach**. *New Journal of Physics*, v. 16, e063022, 2014. DOI: 10.1088/1367-2630/16/6/063022. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/6/063022>. Acesso em: 5 ago. 2026.

PRANGE, R. E.; GIRVIN, S. M. (org.). **The Quantum Hall Effect**. 2. ed. New York: Springer-Verlag, 1987.

QI, X.-L.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. **Topological field theory of time-reversal invariant insulators**. *Physical Review B*, v. 78, art. 195424, 2008. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.195424.

QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. **Topological insulators and superconductors**. *Reviews of Modern Physics*, v. 83, n. 4, p. 1057–1110, 2011. DOI: 10.1103/RevModPhys.83.1057.

ROCHA, Leandro Seixas. **Estrutura eletrônica de isolantes topológicos em duas e três dimensões**. 2014. Tese (Doutorado em Física) – Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014. DOI: 10.11606/T.43.2014.tde-16102014-092038.

RYU, Shinsei; SCHNYDER, Andreas P.; FURUSAKI, Akira; LUDWIG, Andreas W. W. **Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy**. *New Journal of Physics*, v. 12, art. 065010, 2010. DOI: 10.1088/1367-2630/12/6/065010.

SALM, Andries. **The Gauss-Bonnet Theorem**. 2015. Trabalho de conclusão de curso (Bachelor of Science em Matemática) – Universiteit Utrecht, Utrecht, 2015. Orientador: Gil Cavalcanti. Disponível em: https://webspace.science.uu.nl/~caval101/homepage/Students_files/SalmBachelor.pdf. Acesso em: 6 fev. 2025.

SATO, Masatoshi; ANDO, Yoichi. **Topological superconductors: a review**. *Reports on Progress in Physics*, v. 80, n. 7, art. 076501, 2017. DOI: 10.1088/1361-6633/aa6ac7.

SCHNYDER, Andreas P.; RYU, Shinsei; FURUSAKI, Akira; LUDWIG, Andreas W. W. **Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions**. *Physical Review B*, v. 78, n. 19, art. 195125, 2008. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.195125.

SEKINE, Akihiko; NOMURA, Kentaro. **Axion electrodynamics in topological materials**. *Journal of Applied Physics*, v. 129, n. 14, p. 141101, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0038804>.

SHAHVERDI, Vahid; VUORENMAA, Elmo. **Gauss–Bonnet theorem**. Stockholm: KTH Royal Institute of Technology, out. 2023. Disponível em: https://www.kth.se/files/view/kroncke/65255ef646b052cf0c851705/talk_1_gauss_bonnet.pdf. Acesso em: 6 ago. 2025.

SHEN, Shun-Qing. **Topological insulators: Dirac equation in condensed matters**. Berlin: Springer, 2012. DOI: 10.1007/978-3-642-32858-9.

SIMON, Steven H. **The Oxford Solid State Basics**. Oxford: Oxford University Press, 2013.

SNOKE, David W. **Solid state physics: essential concepts**. Boston: Addison-Wesley, 2009.

SPRINKART, Nico; SCHEER, Elke; DI BERNARDO, Angelo. **Tutorial: From Topology to Hall Effects—Implications of Berry Phase Physics**. *Journal of Low Temperature Physics*, v. 217, p. 686–719, 2024. DOI: 10.1007/s10909-024-03219-6.

SREDNICKI, Mark. **Quantum field theory**. Cambridge: Cambridge University Press, 2007.

STERN, Ady. **Anyons and the quantum Hall effect: a pedagogical review**. *Annals of Physics*, v. 323, n. 1, p. 204–249, 2008. DOI: 10.1016/j.aop.2007.10.008.

STERN, Ady; LINDNER, Netanel H. **Topological Quantum Computation—From Basic Concepts to First Experiments**. *Science*, v. 339, n. 6124, p. 1179–1184, 2013. DOI: 10.1126/science.1231473.

TAYLOR, John R. **Mecânica clássica**. Porto Alegre: Bookman, 2013.

- THONHAUSER, Thomas; SCHEIDEMANTEL, Tobias J.; SOFO, Jorge O.; BADDING, John V.; MAHAN, G. D. **Improved thermoelectric performance of doped semiconductors by electronic-structure engineering.** *Physical Review B*, v. 68, n. 8, art. 085201, 2003. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.085201.
- THOULESS, D. J.; KOHMOTO, M.; NIGHTINGALE, M. P.; DEN NIJS, M. **Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential.** *Physical Review Letters*, v. 49, n. 6, p. 405–408, 1982. DOI: 10.1103/PhysRevLett.49.405.
- TKACHOV, Grigory. **Topological quantum materials: concepts, models, and phenomena.** Boca Raton: Jenny Stanford Publishing, 2022.
- TONG, David. **The quantum Hall effect.** Cambridge: University of Cambridge, 2016. Disponível em: <https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qhe.html>. Acesso em 12 abr. 2025.
- TSUI, D. C.; STORMER, H. L.; GOSSARD, A. C. **Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit.** *Applied Physics Letters*, v. 38, n. 7, p. 550–552, 1981. DOI: 10.1063/1.92408.
- TSUTSUI, Thiago T.; SILVA, Edilberto O.; CASTRO, Antonio S. M. de; ANDRADE, Fabiano M. **The Dirac equation: historical context, comparisons with the Schrödinger and Klein-Gordon equations, and elementary consequences.** *European Journal of Physics*, v. 46, art. 053001, 2025. DOI: 10.1088/1361-6404/adf9a5.
- VANDERBILT, D. **Berry phases in electronic structure theory: electric polarization, orbital magnetization and topological insulators.** Cambridge: Cambridge University Press, 2018.
- VON KLITZING, K.; DORDA, G.; PEPPER, M. **New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance.** *Physical Review Letters*, v. 45, n. 6, p. 494–497, 1980. DOI: 10.1103/PhysRevLett.45.494.
- WINKLER, Roland. **Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems.** Berlin: Springer, 2003. (Springer Tracts in Modern Physics, v. 191). DOI: 10.1007/b13586.
- XIA, Y. et al. **Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface.** *Nature Physics*, v. 5, p. 398–402, 2009. DOI: 10.1038/nphys1274.
- YEOMANS, J. M. **Statistical mechanics of phase transitions.** Oxford: Clarendon Press, 1992.
- ZHANG, S. C.; HU, J. P. **A Four-Dimensional Generalization of the Quantum Hall Effect.** *Science*, v. 294, n. 5543, p. 823–828, 2001. DOI: 10.1126/science.294.5543.823.
- ZHANG, Haijun; LIU, Chao-Xing; QI, Xiao-Liang; DAI, Xi; FANG, Zhong; ZHANG, Shou-Cheng. **Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface.** *Nature Physics*, v. 5, p. 438–442, 2009. DOI: 10.1038/nphys1270.
- ZOLLNER, K.; FABIAN, J. **Heterostructures of Graphene and Topological Insulators Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , and Sb_2Te_3 .** *Physica Status Solidi B*, v. 258, n. 2, e2000081, 2021. DOI: 10.1002/pssb.202000081.

ZURICH INSTRUMENTS AG. **Using the Hall Effect for Nano Electronics.**

AZoNano, 27 mar. 2023. Disponível em:

<https://www.azonano.com/article.aspx?ArticleID=5177>. Acesso em: 11 jan. 2025.

APÊNDICE A - TRANSIÇÕES DE FASE E QUEBRAS DE SIMETRIAS

Uma fase pode ser definida como uniformidade das propriedades físicas de um dado sistema de interesse em escala macroscópica (NISHIMORI; ORTIZ, 2011). Já uma transição de fase é uma mudança entre diferentes tipos organizacionais da uniformidade do sistema, passando de uma certa uniformidade de propriedades físicas à outra de maneira abrupta. No aspecto matemático ela tem como sua assinatura uma singularidade no espaço de parâmetros, i.e., uma descontinuidade da função da energia livre ou de alguma de suas derivadas (YEOMANS, 1992).

Da Lei de Gibbs sabemos que o número de graus de liberdade de um sistema segue a seguinte condição (NASTASE, 2017): um sistema com f fases, n constituintes químicos e i componentes não químicas e parâmetros intensivos (que não dependem da dimensão do sistema), o número de graus de liberdade l do sistema será,

$$l = n + i - f. \quad (A.1)$$

A descrição das características da fase está condicionada as quantidades que chamamos de parâmetros de ordem que refletem o grau de ordenamento dos elementos microscópicos da fase macroscópica. Eles estão intimamente associados a quebras de simetria no sistema. Estados ordenados tem parâmetro(s) de ordem não nulo(s) antes da quebra de simetria, e estados com baixa simetria possuem valor nulo do(s) parâmetro(s) de ordem na fase desordenada que é a fase simétrica do sistema (NISHIMORI; ORTIZ, 2011; NASTASE, 2017).

Nesse aspecto também temos os expoentes críticos que são quantidades que retratam os graus de singularidades de propriedades físicas próximas a pontos críticos, i.e., pontos que demarcam mudanças de fase (YEOMANS, 1992; NISHIMORI; ORTIZ, 2011).

Em relação a transições de fase temos os seguintes aspectos gerais:

- Transições de fase de 1° ordem: a derivada de 1° ordem da função da energia livre diverge;
- Transições de fase de ordem superior, críticas ou contínuas: as derivadas de 2° ordem ou de ordem superior divergem.

A teoria formulada por Lev Landau é uma variante da teoria de campo médio e permite que obtenhamos os expoentes críticos a partir de considerações referentes a simetria do problema específico tratado. Ela assume que podemos expandir o

potencial termodinâmico ou energia livre em série de potências em torno do parâmetro de ordem tal que somente valores condizentes com a simetria particular do problema entram na conta (YEOMANS, 1992). Ela estabelece os seguintes aspectos:

- Transições de fase de 1° ordem: As fases de interesse diferem quantitativamente, mas não qualitativamente;
- Transições de fase de ordem superior, críticas ou contínuas: As fases diferem tanto quantitativamente quanto qualitativamente.

Simetrias se constituem como algo vital na física moderna, elas nos evidenciam como certas quantidades (equações de interesse, observáveis e outras quantidades) permanecem invariantes (se conservam) sob certas mudanças no sistema.

APÊNDICE B - BANDAS DE ENERGIA

O conceito de bandas de energia advém do tratamento de sistemas de muitos corpos na mecânica quântica. Podemos compreender essa teoria inicialmente a partir de poços de potencial que emulam faixas discretas de energia para então lidar com o caso contínuo.

A importância dessa teoria está em tratar os elétrons constituintes dos materiais sólidos como partículas presas em poços de potenciais, que é análogo a estarem presos aos átomos. Os elétrons sofrem um certo efeito dessa interação com os átomos (negligenciável), mas hoje em dia sabemos que eles se movem dentro desses materiais como se estivessem livres (como no vácuo) mesmo que possuam da ordem de 10^{23} átomos por centímetro cúbico.

Na física do estado sólido as células unitárias dos materiais estão distribuídas de forma periódica no espaço de maneira que ao passar do caso de um constituinte para N constituintes encontramos o conceito de separação dos níveis de energia, o qual está intimamente conectado ao Princípio de exclusão de Pauli (e a antissimetrização da função de onda) e por conseguinte a formação de bandas de energia. Aqui faremos somente uma descrição qualitativa para uma descrição completa veja SNOKE (2009).

Caso 1: Partícula em poço de potencial

Consideremos uma partícula de massa m que dentro de um poço de potencial $U(x)$ tal que $U(x) = \infty$ em $x = -a$ e em $x = a$. Usando a equação independente do tempo de Schroedinger

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= E|\psi\rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(x) \right) |\psi\rangle &= E|\psi\rangle, \end{aligned} \tag{B.1}$$

encontramos os autoestados desse sistema que são dados por,

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{quando } U(x) = \infty \\ A \sin(kx) & \text{quando } U(x) = 0 \end{cases} . \tag{B.2}$$

Os autovalores são dados por,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (B.3)$$

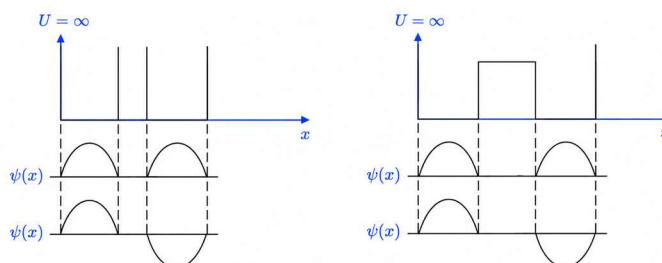
com $k = n\pi/a$ e $n \in \mathbb{Z}$.

Caso 2: Dois poços de potenciais

Poços suficientemente afastados e com potenciais infinitos

Nesse caso temos dois poços de potenciais contendo uma partícula cada um. Os poços possuem paredes de potencial infinitas nos seus extremos e entre eles possuem potencial finito, porém estão suficientemente afastados de forma a não ser possível as partículas os atravessarem. Dizemos que esses são poços independentes.

Figura 45: Dois poços de potencial, na esquerda temos o caso em que o potencial que os separa é infinito e no caso da direita o potencial é finito, porém os poços possuem grande distância de separação.



Fonte: Produção própria do autor.

Assim podemos resolver a equação de Schroedinger independente do tempo de forma separada para cada poço. Temos duas soluções degeneradas, i.e., que possuem a mesma energia.

Poços bem próximos e com potenciais finitos

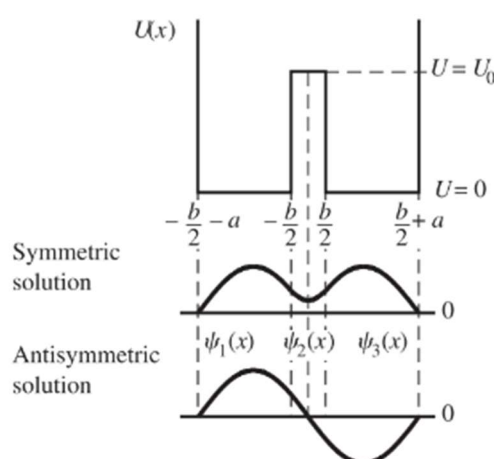
Consideremos que os poços do problema anterior estão próximos o suficiente para podermos ter a possibilidade de as partículas atravessarem a parede entre os poços, nesse caso dizemos que os poços estão acoplados e devemos resolver a

equação independente do tempo de Schroedinger para o sistema composto por esses poços. Assim, obtemos duas soluções para esse sistema:

- Simétrica;
- Antissimétrica.

Como regra geral a solução antissimétrica geralmente possui maior energia. E podemos ver isso a partir do fato de ela ter um nodo em $x = 0$. Pois, como temos uma função bem-comportada a partir do teorema de Fourier podemos escrever a mesma na forma de ondas oscilatórias, no caso da solução antissimétrica como ela vai a zero então ela deve mudar de forma rápida o que implica em termos comprimentos de ondas menores e por conseguinte maior energia (SNOKE, 2009).

Figura 46: Ilustração esquemática das soluções simétrica e antissimétrica para o caso de poços bem próximos.

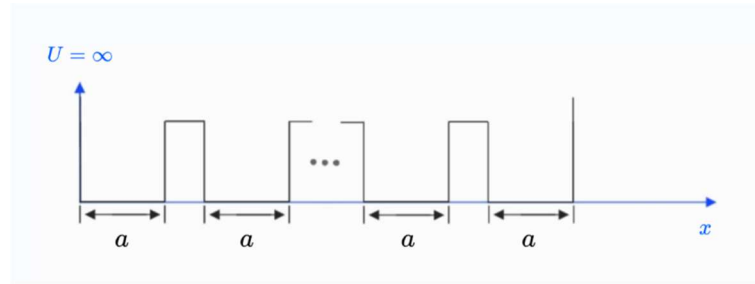


Fonte Reproduzido de SNOKE (2009, p. 3).

Caso geral e modelo de Kronig-Penney

No caso geral tomamos um número grande N de poços que estão a uma dada distância a um do outro tal que estejam próximos o suficiente para que exista a possibilidade de tunelamento, i.e., a passagem de uma partícula de um poço para outro. Assim, temos uma rede, i.e., pontos vizinhos dispostos de maneira periódica.

Figura 47: Ilustração de vários poços de potencial de largura a e de mesmo afastamento.



Fonte: Produção própria do autor.

Um modelo de grande interesse quando se estuda as propriedades de bandas eletrônicas e que é exatamente solúvel é o chamado modelo de Kronig-Penney que de forma resumida é uma extensão do modelo de poços acima. Características gerais desse modelo:

1. Para cada k dado, a energia total pode ser calculada a partir de $E = \hbar^2 K^2 / 2m$;
2. As soluções do modelo nos pontos ka e $ka + 2\pi$ são indistinguíveis.

Propriedades interessantes que encontramos nesse modelo:

1. Ao se graficar E vs k no modelo aparecem hiatos (ausência) para valores da energia E quando $k = n\pi/a$, onde a é a largura do poço;
2. A primeira derivada da energia total E com respeito a k vai para zero nos pontos iguais a $k = n\pi/a$.

Cada refletor de Bragg reflete parcialmente a onda incidente após uma distância a , tal que em uma distância de $2a/n$ a parte incidente da onda refletida volta a ser refletida novamente (distância de ida e volta entre as duas reflexões de Bragg), assim temos ondas na mesma fase se movendo para a esquerda e para a direita a cada $2a/n$ de distância e nesses pontos teremos a formação de ondas estacionárias.

A partir dessas ondas progressivas para a esquerda e para a direita podemos formar duas ondas estacionárias que denotaremos por,

$$\begin{aligned}\psi(+) &= 2 \cos(\pi x/a) \\ \psi(-) &= 2i \sin(\pi x/a)\end{aligned}\tag{B.4}$$

onde os termos $(+)$ e $(-)$ se referem a paridade das respectivas funções de onda. A região de separação dos níveis de energia é conhecida como banda de energia proibida e surge devido as funções de onda $\psi(+)$ e $\psi(-)$ acumularem elétrons em regiões distintas nesse espaço de fase, de forma que possuem valores diferentes de energia potencial no campo de íons da rede.

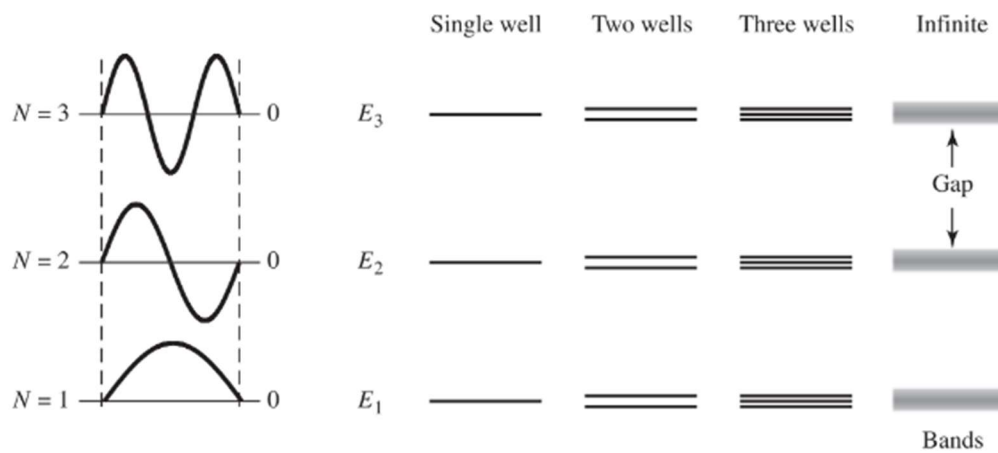
Uma maneira mais conveniente de enxergarmos isso é através dos valores esperados dessas funções de onda,

$$\begin{aligned}\rho(+) &= \cos^2(\pi x/a) \\ \rho(-) &= \sin^2(\pi x/a)\end{aligned}\quad (B.5)$$

De forma que o valor das energias potenciais de $\rho(+)$ e $\rho(-)$ é menor e maior, respectivamente, que a energia potencial da onda progressiva. A largura da banda de energia proibida, E_p , é dada por,

$$E_p = |E_{\rho(+)} - E_{\rho(-)}|. \quad (B.6)$$

Figura 48: Estados energéticos para potenciais de paredes acopladas.



Fonte: Reproduzido de SNOKE (2009, p. 6).

APÊNDICE C - OUTRAS TRANSFORMAÇÕES DISCRETAS IMPORTANTES

Conjugação de Carga

Transformação caracterizada por trocar partículas e antipartículas. Essa transformação inverte o sinal dos elementos de carga de uma partícula: carga elétrica, carga bariônica e outras mais (LANCASTER; BLUNDELL, 2014). Podemos representar essa transformação pelo operador $\mathbb{C}$ tal que dada uma partícula $|a\rangle$ e sua antipartícula $|\bar{a}\rangle$, de forma que

$$|a\rangle \rightarrow |\bar{a}\rangle, \quad (\text{C. 1})$$

assim, de maneira formal temos,

$$\mathbb{C}|a\rangle = |\bar{a}\rangle, \quad (\text{C. 2})$$

então, supondo que a partícula $|a\rangle$ tenha sua carga quântica (observável) q , tal que $\mathbb{Q}|a\rangle = q|a\rangle$, onde $\mathbb{Q}$ é o operador carga. Portanto, podemos escrever

$$\mathbb{C}\mathbb{Q}|a\rangle = \mathbb{C}q|a\rangle = q\mathbb{C}|a\rangle = q|\bar{a}\rangle, \quad (\text{C. 3})$$

além disso,

$$\mathbb{Q}\mathbb{C}|a\rangle = \mathbb{Q}|\bar{a}\rangle = -q|\bar{a}\rangle, \quad (\text{C. 4})$$

de forma que comparando as duas temos,

$$\mathbb{Q}\mathbb{C} = -\mathbb{C}\mathbb{Q} \Rightarrow \mathbb{C}^{-1}\mathbb{Q}\mathbb{C} = -\overbrace{\mathbb{C}^{-1}\mathbb{C}}^{=1}\mathbb{Q}, \quad (\text{C. 5})$$

e por fim,

$$\mathbb{C}^{-1}\mathbb{Q}\mathbb{C} = -\mathbb{Q}. \quad (\text{C. 6})$$

Numa abordagem de segunda quantização, i.e., fazendo uso dos operadores criação $(\hat{a}_p^\dagger, \hat{\bar{a}}_p^\dagger)$ e destruição $(\hat{a}_p, \hat{\bar{a}}_p)$,

$$\mathbb{C}^{-1}\hat{a}_p\mathbb{C} = \hat{\bar{a}}_p, \quad (\text{C. 7})$$

$$\mathbb{C}^{-1}\hat{a}_p^\dagger\mathbb{C} = \hat{\bar{a}}_p^\dagger. \quad (\text{C. 8})$$

De maneira geral a conjugação de carga é um operador unitário que inverte o sinal de campos escalares, entretanto mantém seus argumentos espaço-temporais

invariantes (SREDNICKI, 2007). No caso de termos um campo escalar $\phi_a(x)$ e um operador unitário Z , tal que,

$$Z^{-1}\phi_a(x)Z = \eta_a\phi_a(x), \quad (C.9)$$

com η_a sendo $+1$ ou -1 para cada campo e Z um operador Z_2 , dado que Z_2 é o grupo aditivo de módulo 2, i.e., $\{n = |2|, +\} = \{+1, -1, \times\}$. De forma que,

$$Z^{-1} = Z, \quad (C.10)$$

$$Z^2 = 1. \quad (C.11)$$

Assim sendo, um campo escalar complexo dado por,

$$\phi = \frac{(\phi_1 + i\phi_2)}{\sqrt{2}}, \quad (C.12)$$

que possui o Lagrangiano da seguinte forma,

$$\mathcal{L} = -\partial^\mu \phi^\dagger \partial_\mu \phi - m^2 \phi^\dagger \phi - \frac{1}{4} \lambda (\phi^\dagger \phi)^2. \quad (C.13)$$

Vemos que $\mathcal{L}$ é invariante sob a transformação $\phi(x) \rightarrow e^{-i} \phi(x)$, que é a transformação $U(1)$. Porém, este mesmo Lagrangiano possui uma outra simetria, $\phi(x) \leftrightarrow \phi^\dagger(x)$, que é a conjugação de carga (SREDNICKI, 2007). Então, tomando um campo escalar $\phi(x)$, podemos inserir um operador de conjugação de carga através de um operador Z_2 que obedeça,

$$\mathbb{C}^{-1}\phi(x)\mathbb{C} = \phi^\dagger(x), \quad (C.14)$$

de forma que,

$$\mathbb{C}^{-1}\mathcal{L}(x)\mathbb{C} = \mathcal{L}(x), \quad (C.15)$$

ou seja, mantém as amplitudes de espalhamento invariantes, mas troca os tipos de partículas. De maneira geral nem toda simetria Z_2 está associada a uma simetria de partícula e antipartícula.

Transformação de Paridade

Essa é a transformação caracterizada pela reflexão em um espelho das coordenadas perpendiculares ao mesmo seguida de uma rotação de π -graus (180° graus) de todas as coordenadas (LANCASTER; BLUNDELL, 2014). Essa

transformação será representada pelo operador $\mathbb{P}$ tal que dado o operador posição $\hat{r}$, vem

$$\hat{r}\mathbb{P} = -\mathbb{P}\hat{r}, \quad (C.16)$$

ou ainda,

$$\{\hat{r}, \mathbb{P}\} = 0. \quad (C.17)$$

Podemos escrever

$$\mathbb{P}\hat{r}\mathbb{P}^{-1} = -\overbrace{\mathbb{P}\mathbb{P}^{-1}}^{=1}\hat{r}, \quad (C.18)$$

e, portanto,

$$\mathbb{P}\hat{r}\mathbb{P}^{-1} = -\hat{r}. \quad (C.19)$$

e para o momentum,

$$\mathbb{P}\hat{p}\mathbb{P}^{-1} = -\hat{p}. \quad (C.20)$$

Tal que a seguinte relação é preservada, no caso da direção x ,

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i. \quad (C.21)$$

Podemos escrever também a partir da notação quadrivetorial,

$$\mathbb{P} = \mathbb{P}^\mu{}_\nu = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{bmatrix}. \quad (C.22)$$

Definindo o tensor métrico como,

$$g^{\mu\nu} = (t, \vec{r}) = (+1, -1, -1, -1), \quad (C.23)$$

além disso a transformação própria ortocrônica de Lorentz $\Lambda^\mu{}_\nu$ tem associação a um operador unitário $U(\Lambda)$ (SREDNICKI, 2007),

$$U(\Lambda)^{-1}\phi(x)U(\Lambda) = \phi(\Lambda^{-1}x), \quad (C.24)$$

de maneira que,

$$\mathbb{P} \equiv U(\mathbb{P}). \quad (C.25)$$

Considerando o campo escalar $\phi(x)$, quando $\mathbb{P}$ atua sobre ele temos (teorias de spin zero),

$$\mathbb{P}^{-1}\phi(x)\mathbb{P} = \phi(\mathbb{P}x). \quad (C.26)$$

entretanto,

$$\mathbb{P}^\mu{}_\nu = (\mathbb{P}^{-1})^\mu{}_\nu, \quad (C.27)$$

$$\mathbb{P}^\dagger = \mathbb{P}, \quad (C.28)$$

$$\mathbb{P}^2 = \mathbb{I}. \quad (C.29)$$

De forma que também escrever para $\phi(x)$ o seguinte resultado,

$$\mathbb{P}^{-2}\phi(x)\mathbb{P}^2 = \phi(x). \quad (C.30)$$

Porém, com $\phi(x)$ sendo hermitiano, i.e., $\phi(x) = [\phi(x)]^\dagger$, podemos escrever (para teorias de spin $1/2$),

$$\mathbb{P}^{-1}\phi(x)\mathbb{P} = -\phi(\mathbb{P}x). \quad (C.31)$$

Campos do tipo acima são chamados de ímpares sob a paridade ou sob a reversão temporal (abaixo) a qual acontece o mesmo. Em alguns entes matemáticos de interesse podemos colocar as seguintes características da atuação do operador paridade,

$$P(\text{escalar}) = \text{escalar}$$

$$P(\text{pseudoescalar}) = -\text{pseudoescalar}$$

$$P(\text{vetor}) = \text{vetor}$$

$$P(\text{pseudovetor}) = -\text{pseudovetor}$$

além disso,

$$\text{Campo escalar ímpar sob paridade} \rightarrow \text{campo pseudoescalar}$$

$$\text{Campo vetorial ímpar sob paridade} \rightarrow \text{campo pseudovetorial}$$

APÊNDICE D - HAMILTONIANO DE UMA PARTÍCULA EM UM CAMPO MAGNÉTICO

A Lagrangiana $\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = \mathcal{L}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t)$ para uma partícula que está sob a ação de um campo eletromagnético é dada por (BASSALO, 2010; MACHADO, 2013; TAYLOR, 2013),

$$\mathcal{L} = T - U = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}}^2 + e(\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} - V), \quad (D.1)$$

ou ainda,

$$\mathcal{L} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + e(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} - V). \quad (D.2)$$

Definindo o momento canônico generalizado como,

$$\mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}}. \quad (D.3)$$

Considerando também que podemos escrever o campo elétrico e magnético em função dos potenciais escalar V e vetorial $\mathbf{A}$ como, respectivamente,

$$\mathbf{E} = -\nabla V - \partial_t \mathbf{A}, \quad (D.4)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (D.5)$$

Substituindo (D.1) em (D.3) obtemos,

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}} + e\mathbf{A}, \quad (D.6)$$

e isolando $\dot{\mathbf{r}}$ em (D.6) obtemos,

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{p} + e\mathbf{A}}{m}. \quad (D.7)$$

Lembremos agora da relação entre a Hamiltoniana e a Lagrangiana,

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}, \quad (D.8)$$

$$H = 2T - \mathcal{L}, \quad (D.9)$$

portanto, colocando (D.1) em (D.9),

$$H = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \mathcal{L},$$

$$H = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - e(\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} - V). \quad (D.10)$$

Então, colocando (1.6) em (1.10),

$$H = (m\dot{\mathbf{r}} + e\mathbf{A}) \cdot \dot{\mathbf{r}} - \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - e(\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} - V),$$

$$H = m\dot{\mathbf{r}}^2 + e\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - e\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} + eV,$$

$$H = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - eV, \quad (D.11)$$

e por fim, substituindo (D.7) em (D.11),

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - eV. \quad (D.12)$$

Quando $\mathbf{p}$ e $\mathbf{x}$ são canônicos significa que (GOERBIG, 2009; TONG, 2016),

$$\{x_i, p_j\} = \delta_{ij} \text{ tal que } \{x_i, x_j\} = \{p_i, p_j\} = 0. \quad (D.13)$$

Para os parênteses de Poisson obtemos,

$$m\{\dot{x}_i, \dot{x}_j\} = \{p_i + eA_i, p_j + eA_j\},$$

$$m\{\dot{x}_i, \dot{x}_j\} = -e\epsilon_{ijk} B_k, \quad (D.14)$$

assim, em nosso caso os parênteses de Poisson são não nulos.

A fim de estudarmos a quantização existente na ideia de níveis de Landau iremos tratar o sistema quantum mecanicamente. No caso do estudo do efeito Hall estamos interessados em,

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2. \quad (D.15)$$

assim focaremos na equação (D.15) nas próximas etapas. Estamos interessados em obter o espectro e função de onda do Hamiltoniano quântico (TONG, 2016). Porém em nosso caso, o momentum generalizado $\mathbf{p}$ não é invariante sob transformação de calibre. Uma forma conveniente de tratar esse aspecto é usar o momentum linear. Escrevendo então o momentum linear $m\dot{\mathbf{r}}$ pela sua forma invariante sob transformação de calibre $\boldsymbol{\pi}$,

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A} = m\dot{\mathbf{r}}, \quad (D.16)$$

essa transformação também é chamada de substituição mínima ou de Peierls (GOERBIG, 2009). No caso de elétrons em uma rede ainda encontramos o conceito de comprimento magnético $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, o qual é a escala de comprimento fundamental na presença de um campo magnético e que evidencia que a substituição de Peierls permanece correta para esse caso quando o espaçamento de rede é muito menor que esse comprimento. A partir dos parênteses de Poisson da mecânica clássica dado em (D.13) e do uso do princípio da correspondência que estabelece (DE GRACIA; PIMENTEL, 2023),

$$i\hbar\{, \} \rightarrow [,], \quad (D.17)$$

e obtemos as relações de comutação canônica,

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \text{ tal que } [x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0. \quad (D.18)$$

Como consequência dessas relações de comutação obtemos também que,

$$[\pi_i, \pi_j] = i\hbar e \epsilon_{ijk} B_k, \quad (D.19)$$

e que,

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad (D.20)$$

onde ϵ_{ijk} é o tensor de Levi-Civita. Como pontos importantes temos que os comutadores das quantidades invariantes de calibre π_i e π_j são também invariantes de calibre, as componentes são mutuamente conjugadas como as relações de comutação canônicas, π_i gera um boost do momento invariante de calibre na direção j . Assim, não podemos diagonalizar π_i e π_j como no caso sem campo magnético (devido a comutação em D.18). Podemos então inserir os operadores escada – levantamento e abaixamento análogos ao do oscilador harmônico, que irão atuar como um momento invariante de calibre,

$$\left. \begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\pi_x - i\pi_y) \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\pi_x + i\pi_y) \end{aligned} \right\}. \quad (D.21a)$$

e,

$$\left. \begin{aligned} \pi_x &= \sqrt{\frac{e\hbar B}{2}}(a^\dagger + a) \\ \pi_y &= \frac{1}{i} \sqrt{\frac{e\hbar B}{2}}(a^\dagger - a) \end{aligned} \right\}. \quad (D.21b)$$

Podemos escrever então,

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \pi_i \pi^i = \frac{1}{2m} \boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\pi} = \frac{1}{2m} (\pi_x^2 + \pi_y^2) \\ &= \hbar\omega_B \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (D.22)$$

com $\omega_B = eB/m$ que é a frequência ciclotron. Notemos que não estamos levando em conta o spin.

E por fim usando a construção do espaço de Hilbert advinda do estado de vácuo: $|0\rangle$ de forma que obedeça $a|0\rangle = 0$, criamos todo o resto faltante do espaço de Hilbert a partir de,

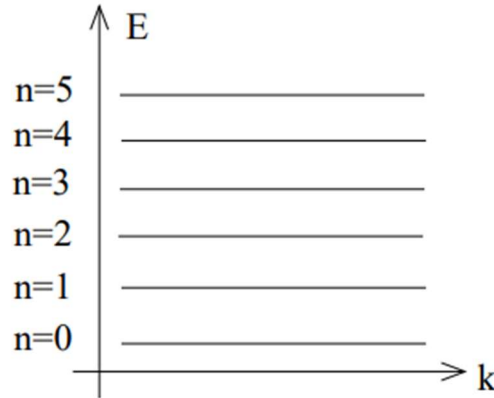
$$\left. \begin{aligned} a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \end{aligned} \right\}. \quad (D.23)$$

com o estado $|n\rangle$ possuindo as autoenergias dadas por (lembrando que $n = a^\dagger a$),

$$E_n = \hbar\omega_B \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (D.24)$$

i.e., os níveis de energia ficam igualmente espaçados com o gap de cada um proporcional ao campo magnético B . Assim, esses podem ser vistos como níveis de energia do sistema na Zona de Brillouin magnética.

Figura 49: Ilustração dos níveis de Landau.



Fonte: Reproduzido de TONG (2016, p. 21).

Quando levamos em conta o grau de liberdade devido ao spin do elétron temos o efeito Zeeman presente, esse efeito é o responsável pela divisão ou deslocamento das raias espectrais, i.e., níveis energéticos do átomo devido a existência de um campo magnético externo (GRIFFITHS, 2011).

Assim, quando levamos em conta o spin e o consequente aparecimento do efeito Zeeman a energia de separação causada por esse efeito tende a ter o mesmo valor que o quanta do nível de Landau. Além disso, consideramos que o campo magnético é forte o suficiente a fim de polarizar todos os spins, e por conseguinte minimizar esse efeito (DE GRACIA; PIMENTEL, 2023).

A degenerescência de uma amostra qualquer é dada por,

$$\mathcal{N} = \frac{AB}{\phi_0}, \quad (D.25)$$

i.e., o número de estados em um torus, onde ϕ_0 é dado em (2.94) e A é a área da amostra.

Para o caso relativista

$$H_D = v[(\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}]$$

$$H_D = v \begin{pmatrix} 0 & \pi_x - i\pi_y \\ \pi_x + i\pi_y & 0 \end{pmatrix} = v\sqrt{2\hbar} \begin{pmatrix} 0 & a \\ a^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (D.26)$$

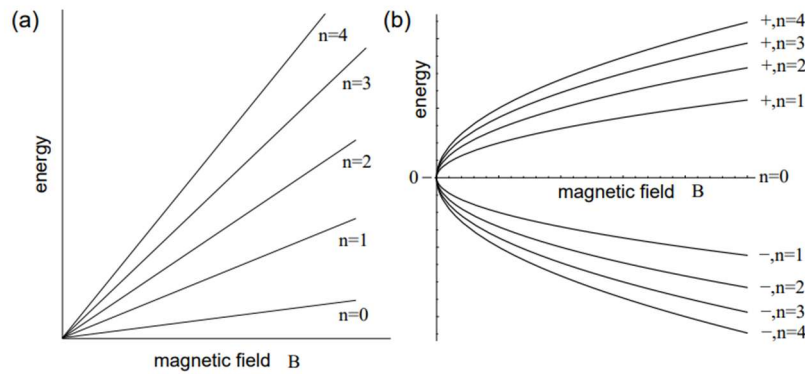
O termo $\omega_D = \sqrt{2\hbar}$ é a frequência ciclotron ou frequência característica. Os autoestado do Hamiltoniano são 2-espinores da forma,

$$\psi_n = \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix}, \quad (D.27)$$

tal que ao resolvermos a equação de autovalor $H_D \psi_n = \epsilon_n \psi_n$ encontramos para o segundo espinor,

$$a^\dagger a v_n = \left(\frac{\epsilon_n}{\hbar \omega_D} \right)^2 v_n, \quad (D.28)$$

Figura 50: Ilustração esquemática dos níveis de Landau levando em conta o grau de liberdade de spin. (a) Caso não relativista; (b) Caso relativista.



Fonte: Reproduzido de GOERBIG (2009, p. 31).

que é um autoestado do operador número $n = a^\dagger a$, tal que podemos identificar o segundo espinor como $v_n \sim |n\rangle$, onde $|n\rangle$ é o autoestado do Hamiltoniano não relativístico e $\epsilon_n^2 = \hbar^2 \omega_D^2 n$, i.e., a energia é proporcional a um número quântico. A partir da introdução do número quântico $\lambda = \pm$ temos então duas soluções, uma positiva dada por $\lambda = +$ e uma negativa $\lambda = -$, assim

$$\epsilon_{\lambda,n} = \lambda \sqrt{\hbar v \sqrt{2n}}, \quad (D.29)$$

dados na figura 50. A dispersão desses níveis de Landau é $\lambda \sqrt{Bn}$. De posse da solução acima a solução para o primeiro espinor é,

$$u_n \propto a v_n \sim a |n\rangle \sim |n-1\rangle, \quad (D.30)$$

a distinção entre os níveis (estados) de Landau é feita a partir,

$$\psi_{n=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ |n=0\rangle \end{pmatrix}, \quad (D.31)$$

$$\psi_{\lambda,n \neq 0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |n-1\rangle \\ \lambda |n\rangle \end{pmatrix}, \quad (D.32)$$

onde o primeiro é o caso do “estado fundamental” do nível de Landau, i.e., caso de energia zero e o segundo são as soluções, positivas e negativas, indexadas por λ para o caso diferente de zero.

APÊNDICE E - ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA E EQUAÇÃO DE DIRAC

Consideremos a seguinte situação o elétron está em órbita em torno de um núcleo atômico do ponto de vista do elétron o próton é que em gira em torno dele, assim temos uma carga positiva em órbita a qual configura um campo magnético $\mathbf{B}$ no quadro do elétron, a partir da regra da mão direita então temos um torque sobre o elétron que gira de forma que ele tende alinhar seu momento magnético paralelamente a direção da força de Lorentz. A interação de um dipolo magnético com um campo magnético é descrita pelo Hamiltoniano:

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (E.1)$$

onde $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{s}$, é o momento magnético de spin, γ é a razão giromagnética e $\mathbf{s}$ é o momento angular de spin. Considerando o sistema próton-elétron como um circuito fechado podemos dizer que temos um campo magnético que será dado pela Lei de Biot-Savart,

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0 I}{2r}, \quad (E.2)$$

tal que $I = e/T$ é a corrente eficaz, com e sendo a carga do próton e T é o período da órbita. Já o momento angular orbital do elétron no referencial de repouso do núcleo,

$$L = rm_e v = \frac{2\pi m_e r^2}{T}, \quad (E.3)$$

como $\mathbf{B}$ e $\mathbf{L}$ apontam na mesma direção encontramos que,

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{m_e c^2 r^3} \mathbf{L}, \quad (E.4)$$

A fim de obter o momento de dipolo magnético do elétron tomando o caso de uma carga q espalhada ao redor de um anel de raio r o qual gira em torno do eixo com um certo período T (GRIFFITHS, 2011), o momento de dipolo é

$$\mu_d = \frac{q}{T} \pi r^2, \quad (E.5)$$

i.e., a corrente multiplicada pela área do anel. Considerando que o anel possua massa m , podemos relacionar seu momento de inércia I e seu momento angular S

$$S = I\omega = \frac{2\pi mr^2}{T}. \quad (E.6)$$

A razão giromagnética clássica é dada por

$$\boldsymbol{\mu} = \left(\frac{q}{2m}\right) \mathbf{S}, \quad (E.7)$$

no caso do elétron

$$\boldsymbol{\mu}_e = -2\mu = \left(-\frac{e}{m_e}\right) \mathbf{S}, \quad (E.8)$$

(onde o chamado fator g vale aproximadamente 2) como Dirac colocou em sua teoria relativística, tal que usando (E.4) e (E.8) o Hamiltoniano de (E.1) se torna

$$H = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{1}{m_e^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \quad (E.9)$$

isso se o referencial do elétron fosse inercial, o que não é. Como o elétron acelera em torno do núcleo, usando a correção cinemática chamada de precessão de Thomas, que em nosso caso adiciona um fator $1/2$, obtemos

$$H'_{SO} = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\right) \frac{1}{m_e^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}, \quad (E.10)$$

tal que a situação física se constitui pelo torque exercido pelo campo magnético do próton sobre o momento de dipolo magnético do elétron giratório no quadro de repouso instantâneo do elétron (GRIFFITHS, 2011). Quanticamente o resultado é o de que o Hamiltoniano H'_{SO} não comuta nem com o momento angular orbital $\mathbf{L}$ nem com o momento angular de spin $\mathbf{S}$, de forma que eles não são conservados de forma separada.

Já L^2 , S^2 e o momento angular total $\mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S}$ comutam com H'_{SO} , o que implica em serem conservados, sendo assim junto a J_z estados bons para serem usados na teoria de perturbação não degenerada.

No que trata da necessidade da equação de Dirac devemos enfatizar que ela diferente da equação de Schrödinger é covariante por transformações de Lorentz. Assim, no caso da equação de Schrödinger qualquer transformação de Lorentz de um referencial inercial para um referencial que esteja em movimento não fornecerá uma equação que seja do tipo que é a de Schrödinger, i.e., uma equação com derivadas

temporais de primeira ordem e derivadas espaciais de segunda ordem (SEIXAS, 2014).

Outro ponto de interesse é que o spin na teoria quântica não relativista é colocado de forma ad-hoc a partir do experimento de Stern-Gerlach. Em cálculos quantitativos para átomos leves os resultados obtidos a partir da equação não-relativista são condizentes com os dados experimentais, entretanto, para sistemas de átomos pesados as energias totais e estrutura eletrônica apresentam divergências.

Figura 51: Tabela esquemática ilustrando aspectos importantes que diferenciam as equações de Schrödinger, Klein-Gordon e Dirac.

Feature	Schrödinger	Klein-Gordon	Dirac
Equation	$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi$	$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left(\nabla^2 - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi$	$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 \right) \psi$
Energy	Only positive eigenvalues.	Both positive and negative energies are allowed.	Both positive and negative energies are allowed.
Probabilistic interpretation	Viable, since $\rho > 0$.	Not viable since ρ is not positive definite.	Viable, since $\rho > 0$.
Relativity	Not-invariant under Lorentz transformation.	Invariant under Lorentz transformation.	Invariant under Lorentz transformation.
Spin	Does not contain spin.	Does not contain spin.	Contains the spin.

Fonte: Reproduzida de TSUTSUI *et al.* (2025, p.21). © 2025 European Physical Society. All rights reserved.

Nesse contexto, recuperamos resultados condizentes aos experimentais quando introduzimos correções relativísticas a equação de Dirac no limite de baixas energias que é uma equação do tipo Schrödinger. Isso aparece de forma apreciável no que se trata do surgimento da constante de estrutura fina do átomo de hidrogênio.

Lembrando a equação de Dirac (3.117),

$$H|\Psi\rangle = (c\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\alpha} + mc^2\beta)|\Psi\rangle, (.)$$

e levando em conta que as propriedades das matrizes α e β dadas por (3.118) e (3.119), de maneira que

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} |\chi_1\rangle \\ |\chi_2\rangle \\ |\chi_3\rangle \\ |\chi_4\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\phi\rangle \\ |\psi\rangle \end{pmatrix}, (.)$$

onde

$$|\phi\rangle = \begin{pmatrix} |\chi_1\rangle \\ |\chi_2\rangle \end{pmatrix}, \quad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\chi_3\rangle \\ |\chi_4\rangle \end{pmatrix}, (.)$$

de forma que $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ são os biespinores de duas dimensões de $|\Psi\rangle$. A partir da chamada substituição mínima, $H \rightarrow H - U$, obtemos a interação da partícula com o potencial externo U para o conjunto de equações de Dirac acopladas

$$(H - U - mc^2)|\phi\rangle = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})|\psi\rangle, (.)$$

$$(H - U + mc^2)|\psi\rangle = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})|\phi\rangle, (.)$$

No limite de baixas energias os autovalores do Hamiltoniano serão dados por $E + mc^2$ e junto ao desacoplamento das equações de Dirac para $|\psi\rangle$,

$$E|\psi\rangle = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{2m} \left(1 + \frac{E - U}{2mc^2}\right)^{-1} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})|\psi\rangle + V|\psi\rangle, (.)$$

tal que junto da seguinte expansão aproximada e da relação de comutação para $\mathbf{p}$ e U ,

$$\left(1 + \frac{E - U}{2mc^2}\right)^{-1} \approx 1 - \frac{E - U}{2mc^2}$$

$$[\mathbf{p}, U] = -i\hbar\nabla U$$

de forma que substituindo essas relações encontramos

$$E|\psi\rangle = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}|\psi\rangle + U(\mathbf{r})|\psi\rangle - \underbrace{\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}}_{T_{rel}}|\psi\rangle - \overbrace{\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\nabla U \cdot \nabla |\psi\rangle}^{H_{Darwin}} + \underbrace{\frac{\hbar}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla U \times \mathbf{p})}_{H_{ASO}}|\psi\rangle$$

onde os termos T_{rel} , H_{Darwin} e H_{ASO} são a correção da energia cinética, o termo de Darwin relativo ao não confinamento do elétron de forma pontual (MACDONALD, 2020) e o último termo é relativo ao acoplamento spin-órbita decorrente da interação entre o momento magnético eletrônico e o campo magnético gerado pelo movimento do próton relativo ao elétron como vimos na equação (E.10), respectivamente.

Quando tomamos o nosso caso de potencial central usando coordenadas esféricas é possível mostrar que o acoplamento spin-órbita será dado por

$$H_{ASO} = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

que também pode ser escrito na base s_z que pode ser usado em simulações computacionais.

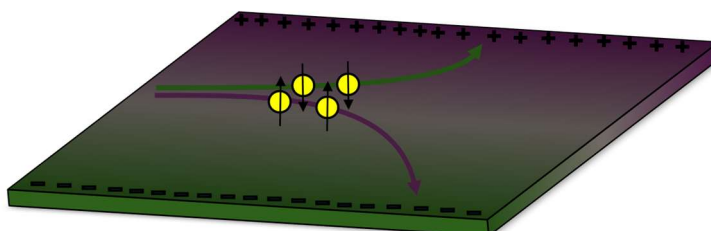
APÊNDICE F - UM TIPO DE EFEITO HALL DE INTERESSE

Efeito Hall de Spin (EHS)

Esse feito foi previsto em 1971 por Dyakonov e Perel (1971a, 1971b) e consistia na ideia de que correntes presentes nas bordas possuem polarização de spin que advém do acúmulo de spins gerados por espalhamentos da corrente elétrica presente no interior do material (bulk) de maneira que esse fenômeno era considerado extrínseco (DYAKONOV, 2012; ROCHA, 2014; BORHER, 2019).

Assim há acumulação de spin nas bordas de um material condutor de corrente com os spins opostos nas bordas opostas, sem a presença de campo magnético perpendicular. Temos então um fluxo de spins perpendicular a corrente, esse fluxo vai do interior as bordas do material, acontecendo o fenômeno de acumulação deles na superfície e esse aspecto sendo limitado pela relaxação de spin.

Figura 52: Ilustração esquemática do efeito Hall de Spin.



Fonte: Elaborado pelo próprio autor.

Ademais, devemos ter uma camada da amostra condutora que contém elétrons de spins orientados, essa camada é chamada de camada de spin e sua espessura se dá pelo comprimento de difusão do spin. Fenomenologicamente o fenômeno pode ser tratado a partir do vetor densidade de spin S e do tensor de densidade de fluxo de spin $q_{\alpha\beta}$.

No ano de 2003 (MURAKAMI; NAGAOSA; ZHANG, 2003) demonstrou-se que a partir do forte acoplamento spin-órbita seria possível gerar o efeito Hall de spin de forma intrínseca, i.e., sem necessitar de acúmulo assimétrico de spins devido a corrente elétrica passando pelo interior do material.

No ano de 2004 Kato et. al. (2004) realizaram a detecção óptica do presente fenômeno em filmes finos de GaAs e InGaAs (porém não pode ser gerado na ausência de elétrons no nível de Fermi – (ONODA; NAGAOSA, 2005; ANDO, 2013).

APÊNDICE G - TEOREMA DE KRAMER

O teorema de Kramer nos diz que cada nível de energia em um sistema que é invariante sob simetria de reversão temporal com spin semi-inteiro ($1/2, 3/2, \dots$) é pelo menos duplamente degenerado (TKACHOV, 2022). E o aspecto vital desse teorema é que é por consequência dele que existem as propriedades de materiais quânticos topológicos.

Se considerarmos que esses dois estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ são relacionados a partir de

$$|+\rangle = \mathbb{T}|-\rangle, \quad (G.1)$$

tal que se a transformação de reversão temporal $\mathbb{T}$ for uma simetria presente no sistema então os estados acima são conectados pela mesma energia. Para ver a prova veja TKACHOV (2022). Aqui provaremos a independência dos estados acima. Precisamos que $|+\rangle$ e $|-\rangle$ sejam ortogonais, i.e., seu produto interno seja zero,

$$\langle + | - \rangle = \langle - | + \rangle = 0, \quad (G.2)$$

sabemos que

$$\langle a | A^\dagger A | b \rangle = \langle a | b \rangle^* = \langle b | a \rangle, \quad (G.3)$$

e que

$$\mathbb{T}^2 = -1 \Rightarrow \mathbb{T}^{-1} = -\mathbb{T}, \quad (G.4)$$

$$\mathbb{T}\mathbb{T}^{-1} = \mathbb{T}^{-1}\mathbb{T} = \mathbb{I}. \quad (G.5)$$

Então, como

$$\begin{aligned} |+\rangle = \mathbb{T}|-\rangle &\Rightarrow (|+\rangle)^* = (\mathbb{T}|-\rangle)^* \Rightarrow \\ &\Rightarrow \langle + | = \langle - | \mathbb{T}^\dagger, \end{aligned} \quad (G.6)$$

porém, fazendo $\mathbb{T}^{-1}$ no estado $|+\rangle$ e usando (G.6),

$$|+\rangle = \mathbb{T}|-\rangle \Rightarrow \mathbb{T}^{-1}|+\rangle = \overbrace{\mathbb{T}\mathbb{T}^{-1}}^{=I}|-\rangle = \mathbb{T}^{-1}|+\rangle = |-\rangle, \quad (G.7)$$

tal que obtemos,

$$(\mathbb{T}^{-1}|+\rangle)^* = (|-\rangle)^* \Rightarrow \langle + | (\mathbb{T}^{-1})^* \Rightarrow \langle - | = -\langle + | \mathbb{T}^\dagger = \langle - | \Rightarrow$$

$$\langle + | \mathbb{T}^\dagger = -\langle - |, \quad (G.8)$$

assim sendo, combinando os resultados anteriores e que $\mathbb{T}^{-1} = -\mathbb{T}$, por fim

$$\langle + | - \rangle = \overbrace{\langle - | \mathbb{T}^\dagger}^{\langle + |} \underbrace{\mathbb{T}^{-1} | + \rangle}_{| - \rangle} = -\langle - | \mathbb{T}^\dagger \mathbb{T} | + \rangle = -(\langle - | + \rangle)^* = -\langle + | - \rangle = 0 \blacksquare. \quad (G.9)$$

APÊNDICE H - TRANSPORTE PARALELO

A teoria do transporte paralelo está intrinsecamente relacionada à teoria da fase de Berry, uma vez que se considera o transporte infinitesimal de um estado de Bloch (SEIXAS, 2014). A evolução de um estado de Bloch em sua vizinhança pode ser escrita como,

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle \rightarrow |u_n(\mathbf{k} + d\mathbf{k})\rangle + \nabla_{\mathbf{k}}|u_n(\mathbf{k})\rangle \cdot d\mathbf{k}, \quad (H.1)$$

onde há tanto componentes paralelas quanto perpendiculares. As componentes perpendiculares ao estado inicial apresentam projeções nulas, não contribuindo, portanto, para o cálculo das propriedades topológicas de interesse. Ao aplicar o projetor,

$$P_{\parallel} = |u_n(\mathbf{k})\rangle\langle u_n(\mathbf{k})|, \quad (H.2)$$

na equação anterior, obtém-se as componentes paralelas,

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle \xrightarrow{P_{\parallel}} |u_n(\mathbf{k})\rangle + |u_n(\mathbf{k})\rangle\langle u_n(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}}|u_n(\mathbf{k})\rangle \cdot d\mathbf{k}, \quad (H.2)$$

onde as variações $|u_n(\mathbf{k})\rangle\langle u_n(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}}|u_n(\mathbf{k})\rangle \cdot d\mathbf{k}$ são chamadas de **transporte paralelo** do estado $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ e constitui uma das bases dos conceitos geométricos e topológicos explorados nesse trabalho.

No contexto dos estados de Bloch ainda é possível escrever o transporte paralelo como

$$|u_n(\mathbf{k})\rangle \xrightarrow{P_{\parallel}} |u_n(\mathbf{k})\rangle + (iA_n(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k})|u_n(\mathbf{k})\rangle, \quad (H.4)$$

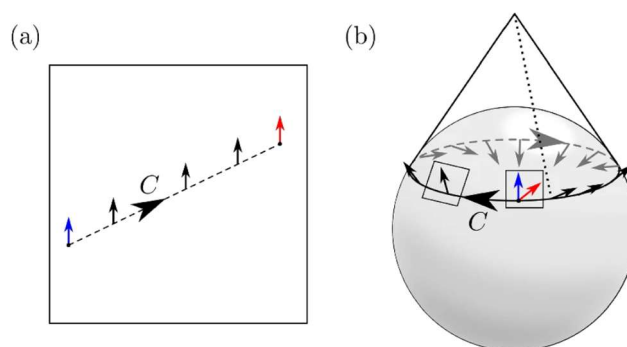
em que $A_n(\mathbf{k})$ é a conexão de Berry. A integração dessa conexão de Berry ao longo de um caminho fechado no espaço de parâmetros fornece a fase de Berry. Essa fase não depende da evolução dinâmica dos estados de Bloch, dependendo apenas do caminho percorrido no espaço de parâmetros, que no caso de sólidos cristalinos é a zona de Brillouin.

Do ponto de vista físico, o análogo clássico da fase de Berry é o **ângulo de Hannay**, que **mede a variação de um vetor tangente a uma superfície curva quando percorre um caminho fechado sobre ela**. Na geometria diferencial esse fenômeno é conhecido como **holonomia**. A fase de Berry pode ser interpretada como

a holonomia da conexão de Berry adquirida ao longo de um processo adiabático e cíclico.

Figura 53: Ilustração de um vetor r sendo transportado paralelamente ao longo de um trajeto C . A seta azul indica o estado inicial e a seta vermelha o estado final. (a)

Transporte paralelo no espaço Euclideano. Os vetores associados a todos os estados intermediários são paralelos um a um. (b) Transporte paralelo ao longo de uma latitude fixa numa superfície esférica. O vetor gira dentro do plano tangencial ao percurso C . O conjunto de todos os planos tangenciais formam um cone na parte de cima da esfera.



Fonte: Adaptado de SPRINKART et al. (2024, p. 690).

APÊNDICE I - TEOREMA DE BLOCH

Como o operador Hamiltoniano H e o operador de translação espacial T_R comutam, $[H, T_R] = 0$, a função de onda ψ é uma autofunção simultânea de H e T_R . Usando a equação de autovalores

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (I.1)$$

$$T_R\psi(\mathbf{r}) = c_R\psi(\mathbf{r}) \quad (I.2)$$

onde c_R é um autovalor de T_R . Entretanto, sabemos que

$$T_R\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (I.3)$$

$$T_{R'}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}'), \quad (I.4)$$

e por conseguinte, para as funções de onda temos,

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = c_R\psi(\mathbf{r}) \quad (I.5)$$

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}') = c_{R'}\psi(\mathbf{r}). \quad (I.6)$$

Pela propriedade de linearidade do operador de translação espacial,

$$T_{R'}T_R = T_{R+R'}. \quad (I.7)$$

É possível escrever então,

$$T_{R+R'}\psi(\mathbf{r}) = c_{R+R'}\psi(\mathbf{r}), \quad (G.8)$$

$$T_{R+R'}\psi(\mathbf{r}) = c_{R+R'}\psi(\mathbf{r}),$$

entretanto, também podemos escrever a equação acima usando (G.7) como

$$\begin{aligned} T_{R+R'}\psi(\mathbf{r}) &= T_{R'}T_R\psi(\mathbf{r}) \\ &\stackrel{(G.2)}{=} T_{R'}c_R\psi(\mathbf{r}) \\ &= c_Rc_{R'}\psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (I.9)$$

Portanto,

$$c_{R+R'} = c_Rc_{R'} \Rightarrow f(R + R') = f(R)f(R'). \quad (I.10)$$

A única função cujo argumento é uma soma e se torna um produto é a exponencial,

$$c_R = e^{-ik \cdot R}. \quad (I.11)$$

APÊNDICE J - ARTIGO DE SUPERCONDUTIVIDADE

Nesse trabalho que estamos desenvolvendo discutimos alguns dos principais pontos da teoria da supercondutividade partindo da construção fenomenológica, trabalhando a descrição microscópica e conectando esses pontos com a teoria contemporânea de supercondutores topológicos.

Iniciamos a discussão com descoberta de Onnes em 1911 sobre a queda da resistividade do mercúrio para zero quando $T < 4\text{ K}$. Junto a isso trabalhamos alguns dos principais marcos históricos como a descoberta do efeito Meissner-Ochsenfeld em 1933, a proposição pelos irmãos London da profundidade de penetração em meados da década de 30. Em 1950 o desenvolvimento da teoria de Ginzburg-Landau para tratar de transições de fase perto da temperatura crítica T_c e eventos mais recentes como as descobertas de supercondutores topológicos.

Na seção de fenomenologia da supercondutividade apresentamos e discutimos a persistência das correntes em materiais supercondutores, o diamagnetismo perfeito associado as equações de London e a expulsão do campo magnético na superfície de amostras supercondutoras a partir de um exemplo unidimensional. Trabalhamos a teoria de Ginzburg-Landau partindo do funcional da energia livre e encontrando o comprimento de coerência, profundidade de penetração e o parâmetro de Ginzburg-Landau que são alguns dos principais resultados dessa teoria.

Na parte das teorias microscópicas desenvolvemos os principais conceitos teóricos que concernem a teoria BCS, trabalhando o problema de Cooper a partir do Hamiltoniano reduzido e da interação atrativa, a transformação de Bogoliubov a fim de obter o espectro de quasipartículas e a equação de gap. Seguimos trabalhando a teoria de Migdal-Eliashberg que incorpora as interações elétron-fônon e o acoplamento forte. Por fim buscamos fazer a conexão dessas teorias aos supercondutores topológicos.