



UnB

Universidade de Brasília

Instituto de Física

Doutorado em Física

Transição de fase topológica e transporte eletrônica
em grafenos e nanofitas zigzag grafeno tensionados

por

Marcos Rafael Guassi

Orientador: Prof. Dr. Qu Fanyao

Brasília - DF - Brasil

30 de abril de 2015

Resumo

Uma transição de fase topológica em campo magnético zero entre o efeito Hall quântico de spin (QSH) e Hall quântico anômalo em nanofitas de grafeno é mostrada na presença de campo de exchange interno (EX), strain uniaxial e efeito de acoplamento spin-órbita intrínseco e Rashba (SOCs). Foi descoberto que a intensidade e direção do strain podem ser utilizadas para se ajustar a intensidade crítica dos SOCs nos quais as transições de fase ocorrem. O campo pseudo-magnético induzido por strain acopla os graus de liberdade de spin através do SOC, aumenta a localização dos portadores nos estados de borda (*edge-states*), estabiliza e pode levar à formação do estado QSH. O SOC-Rashba e EX, por outro lado, quebram a simetria de inversão e a simetria de inversão temporal no grafeno, respectivamente. Valores altos de SOC-Rashba ou EX, entretanto, podem fazer com que o estado QSH seja destruído, produzindo estados quânticos anômalos. Nossos resultados oferecem uma perspectiva promissora da manipulação elétrica, magnética e do strain do efeito QSH, com aplicações potenciais em dispositivos topológicos quânticos dentro do contexto de eletrônica sem dissipação.

Abstract

A zero-field topological quantum phase transition between quantum spin hall (QSH) and quantum anomalous hall states in graphene nanoribbons is reported in the presence of internal exchange potential (EX), uniaxial strain, intrinsic, and Rashba spin-orbit couplings (SOCs). We find that both strength and direction of the strain can be exploited to tune the critical SOC strength at which the phase transition takes place. The pseudomagnetic field induced by the strain couples the spin degrees of freedom through SOC, enhances the carrier localization in edge states, stabilizes and even leads to formation of a QSH state. Rashba-SOC and EX, on the other hand, break inversion and TRS of the graphene, respectively. In the regime of small SOC and EX, they only induce an instability of the QSH state. The large Rashba-SOC or EX, however, can even lead the QSH state to be destroyed, producing the quantum anomalous states. Our results offer a tempting prospect of strain, electric, and magnetic manipulation of the QSH effect, with potential application in topological quantum devices within the context of dissipationless electronics.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer ao meu orientador Qu Fanyao por tornar esse trabalho possível e pelo apoio nas horas difíceis, ao Ginetom pela ajuda valorosa e profundas discussões. Também gostaria de agradecer aos meus pais, pelo grande carinho e grande presença na minha vida. Aos amigos pela boa companhia. E um agradecimento especial à minha esposa Aline que me ajudou muito nesse caminhada e esteve sempre presente.

À CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Lista de figuras

1.1	Representação da hibridização sp^2 no átomo de carbono.	7
1.2	Rede hexagonal do grafeno no espaço direto (a) e no espaço recíproco (b) . . .	8
2.1	Condutor ao qual é aplicado uma corrente elétrica I e um campo magnético na direção vertical \hat{k} . A voltagem Hall V_H é medida por um medidor colocado num sentido transversal à corrente I ligado aos polos do condutor. Figura adaptada de [1].	13
2.2	Resistência Hall e longitudinal em função do campo magnético aplicado H , mostrando o efeito Shubnikov-de Haas (a). Densidade de estados em função da energia (b). Figura adaptada de [2].	18
2.3	Dependência da resistividade longitudinal ρ_{xx} e Hall ρ_{xy} em função do campo magnético H aplicado. Medido por J. Smet, MPI-Stuttgart, figura de [2].	20
2.4	Dependência da resistividade Hall em função do campo magnético H no efeito Hall (a) e no efeito Hall anômalo (b). Figura adaptada de [1].	22
2.5	Efeito Hall no Ni. Dados de [3], figura de [4].	22
2.6	Dependência da resistência Hall ρ_H (ρ_{xy}) (a) e da resistência longitudinal ρ_L (ρ_{xx}) em função do campo magnético aplicado para diferentes valores de pontecial V_g a temperatura de 30mK. Figura de [5].	24
2.7	Estados de borda quiral no efeito Hall quântico e Hall quântico anômalo (a). Estados de bordas helicais do efeito Hall quântico de spin (b). Figura adaptada de [1].	27
4.1	Distância a entre primeiros vizinhos e constante de rede do grafeno (a). Primeiros vizinhos de um sítio A, ligados por vetores \vec{d}_l a sítios B.	38

4.2	Dispersão de energia da 1ªBZ do grafeno. Os cones de Dirac nos pontos K e K' são as regiões próximas aos pontos em que as bandas de condução (superior) e de valência (inferior) se tocam.	39
4.3	Curvas de nível da 1ªBZ do grafeno mostrando a banda de valência (a) e de condução (b).	40
4.4	Perfil da 1ªBZ do grafeno com $k_y = 0$ em (a) e $k_x = 4\pi/3\sqrt{3}$ em (b).	41
4.5	Segundos vizinhos de um sítio no grafeno em (a); vetores \vec{d}_{kj} e \vec{d}_{ik} do hamiltoniano.	44
4.6	1ªBZ do grafeno com parâmetro de acoplamento $\lambda_{so} = 0$ em (a), $\lambda_{so} = 0,03t$ em (b) e $\lambda_{so} = 0,06t$ em (c).	46
4.7	Projeção do eixo $k_x a$ da 1ªBZ do grafeno com parâmetro de acoplamento $\lambda_R = 0$ em (a), $\lambda_R = 0,20t$ em (b) e $\lambda_R = 0,40t$ em (c).	52
4.8	Bandas de valência da 1ªBZ do grafeno com parâmetro de acoplamento $\lambda_R = 0,40t$ mostrando os dois níveis de energia degenerados.	53
4.9	Perfis da 1ªBZ com $k_y = 0$: $\lambda_{ex} = 0$ em (a), $\lambda_{ex} = 0,20t$ em (b) e $\lambda_{ex} = 0,40t$ em (c).	55
5.1	Representação das nanofitas armchair (a) e zigzag (b) que podem ser obtidas do grafeno.	58
5.2	Representação da célula unitária de uma nanofita armchair (a) e primeiros vizinhos de um sítio A (b).	59
5.3	Dispersão de energia para nanofitas armchair com largura (a) $N = 5$, (b) $N = 6$, (c) $N = 7$ e (d) $N = 8$. Todas as escalas de energias são iguais.	63
5.4	Representação da célula unitária de uma nanofita zigzag (a) e primeiros vizinhos de um sítio A (b).	66
5.5	Dispersão de energia para nanofitas zigzag com (a) $N = 5$, (b) $N = 6$ e (c) $N = 7$	70
5.6	Dispersão de energia para nanofitas zigzag com (a) $N = 23$, (b) $N = 24$ e (c) $N = 25$	70
5.7	Dispersão de energia para uma nanofita zigzag com $N=24$, em uma figura ampla em (a) e aproximada em (b). Os estados que formam os estados de borda são as mais internas.	71

5.8	Representação da nomenclatura dos sítios de uma nanofita zigzag usada no cálculo de distribuição eletrônica.	72
5.9	Distribuição eletrônica para uma nanofita com $W=48$ de um <i>edge-state</i> (a) e de um estado do <i>bulk</i> (b).	73
5.10	(a) Dispersão de energia das nanofitas zigzag com $N = 24$ e $\lambda_{so} = 0,05t$ e (b) localização eletrônica dos estados A e B tomada no nível de $E = 0,05t$	77
5.11	Dispersão de energia das nanofitas zigzag com $N = 24$, $\lambda_R = 0,05t$ (a) e $\lambda_R = 0,20t$ (b).	82
5.12	Distribuição eletrônica das nanofitas zigzag com $N = 24$, $\lambda_R = 0,05t$ (a) e $\lambda_R = 0,20t$ (b)	83
5.13	Dispersão de energia (a) e distribuição eletrônica (b) das nanofitas zigzag com $N = 24$ e $\lambda_{ex} = 0,04t$	85
6.1	Representação de uma tensão aplicada no grafeno em uma direção arbitrária	90
6.2	Banda de valência da 1 ^a BZ do grafeno com $\varepsilon = 0.15$ e $\theta = 0$ em (a) e $\theta = \pi/2$ em (b).	93
6.3	Perfil das bandas de valência e condução do grafeno da 1 ^a BZ do grafeno com $\lambda_{so} = 0,06t$ e $\varepsilon = 0,05$ em (a), $\varepsilon = 0,10$ em (b) e $\varepsilon = 0,15$ em (c). Todos os strains aplicados com ângulo $\theta = 0$	98
6.4	Perfil das bandas de valência e condução do grafeno da 1 ^a BZ do grafeno com $\lambda_{so} = 0,06t$ e $\varepsilon = 0,05$ em (a), $\varepsilon = 0,10$ em (b) e $\varepsilon = 0,15$ em (c). Todos os strains aplicados com ângulo $\theta = \pi/2$	98
6.5	Perfil das bandas de valência e condução do grafeno da 1 ^a BZ do grafeno com $\lambda_R = 0,20t$ e $\varepsilon = 0,05$ em (a), $\varepsilon = 0,10$ em (b) e $\varepsilon = 0,15$ em (c). Todos os strains aplicados com ângulo $\theta = 0$	105
6.6	Perfil das bandas de valência e condução do grafeno da 1 ^a BZ do grafeno com $\lambda_R = 0,20t$ e $\varepsilon = 0,05$ em (a), $\varepsilon = 0,10$ em (b) e $\varepsilon = 0,15$ em (c). Todos os strains aplicados com ângulo $\theta = \pi/2$	105
6.7	Dispersão de energia da primeira zona de Brillouin de uma nanofita zigzag com $N = 24$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); para ângulos de aplicação de strain $\theta = 0$	107

- 6.8 Distribuição eletrônica de uma nanofita zigzag com $N = 24$ (ou $W = 48$) e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = 0$ 108
- 6.9 Dispersão de energia da primeira zona de Brillouin de uma nanofita zigzag com $N = 24$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = \pi/2$ 110
- 6.10 Distribuição eletrônica de uma nanofita zigzag com $N = 24$ (ou $W = 48$) e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = \pi/2$ 110
- 6.11 Dispersão de energia da primeira zona de Brillouin de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_{so} = 0,05t$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d) para $\theta = 0$; e $\varepsilon = 0$ em (e), $\varepsilon = 0,05$ em (f), $\varepsilon = 0,10$ em (g) e $\varepsilon = 0,15$ em (h) para $\theta = \pi/2$ 114
- 6.12 Dispersão de energia da primeira zona de Brillouin de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_{so} = 0,05t$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = \pi/2$ 115
- 6.13 Distribuição eletrônica dos *edge-states* de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_{so} = 0,05t$ e $\varepsilon = 0,05$ aplicado na direção $\theta = 0$ em (a) e $\theta = \pi/2$ em (b). . . 115
- 6.14 Dispersão de energia da 1^aBZ de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_R = 0,20t$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = 0$ 120
- 6.15 Dispersão de energia da 1^aBZ de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_R = 0,20t$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = \pi/2$ 121
- 7.1 Nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_{ex} = 0,20t$ e $\lambda_{so} = 0,06t$, com sua dispersão de energia (a), distribuição eletrônica de seus *edge-states* (b) e suas direções de propagação (c). 125

- 7.2 Representação esquemática de um dispositivo de nanofita zigzag, depositado sobre SiO_2 . A corrente elétrica é controlada entre S e D usando o potencial (V_{SD}). O strain uniaxial é aplicado ao longo das duas direções, como indicados pelas setas. O parâmetro de Rashba pode ser alterado pelas voltagens superior (V_T) e inferior (V_G). 127
- 7.3 Posições médias $\langle x \rangle$ dos *edge-states* sob influência de strain ε , sendo $\lambda_{ex} = 0,15t$ e $\lambda_{so} = 0,03t$ em (a), $\lambda_{so} = 0,04t$ em (b), $\lambda_{so} = 0,05t$ em (c) e $\lambda_{so} = 0,06t$ em (d). 128
- 7.4 Dispersão de energia de nanofitas zigzag de $N = 24$, com $\lambda_{ex} = 0,15t$ em todos os casos e $\lambda_{so} = 0,03t$ em (a); $\lambda_{so} = 0,04t$, $\varepsilon = -0,10$ e $\theta = 0$ em (b), $\lambda_{so} = 0,04t$, $\varepsilon = 0,10$ e $\theta = 0$ em (c) e $\lambda_{so} = 0,06t$ em (d). 129
- 7.5 Posições médias $\langle x \rangle$ dos *edge-states* sob influência de strain ε , sendo $\lambda_{ex} = 0,20t$ e $\lambda_{so} = 0,04t$ em (a), $\lambda_{so} = 0,05t$ em (b), $\lambda_{so} = 0,06t$ em (c). 130
- 7.6 Estrutura de banda de uma nanofita zigzag com termos de spin-órbita intrínseco e Rashba (a), spin-órbita intrínseco e campo de exchange (b), spin-órbita Rashba e campo de exchange (c), spin-órbita intrínseco e Rashba e campo de exchange (d). O nível de Fermi é tomado como acima de zero, como indicado pela linha horizontal segmentada e, portanto, possui quatro interseções com as bandas de condução. Isso dá origem a quatro correntes nas bordas das nanofitas. Os parâmetros a seguir foram usados: (a) $\lambda_{so} = 0,06t$, $\lambda_R = 0,20t$; (b) $\lambda_{so} = 0,06t$, $M = 0,20t$; (c) $\lambda_R = 0,20t$, $\lambda_{ex} = 0,20t$; (d) $\lambda_{so} = 0,06t$, $\lambda_R = 0,20t$ e $M = 0,20t$ para a nanofita com largura $W = 48$. As setas indicam as componentes principais de spin. 131
- 7.7 Espectro de energia de uma nanofita zigzag com $W = 48$, $\lambda_R = 0,20t$, $\lambda_{ex} = 0,20t$, $\varepsilon = 0,10$ e $\theta = 0$, para (a) $\lambda_{so} = 0,035t$ e (d) $\lambda_{so} = 0,055t$, respectivamente. O nível de Fermi $E = 0,05t$ corresponde às quatro diferentes *edge states*, como indicado por A, B, C e D. A distribuição de probabilidade correspondentes $|\psi|^2$ através da largura da nanofita, e diagramas da distribuição das correntes são mostrados no painel do meio e da direita, respectivamente. A direção da seta indica o fluxo de corrente. 132

- 7.8 (a) Posições médias $\langle x \rangle$ das edge states versus λ_{so} numa nanofita zigzag sujeita a strain com $\varepsilon = 0, 10$ e $\theta = 0$. (b) $\langle x \rangle$ como função do strain com $\theta = 0$ para $\lambda_{so} = 0.05t$. $W = 48$, $\lambda_R = 0, 20t$ e $\lambda_{ex} = 0, 20t$ foram usados nos cálculos. O eixo vertical é o módulo da velocidade de Fermi V_F . As setas apontam na direção da velocidade das bandas e seus comprimentos indicam as magnitudes de V_F 134
- 7.9 Diagramas de fase (strain vs spin-órbita intrínseco) de uma nanofita com $W = 48$, $\lambda_R = 0, 20t$, $\lambda_{ex} = 0, 20t$, caracterizada pela diferença no valor da posição esperado entre A e C, definido como $\langle x \rangle_{AC} = \langle x \rangle_C - \langle x \rangle_A$, para $\theta = 0$ (a) e $\theta = \pi/2$ (b), respectivamente. 135
- 8.1 Esquema de um dispositivo eletrônico conectado a dois contados e submetidos a um potencial V. 138
- 8.2 O acoplamento de dois eletrodos semi-infinitos com o condutor pode ser escrito como um hamiltoniano efetivo, dado por suas auto-energias $\Sigma_{L,R}$. [6] . . 143
- 8.3 Esquema de um condutor conectado a dois eletrodos, na esquerda e direita, dividido em N fatias e numeradas $n = 1, \dots, N$. As fatias com números menores a $n = 1$ representam o eletrodo da esquerda e as fatias com números maiores a $n = N$ representam o eletrodo da direita. [6] 144
- 8.4 Estrutura eletrônica de nanofitas zigzag sem strain com $N = 26$ (a) e armchair com $N = 47$ (d). Os painéis menores em (a) e (d) mostram as nanofitas correspondentes com strain aplicado com módulo de strain $\varepsilon = 0, 1$, nas direções $\theta = 0$ (vermelho) e $\theta = \pi/2$ (verde). (b)-(c) e (e)-(f) correspondem à densidade de estados e à condutância total associada com os painéis (a) e (d), respectivamente. O painel menor em (e) mostra que a densidade de estados próximo ao nível de Fermi para um dispositivo de nanofita armchair com strain é igual a zero. 148
- 8.5 Efeitos de strain na condutância resolvida de spin $G_{\sigma\sigma'}$ de nanofitas zigzag com $N = 26$ (a)-(c) e armchair com $N = 47$ (e)-(g). Os painéis (d) e (h) mostram a condutância total. Os parâmetros usados em todos os painéis são $\lambda_R = 0, 1t$, $\lambda_{so} = 0$ e $\lambda_{ex} = 0, 2t$ 150

- 8.6 (a) Perfis de condutância $G_{\uparrow\uparrow}$ e $G_{\uparrow\downarrow}$ para nanofita zigzag com $N = 26$ (a)-(b) e armchair com $N = 47$ (c)-(d) em função de λ_R sujeito a diferentes configurações de strain. O painel (e) mostra o *gap* da banda Δ_g de uma nanofita armchair em função do parâmetro de strain ε para $\theta = 0$ e $\theta = \pi/2$, respectivamente. Em (f) mostra-se o Δ_g de uma nanofita armchair em função da direção de strain para o valor fixo de strain $\varepsilon = 0,05$ 152

Índice

Lista de figuras	viii
Introdução	1
1 Grafeno	5
1.1 Átomos de carbono e hibridização sp^2	7
1.2 Rede cristalina do grafeno	8
2 O efeito Hall e seus subtipos	11
2.1 O efeito Hall clássico	12
2.2 O efeito Shubnikov-de Haas	17
2.3 Efeito Hall quântico	19
2.4 Efeito Hall anômalo	21
2.5 Efeito Hall quântico anômalo	24
2.6 Efeito Hall quântico de spin	26
3 O método de tight-binding	29
3.1 O modelo de primeiros vizinhos do tight-binding	29
3.2 Os orbitais de Löwdin	32
4 O modelo de tight-binding aplicado ao grafeno	35
4.1 Tight-binding de primeiros vizinhos	35
4.2 Acoplamento de spin-órbita intrínseco	42
4.3 Acoplamento de spin-órbita Rashba	48
4.4 Campo de exchange	54

5	O modelo de tight-binding aplicado às nanofitas	57
5.1	Tipos de nanofitas de grafeno	57
5.2	Nanofitas de grafeno com fronteiras armchair	58
5.3	Nanofitas de grafeno com fronteiras zigzag	65
5.3.1	Cálculo da distribuição eletrônica	72
5.4	Acoplamento de spin-órbita intrínseco nas nanofitas zigzag	74
5.5	Acoplamento de spin-órbita Rashba nas nanofitas zigzag	78
5.6	Campo de exchange nas nanofitas zigzag	84
6	Strain uniaxial elástico	87
6.1	Teoria para uma deformação arbitrária	87
6.2	Strain uniaxial aplicado ao grafeno	89
6.3	Strain uniaxial aplicado ao grafeno com acoplamento spin-órbita intrínseco	94
6.4	Strain uniaxial aplicado ao grafeno com acoplamento spin-órbita Rashba	100
6.5	Strain uniaxial aplicado à nanofita zigzag	106
6.6	Strain uniaxial com spin-órbita intrínseco nas nanofitas zigzag	111
6.7	Strain uniaxial com spin-órbita Rashba nas nanofitas zigzag	116
7	Transição de fase topológica na nanofita	123
7.1	Transições de fase nas nanofitas zigzag	124
7.2	Efeito do strain sobre transição de fase topológica	127
8	Transporte eletrônico em grafeno com strain	137
8.1	O formalismo de Landauer-Büttiker	137
8.2	Formalismo das funções de Green	140
8.3	Descrição das auto-energias dos eletrodos	141
8.4	Método Recursivo das Funções de Green	142
8.4.1	Funções de Green da esquerda	144
8.4.2	Funções de Green da direita	146
8.4.3	Função de Green Total	146
8.5	Resultados	147

<i>ÍNDICE</i>	xix
Conclusão	153
Referência Bibliográfica	155
A	167
B	175
C	183

Introdução

Em 2004, Novoselov e Geim [7] mostraram que não só que é possível se esfoliar um sólido de van der Waals de um átomo ou uma camada simples poliédrica de duas dimensões, mas também que esses materiais podem exibir propriedades físicas únicas e fascinantes. Dentre os materiais bidimensionais, o grafeno possui alta qualidade cristalina e eletrônica. A dispersão linear no ponto K do grafeno dá origem a novos fenômenos, como o efeito Hall quântico anômalo em temperatura ambiente, que levaram ao novo paradigma da física de matéria condensada 'relativística', em que fenômenos quânticos relativísticos, alguns dos quais não podem ser observados em física de alta energia, podem ser agora reproduzidos e testados em laboratório e também possibilitou uma nova categoria de física de 'Fermi-Dirac'. Além disso, como o grafeno de uma folha é inteiramente sua área de superfície, suas propriedades e reatividade depende profundamente do substrato, seu ambiente eletrônico local e deformações mecânicas. Mais interessante ainda, materiais bidimensionais de uma, poucas ou muitas camadas apresentam muitas aplicações em transistores de efeito de campo, spintrônica e valetrônica, termoeletricidade e isolantes topológicos, além de várias outras aplicações.

Nos últimos dez anos, a pesquisa em grafeno produziu muitos métodos para síntese, transferência, detecção, caracterização e propriedades manipuláveis do grafeno. Novos métodos de síntese incluindo aproximações topotática, solvotérmica e abordagens epitaxiais de superfície UHV desencadearam o potencial de criar novos sólidos de van der Waals e materiais de uma camada de espessura.

Novas classes da matéria, como o estado Hall quântico de spin (QSH) e Hall quântico anômalo (QAH), foram preditos teoricamente [8, 9] e experimentalmente [5] observados em isolantes topológicos, em poços quânticos de $Hg - Te - CdTe$ [10, 11], em grafeno

[12, 13] e sistemas além do grafeno: siliceno, germânio bidimensional e metais de transição dicalcogênicos (TMDCs) [14, 15]. Ambos estados, QSH e QAH possuem estados de borda protegidos topologicamente, em que o retroespalhamento do elétron é proibido, oferecendo uma aplicação potencial para dispositivos eletrônicos transportar correntes sem dissipação. No entanto, os estados QSH e QAH são essencialmente estados muito diferentes da matéria. O estado QSH é caracterizado por um *gap* totalmente isolante no *bulk* e estados de borda helicais e sem *gap* em que spin opostos se propagam em direções contrárias em cada borda, protegidos pela simetria de inversão temporal (TRS). No caso do QAH, os estados de borda helicais sem *gap* são substituídos por estados de borda quirais sem *gap*, em que um dos canais de spin é suprimido, por causa da quebra da TRS. Portanto, para se realizar a transição de fase topológica (QPT) do estado QSH para o estado QAH, o que é necessário é a aplicação de uma perturbação que possa quebrar a TRS. Para alcançar esse objetivo, um campo magnético externo é uma solução potencial. Do ponto de vista de aplicação, entretanto, um campo de exchange interno (EX) o qual faz com que a banda de spin majoritária seja completamente preenchida enquanto a banda de spin minoritária se mantenha vazia, provê uma alternativa mais atraente. Como conhecido, o campo pseudo-magnético (BS) leva a quantização de Landau e os estados de borda circulam em direções opostas. Então, sem quebrar a TRS, o strain pode induzir um *gap* no *bulk* e bordas helicais sem *gap*. Portanto, strain, EX e acoplamentos spin-órbita (SOC) podem ser usados para se produzir uma QPT. Isto nos motivou a propor uma maneira notável na qual a intensidade do SOC, strain uniaxial mecânico e EX, ao invés de um campo magnético externo, são utilizados para se obter essa QPT nas nanofitas de grafeno.

Para se encontrar as estruturas eletrônicas dos sistemas propostos foram feitos cálculos analíticos usando-se o método de *tight-binding* para se obter seu hamiltoniano. Cada matriz encontrada, então, foi diagonalizada em FORTRAN 90, através do compilador gfortran e utilizando-se a subrotina LAPACK, que responde com autovalores e autovetores. Os autovalores correspondem às bandas de energia e os autovetores foram usados para se calcular a distribuição eletrônica. As figuras obtidas foram comparadas com as de artigos já publicados na área de outros autores e alguns dos resultados numéricos em comum foram confrontados com os gerados por outros métodos, mostrando igualdade até a oitava casa decimal. A pre-

cisão total do programa foi limitada pela precisão dos parâmetros experimentais inseridos, como o fator de *hopping* e distância interatômica entre os átomos de carbono, apresentados no texto principal. Os gráficos foram feitos usando o programa GNUPLOT 4.6.

Este trabalho está organizado da seguinte maneira: no primeiro capítulo apresentam-se as principais características cristalinas do grafeno; no capítulo dois é mostrado um resumo dos tipos mais relevantes de efeito Hall, a partir de uma perspectiva histórica e científica. O capítulo três é um resumo do método de *tight-binding*, utilizado no cálculo da estruturas de bandas de energia e que foi aplicado ao grafeno, no capítulo quatro, e às nanofitas de carbono, no capítulo cinco. Até esse capítulo, os resultados apresentados já eram previamente conhecidos através de trabalhos publicados anteriormente por outros autores citados ao longo do texto. No capítulo seis, uma revisão sobre teoria de strain uniaxial é feita e os cálculos apresentados representam contribuições dadas pelo autor deste trabalho, que foram usados como base para obtenção dos resultados apresentados no artigo [16, 17], e no artigo [12] que compõe o capítulo oito.

Capítulo 1

Grafeno

Desde a publicação de um trabalho de Landau e Peierls [13, 18], se pensou que os materiais bidimensionais eram impossíveis de serem produzidos, pois seriam termodinamicamente instáveis. Essa instabilidade seria devido às flutuações térmicas que gerariam deslocamentos atômicos comparáveis às distâncias interatômicas. Em filmes finos a temperatura de fusão diminui conforme se diminui sua espessura e estes se tornam instáveis, segregando-se em ilhas ou decompondo-se a espessuras de, tipicamente, dezenas de camadas atômicas [19, 20].

Ao contrário das expectativas criadas com os estudos teóricos, em 2004 [7], mostrou-se que era possível se estabilizar um material com somente um átomo de espessura, o *grafeno*. Essa descoberta foi tão importante que os seus autores, Andre K. Geim e Konstantin S. Novoselov ganharam o prêmio Nobel de Física em 2010. O grafeno foi obtido a partir da esfoliação de uma folha de grafite, retirando-se camadas atômicas até que se obtivesse o material final. Outras técnicas para crescimento do grafeno foram desenvolvidas e normalmente se faz deposição sobre materiais como carboneto de silício hidrogenado, cobre, cobalto e o ouro. [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29]

Os sistemas de grafite também foram largamente estudados [30, 31, 32] e suas propriedades eletrônicas usadas para descrever teoricamente outros materiais baseados em carbono, como o fulereno [33] e os nanotubos de carbono [34], que já haviam sido obtidos em laboratório antes de 2004. Esses elementos chamaram muita atenção devido às suas propriedades eletrônicas e mecânicas bem peculiares, como por exemplo, alta resistência à tensão no caso dos nanotubos, estrutura eletrônica sintonizável conforme a quiralidade, raio e alta

condutância térmica. Um novo tipo de derivado do grafeno surgiu após 2004: a nanofita de carbono [35], nas quais algumas propriedades eletrônicas se modificavam e poderiam ser controladas. Essas propriedades dependem diretamente do tipo de recorte que se faz no grafeno, podendo ser recortes mais simples, denominados de zigzag e armchair ou sendo modelados de forma específica, como em triângulos, para se formar pontos quânticos [36, 37] ou para aplicações em dispositivos eletrônicos, por exemplo com formatos de Z [38]. Um dos desafios experimentais nesses materiais é obter uma borda de alta qualidade, pois as propriedades eletrônicas desses sistemas são sensíveis a modificações nas bordas [35, 39, 40].

Os interesses nos materiais bidimensionais vem desde o século XIX, principalmente por suas propriedades de transporte eletrônico, quando da descoberta do efeito Hall. E até a obtenção do grafeno muitos outros estudos teóricos foram desenvolvidos nesse sentido, como o trabalho de Haldane, em 1988, quando foi proposto que um outro tipo de efeito Hall (o efeito Hall quântico anômalo), poderia ser observado em um cristal bidimensional com rede hexagonal [8]. Mas pensando-se na integração com a eletrônica atual e na facilidade de produção em escala industrial de dispositivos [41], outros cristais bidimensionais são estudados hoje em dia, como o siliceno, germaneno (mono camada do germânio), nitrito de Bório e os dicalcogenetos de metais de transição. O siliceno, especificamente, é obtido do silício, que pertence à mesma família do carbono e apresenta propriedades eletrônicas similares às do grafeno [42].

1.1 Átomos de carbono e hibridização sp^2

Os átomos de carbono, únicos constituintes do grafeno, possuem seis elétrons distribuídos nos orbitais atômicos $1s^2$, $2s^2$ e $2p^2$. Os elétrons do orbital $1s^2$ são fortemente ligados ao núcleo devido à forte atração eletrostática entre prótons e elétrons. Os outros quatro elétrons são conhecidos como elétrons de valência e suas ligações eletrostáticas com o núcleo são mais fracas. Na fase cristalina os elétrons de valência dão origem aos orbitais $2s$, $2p_x, 2p_y$ e $2p_z$ mas como não há diferença de energia entre os níveis $2s$ e $2p$, as funções de onda desses quatro elétrons podem se sobrepor facilmente, num processo chamado hibridização [43]. No grafeno, esse processo ocorre entre um elétron no orbital $2s$ e dois elétrons no

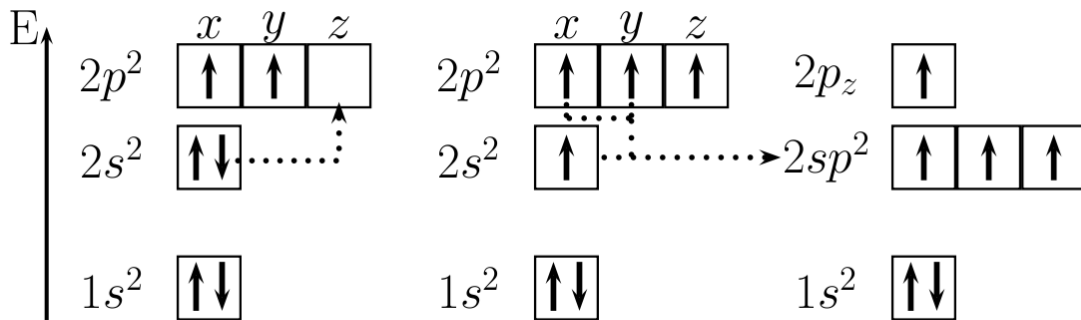


Figura 1.1: Representação da hibridização sp^2 no átomo de carbono. Figura de [44].

orbital $2p$ dando origem a hibridização chamada de sp^2 , como esquematizado na figura 1.1. Assim, três estados se mantêm no plano x-y com um ângulo entre eles de 120° , formando ligações σ com os elétrons do átomo vizinho e dando origem à rede hexagonal do grafeno, figura 1.2(a). As ligações do tipo σ são fortes e uma consequência disso é a alta resistência do grafeno ao stress físico [45, 46]. O outro elétron fica alinhado na direção z, no orbital $2p_z$, num estado chamado π , que possui ligação mais fraca do que os átomos nos orbitais σ . Dessa forma, esse elétron pode saltar facilmente para átomos vizinhos, sendo o único que apresenta relevância nas propriedades de transporte eletrônico no grafeno. Por isso, considera-se apenas a contribuição de um elétron por átomo de carbono nos cálculos das propriedades eletrônicas do grafeno.

A interação eletrônica dos elétrons nos orbitais p_z de duas ou mais folhas de grafeno

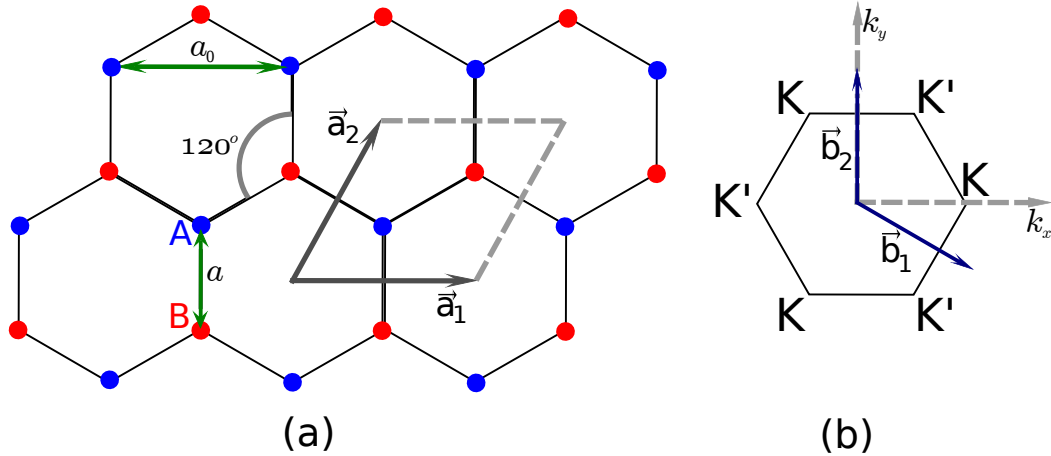


Figura 1.2: Rede cristalina do grafeno. São mostradas as ligações σ entre os elétrons a um ângulo de 120° em (a). Em (b) é mostrado o espaço recíproco com os pontos não-equivalentes K e K' e os vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2 .

empilhadas é baixa comparada à interação dos elétrons pertencentes a uma mesma folha, uma vez que a distância entre as folhas é de $3,35 \text{ \AA}$, muito maior do que a distância entre os átomos mais próximos que pertencem a mesma folha, que é $1,42 \text{ \AA}$. Por esse motivo o grafeno foi usado, antes mesmo de sua síntetização no estudo teórico das propriedades eletrônicas do grafite.

1.2 Rede cristalina do grafeno

A disposição atômica do grafeno forma uma estrutura hexagonal. No entanto, essa rede não forma uma rede de Bravais [47] e de um ponto de vista cristalográfico pode ser descrita por uma rede triangular com dois átomos por célula unitária, que pode ser visto na figura 1.2. Esses átomos são equivalentes entre si através de uma rotação de 180° , e são identificados como A e B, formando uma rede unitária romboide definida no espaço real pelos vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 .

$$\vec{a}_1 = \sqrt{3}a\hat{i}, \quad (1.1)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{i} + \frac{3}{2}a\hat{j} \quad (1.2)$$

sendo $a = 1,42 \text{ \AA}$, como já citado, a distância entre os átomos de carbono mais próximos e $a_0 = \sqrt{3}a = 2,46 \text{ \AA}$, a constante de rede.

A rede recíproca também é descrita por uma rede triangular, figura 1.2(b). Os vetores de rede são

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

$$\vec{b}_2 = \frac{4\pi}{3a}\hat{j} \quad (1.4)$$

A primeira zona de Brillouin (1^{a} BZ) também é hexagonal e é mostrada na figura 1.2(b). Apesar das seis arestas da zona de Brillouin, somente duas delas são não equivalentes, pois a partir de uma translação do tipo $n\vec{b}_1 + m\vec{b}_2$, com n e m inteiros, pode se obter as outras. Esses pontos são os pontos K e K' .

Capítulo 2

O efeito Hall e seus subtipos

O efeito Hall, hoje também chamado de efeito Hall clássico foi uma descoberta do físico E. H. Hall, em 1879 [48]. Hall mostrou que uma corrente transversal surge em uma placa condutora sob a influência de campo magnético à qual é aplicada uma diferença de potencial longitudinalmente em suas extremidades. Esse efeito possibilitou o cálculo da mobilidade eletrônica e abriu as portas para uma nova área na física: o estudo de transporte eletrônico em sistemas condutores.

Após a descoberta do efeito Hall, E. H. Hall percebeu que esse desvio nos elétrons causados pelo campo magnético externo era dez vezes maior em um material ferromagnético em comparação com um condutor não magnético e que mesmo após o campo magnético ser retirado desse material, uma voltagem transversal (voltagem Hall) ainda era medida. Surgiu, então, a primeira observação do efeito Hall sem campo magnético, que ficou conhecido como efeito Hall anômalo.

Alguns anos mais tarde, Shubnikov e de Haas notaram algumas características especiais do efeito Hall nos casos em que o campo magnético aplicado era muito forte. Teoricamente e quase ao mesmo tempo, Lev D. Landau percebeu que esses resultados eram esperados e que as órbitas formadas pelas trajetórias eletrônicas na superfície do condutor formavam níveis quantizados, se o campo externo fosse suficientemente forte e a mobilidade eletrônica alta. Esses níveis ficaram conhecidos como níveis de Landau.

Um outro tipo de efeito Hall ainda mais surpreendente foi descoberto em 1980 por Klitzing, Dorda e Pepper [49], sendo também uma manifestação da mecânica quântica nas pro-

priedades de transporte em sistemas bidimensionais. A esse efeito foi dado o nome de efeito Hall quântico inteiro (*integer quantum Hall effect*). Sua descoberta foi tão importante que rendeu a Klaus von Klitzing o prêmio Nobel de 1985.

Três anos após a descoberta do efeito Hall quântico inteiro, Tsui, Stömer e Gossard descobriram um outro tipo de efeito Hall em gases de elétrons bidimensionais com alta mobilidade: o efeito Hall quântico fracionário (*fractional quantum Hall effect*). Nesse efeito, a quantização da resistência Hall não se dá para números inteiros, mas sim em números fracionários [50]. Essa descoberta também conferiu a seus descobridores com o prêmio Nobel, em 1998.

Nos últimos anos, vários outros tipos de efeito Hall têm sido descobertos, seja através da realização de novos materiais em laboratório, como no caso do efeito Hall relativístico no grafeno, ou através da busca por tipos de efeito Hall que não necessitem de campos magnéticos para serem observados caso do efeito Hall quântico de spin.

Neste capítulo será feita uma introdução ao efeito Hall clássico e anômalo, definindo-se suas principais características. Depois será visto o efeito Shubnikov e de Haas, em que se define o cálculo da densidade de estados eletrônicos e o efeito Hall anômalo. O efeito Hall quântico inteiro e fracionário serão vistos na seção posterior. Por fim, serão discutidos os efeitos Hall quântico anômalo e Hall quântico de spin.

2.1 O efeito Hall clássico

Na tentativa de determinar se a força devido a um campo magnético sobre uma corrente elétrica em um fio era exercida sobre todo o fio ou somente sobre os elétrons que se moviam sobre ele, E. H. Hall em 1879, concebeu um experimento para medir o aumento da resistência que deveria ocorrer. Seu argumento era que ‘se a corrente de eletricidade em um condutor fixo é atraída por um ímã, a corrente deve ser atraída para um dos lados do fio, e portanto a resistência medida deve ser aumentada’. Como essa medida não foi bem sucedida e o modelo para explicar esse resultado nulo só apareceu posteriormente no modelo de Drude, Hall pressupôs que o efeito poderia ser verificado de outra maneira, pois o acúmulo de cargas elétricas em um lado do condutor deveria criar um stress, dando origem a uma voltagem transversal. Essa medida foi bem sucedida e o efeito descoberto ganhou seu nome, como

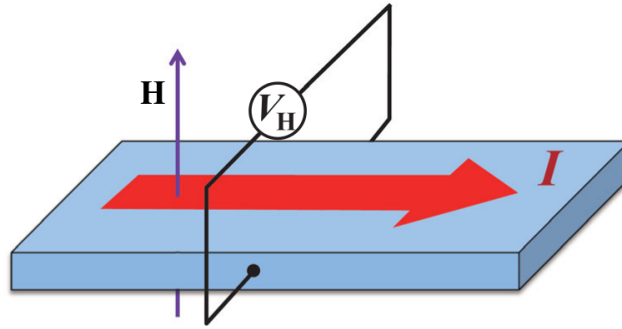


Figura 2.1: Condutor ao qual é aplicado uma corrente elétrica I e um campo magnético na direção vertical \hat{k} . A tensão Hall V_H é medida por um medidor colocado num sentido transversal à corrente I ligado aos polos do condutor. Figura adaptada de [1].

homenagem. A tensão transversal passou a ser conhecida como tensão Hall.

O experimento realizado por Hall consiste em se aplicar uma corrente elétrica em uma placa através de uma direção (nesse caso, a direção x), como na figura 2.1. A corrente possui densidade J_x e gera um campo elétrico E_x através dos terminais da placa. Um campo magnético \vec{H} é aplicado, em direção paralela à positiva do eixo z , o que faz surgir uma força de Lorentz sobre os elétrons:

$$F_L = -\frac{e}{c}\vec{v} \times \vec{H}, \quad (2.1)$$

sendo \vec{v} a velocidade de deriva dos elétrons, oposta à direção da corrente elétrica e portanto com direção v_x . A força resultante faz com que os elétrons se desviem em direção a uma das bordas da placa condutora. Considerando as direções do campo magnético, da velocidade de deriva e o sinal da força de Lorentz, conclui-se que os elétrons são desviados na direção negativa do eixo y . O acúmulo de cargas negativas nessa borda da placa leva a uma concentração de cargas positivas na borda oposta. Essa configuração gera um campo elétrico transversão E_y , também conhecido como campo Hall, que balanceia a força de Lorentz e faz com que a corrente siga somente na direção x .

A partir das medidas desse sistema, duas quantidades importantes surgem: a magnetorresistência transversal e o coeficiente Hall. A primeira foi definida como

$$\rho(H) = \frac{E_x}{J_x}, \quad (2.2)$$

que é a razão entre o campo elétrico ao longo do fio e a densidade de corrente (e que Hall descobriu ser independente do campo). A segunda, é dada por:

$$R_H = \frac{E_y}{J_x H}, \quad (2.3)$$

que é o fator de proporcionalidade entre o campo Hall E_y e o produto da densidade de corrente J_x e o campo magnético. Essa proporcionalidade é esperada, uma vez que em equilíbrio o campo Hall balanceia a força de Lorentz, fazendo com que somente haja corrente na direção x .

Para calcular os valores da magnetorresistência e do coeficiente Hall, considera-se a força eletromagnética que age sobre um elétron:

$$\vec{F} = -e \left(\vec{E} + \vec{v} \times \frac{\vec{H}}{c} \right). \quad (2.4)$$

Como essa força depende da velocidade, possui um valor diferente para cada elétron. Portanto, essa expressão equivale a uma média sobre as forças por elétron. Escrevendo essa expressão para os momentos dos elétrons, tem-se [47, 2]

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

em que o último termo representa os elétrons que sofrem espalhamento com tempo de relaxação τ . Como correntes estacionárias são independentes do tempo,

$$0 = -eE_x - \omega_c p_y - \frac{p_x}{\tau}, \quad (2.6)$$

$$0 = -eE_y - \omega_c p_x - \frac{p_y}{\tau}, \quad (2.7)$$

sendo

$$\omega_c = \frac{eH}{mc}, \quad (2.8)$$

a frequência cíclotron, que caracteriza o movimento ciclotrônico de partículas carregadas em campos magnéticos. Multiplicando todos os termos a equação 2.6 por $-n\mu$, em que define-se

$$\mu = e\tau/m \quad (2.9)$$

como a mobilidade das partículas. Assim,

$$0 = \left(\frac{ne^2\tau}{m} \right) E_x + \left(\frac{ne\tau}{m} \right) \omega_c p_y + \left(\frac{ne\tau}{m} \right) \frac{p_x}{\tau}. \quad (2.10)$$

Dessa equação, nota-se que o primeiro termo do lado direito é $\sigma_0 E_x$, pois o termo entre parênteses é a condutividade elétrica σ_0 de Drude. No segundo e terceiro termos, usa-se a expressão da densidade de corrente

$$\vec{J} = -en \frac{\vec{p}}{m}, \quad (2.11)$$

para se escrever

$$\sigma_0 E_x = \omega_c \tau J_y + J_x. \quad (2.12)$$

Uma solução análoga pode ser desenvolvida para a equação 2.7, resultando em:

$$\sigma_0 E_y = -\omega_c \tau J_x + J_y. \quad (2.13)$$

O efeito Hall em regime estacionário não possui uma corrente transversal, na direção y . Assim, $J_y = 0$ e a equação 2.13 dá a expressão para o campo Hall:

$$E_y = - \left(\frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} \right) J_x = - \left(\frac{H}{nec} \right) J_x. \quad (2.14)$$

Comparando essa expressão com a dada para o coeficiente Hall na equação 2.3, obtém-se:

$$R_H = -\frac{1}{nec}. \quad (2.15)$$

O coeficiente Hall, portanto, só depende da densidade dos portadores de carga e não mostra dependência de outros parâmetros do metal.

As resistividades podem ser obtidas da relação $\vec{E} = \rho \vec{J}$ ao se usar as equações 2.12 e 2.13. A resistividade longitudinal e a resistividade Hall podem ser expressas na forma matricial:

$$\rho = \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

em que os termos fora da diagonal principal são os que representam a resistividade Hall (ρ_H). Então,

$$\rho_H = \frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} = \frac{eH}{mc} \tau \times \frac{m}{ne^2 \tau} = \frac{H}{en}. \quad (2.17)$$

Como a condutividade é o inverso da resistividade, a matriz da condutividade é obtida se invertendo a matriz da resistividade:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_L & -\sigma_H \\ \sigma_H & \sigma_L \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

em que

$$\sigma_L = \frac{\sigma_0}{(1 + \omega_c^2 \tau^2)}, \quad (2.19)$$

$$\sigma_H = \frac{\sigma_0 \omega_c \tau}{(1 + \omega_c^2 \tau^2)} \quad (2.20)$$

A partir dessa expressão, pode-se considerar o limite em que não há impurezas no condutor. Nesse caso, $\omega_c \tau \rightarrow \infty$, ou seja, o tempo de espalhamento tende ao infinito. Assim, a resistividade e a condutividade se tornam:

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & \frac{H}{en} \\ -\frac{H}{en} & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{en}{H} \\ -\frac{en}{H} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

Portanto, quando não há impurezas a serem consideradas, as propriedades de transporte eletrônico são dadas pela resistividade e condutividade transversais quando há campo magnético aplicado.

Apesar da resistividade e condutividade serem facilmente calculadas, em laboratório são difíceis de se medir. Experimentalmente, a resistência e a condutância são muito mais convenientes de serem encontradas. Essas quantidades se relacionam, no caso da resistividade (ρ) e resistência (R), por:

$$R = \rho \frac{L}{A} \quad (2.22)$$

em que L é o comprimento do condutor e A sua área de seção transversal. Assim, a dependência entre resistência e resistividade é governada pela geometria do condutor. Se for considerado um condutor de d dimensões, sua área de seção transversal terá dimensão L^{d-1} . Dessa forma, a relação 2.22 será

$$R \sim \rho L^{2-d}. \quad (2.23)$$

Essa relação mostra que em um condutor bidimensional a resistividade e a resistência serão iguais. Além disso, a resistência desse condutor variará conforme sua razão L/W (comprimento por largura) por algum fator $f(L/W)$ [51]. No caso da resistência Hall, o comprimento faz o papel da seção transversal, então a resistividade Hall e a resistência Hall realmente coincidem e $f = 1$ [2].

2.2 O efeito Shubnikov-de Haas

Em 1930, Shubnikov e de Haas [52] perceberam que o valor da resistência longitudinal $\rho_{xx} = 1/\sigma_0$ oscilava em função do campo magnético aplicado, quando este se encontrava acima de um valor característico. Esse resultado se diferenciava do resultado obtido por Hall, em que a resistividade longitudinal seria independente do campo magnético (como pode ser visto na matriz 2.18). Apesar dessa divergência, o resultado de Shubnikov e de Haas mostra que a resistência Hall se mantém linear em função do campo \vec{H} [2].

O efeito Shubnikov-de Haas foi obtido teoricamente quase ao mesmo tempo por Landau [2] e é consequência da quantização da energia dos elétrons no sistema bidimensional sob campo magnético muito forte. Essa quantização é a quantização de Landau e consiste na quantização do raio da trajetória circular do elétron em um campo magnético, que leva à quantização de sua energia cinética nos níveis de Landau. Esses níveis possuem energia

$$E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2), \quad (2.24)$$

sendo n um inteiro. A quantização só se torna possível se o campo magnético possuir um valor suficientemente alto tal que o elétron complete uma trajetória circular completa sem colidir com outras partículas. Essa condição é satisfeita quando $\omega_c\tau > 1$ e define o campo magnético crítico $H_c \approx m/e\tau = \mu^{-1}$. Sendo o campo aplicado maior do que o valor crítico, $H_{ap} > H_c$, a resistência começa a oscilar em função da mobilidade dos elétrons μ 2.9. Como as amostras que possuem maior valor de mobilidade atualmente estão na ordem de $\mu \sim 10^7 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, o efeito Shubnikov-de Haas pode ser observado com campos magnéticos a partir de $H_c \sim 1 \text{ mT}$. Um diagrama desse efeito é mostrado na figura 2.2(a).

Para se entender esse efeito, usa-se a equação de transporte de Boltzmann, através da relação de Einstein

$$\sigma_L = e^2 D \rho(E_F) \quad (2.25)$$

que relaciona a condutividade com a equação de difusão. Nessa equação, a condutividade é proporcional à densidade de estados $\rho(E_F)$ na energia de Fermi, que por sua vez é proporcional à densidade eletrônica. Devido à quantização de Landau, a densidade de estados consiste em uma sequência de deltas nas energias 2.24,

$$\rho(E) = \sum_n g_n \delta(E - E_n) \quad (2.26)$$

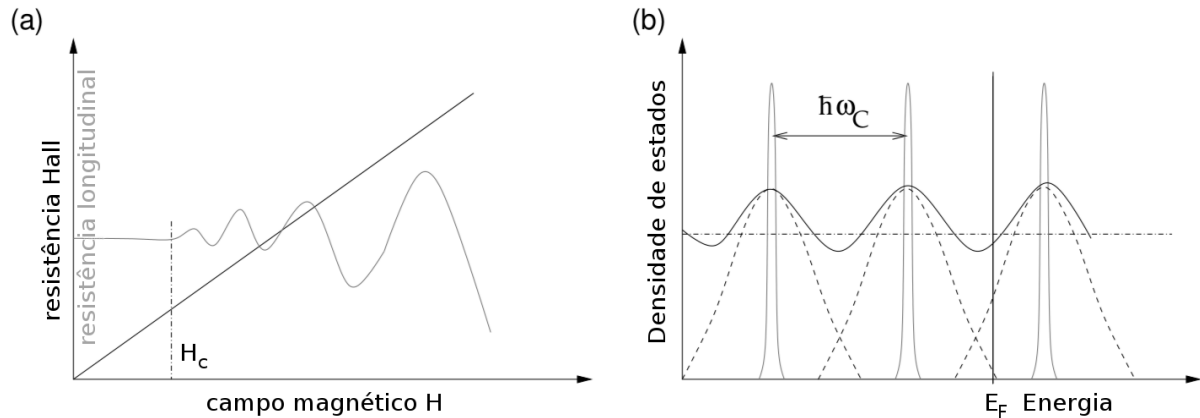


Figura 2.2: Resistência Hall e longitudinal em função do campo magnético aplicado H , mostrando o efeito Shubnikov-de Haas (a). Densidade de estados em função da energia (b). Figura adaptada de [2].

em que g_n é o termo que leva em conta a degenerescência dos níveis de energia. Como as amostras normalmente possuem impurezas, os picos das densidades de estados podem eventualmente se sobrepor de tal forma que as densidades de estados oscilam com picos nos pontos E_n , como mostrado na figura 2.2(b). Ao se variar o campo magnético H , a distância entre os níveis de energia de Landau também varia e a densidade de estados se torna máxima quando E_F coincide com a energia de um nível de Landau, e mínima se E_F fica entre dois níveis de Landau adjacentes. A oscilação da densidade eletrônica resultante como função do campo magnético leva, através da equação 2.25 em uma oscilação da condutividade longitudinal (ou resistividade), que é a essência do efeito Shubnikov-Haas [2].

2.3 Efeito Hall quântico

O efeito Hall quântico inteiro é a quantização da resistência Hall, que antes variava linearmente com o campo magnético H e ocorre em temperaturas baixas, de modo que a escala de energia definida por $k_B T$ (k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura do sistema) é bem menor do que o espaçamento dos níveis de Landau $\hbar\omega_c$. A curva da resistência Hall agora apresenta plateaus em valores específicos de campo magnético, como mostrado na figura 2.3. Nesses plateaus, a resistência Hall é dada como uma fração do inverso da condutância quântica e^2/h , sendo

$$R_H = \left(\frac{h}{e^2}\right) \frac{1}{n} \quad (2.27)$$

definido em termos de números inteiros n . Quando o plateau na resistência Hall ocorre, a resistência longitudinal se torna zero. Essa característica é remanescente do efeito Shubnikov-de Haas, embora neste a resistência diminuía sem chegar a zero. Esses pontos de mínimo do efeito Shubnikov-de Haas podem ser usados para se determinar o ponto de transição entre este e o efeito Hall quântico inteiro.

Como discutido na seção 2.1, quando a resistência longitudinal se torna zero, o tempo de espalhamento tende ao infinito no efeito Hall quântico inteiro. Por isso, a observação do efeito Hall não depende particularmente das impurezas ou do espalhamento eletrônico na amostra. Propriedades como a geometria, os materiais de deposição usados na fabricação dos gases de elétrons bidimensionais, a concentração de impurezas ou sua distribuição não são fundamentais na definição das características dos plateaus do efeito Hall quântico inteiro [2]. Assim, a quantização da resistência Hall não depende das propriedades particulares de cada amostra. Portanto, o valor da resistência Hall é universal e pode ser medido com grande precisão, que desde 1990 é usada como resistência padrão

$$R_{K-90} = \frac{h}{e^2} = 25812,807\Omega, \quad (2.28)$$

e chamada de constante de Klitzing [53, 54].

A origem do efeito Hall quântico inteiro e do fracionário são diferentes, apesar de serem fenomenologicamente semelhantes: o primeiro surge da quantização de Landau, ou seja, a quantização da energia cinética de cada um dos elétrons num campo magnético; o segundo se

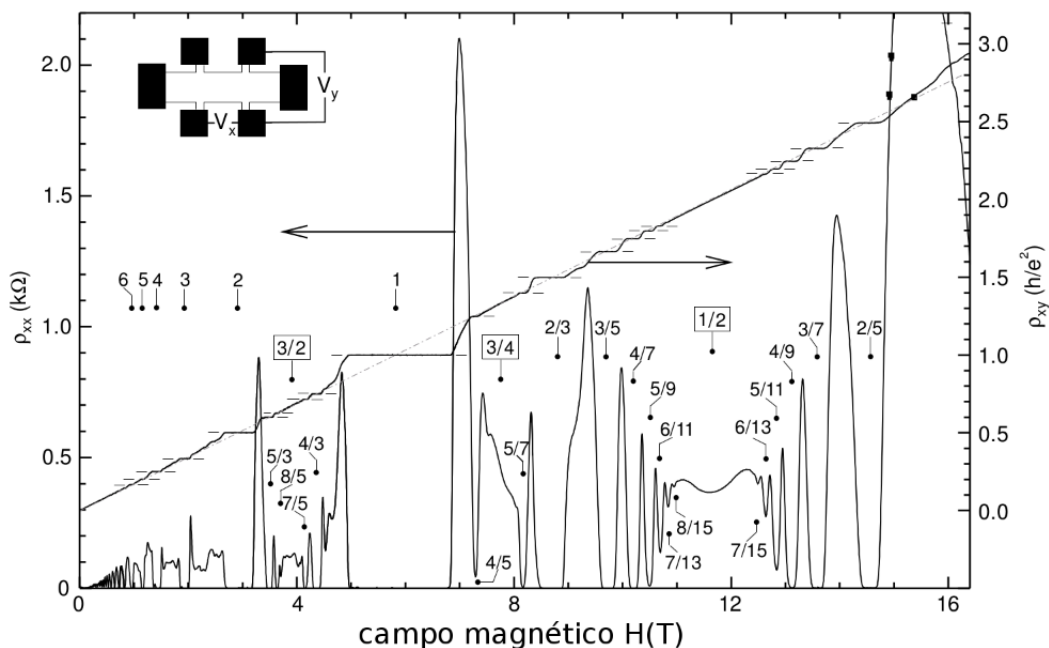


Figura 2.3: Dependência da resistividade longitudinal ρ_{xx} e Hall ρ_{xy} em função do campo magnético H aplicado. Medido por J. Smet, MPI-Stuttgart, figura de [2].

deve a correlações eletrônicas fortes quando um nível de Landau é parcialmente preenchido e a interação de Coulomb entre os elétrons se torna relevante.

Depois da descoberta do efeito Hall quântico fracionário com $n = 1/3$, vários outros tipos foram descobertos e descritos teoricamente. Em 1983, Laughlin mostrou que a origem do efeito Hall quântico fracionário com $n = 1/3$ ou qualquer outro n tal que $n = 1/q$ e q sendo um número ímpar se deve a formação de um líquido eletrônico incompressível correlacionado com várias propriedades exóticas. Outros estados, com $n = p/(2sp \pm 1)$, em que p e s são inteiros, foram descritos de acordo com a teoria *composite-Fermion* em que o efeito Hall quântico fracionário seria um efeito Hall quântico inteiro de uma nova quasi-partícula, que consistiria de um elétron que captura um número par de quanta de fluxo [55, 56].

2.4 Efeito Hall anômalo

Após descobrir que um condutor colocado num campo magnético tem seus elétrons de condução desviados pela força de Lorentz, E. H. Hall percebeu que esse desvio era dez vezes maior em um material ferromagnético em comparação com outros tipos de condutores. Além disso, mesmo após o campo magnético ser retirado do material ferromagnético, uma voltagem Hall era medida devido à magnetização adquirida pelo material. Esse efeito recebeu o nome de efeito Hall anômalo.

O efeito Hall anômalo foi estudado durante mais de um século e não muito bem compreendido [57]. Isso aconteceu porque os fenômenos observados nesse efeito estão ligados à topologia e geometria dos materiais, como a velocidade anômala, que foi considerada na primeira teoria microscópica do efeito Hall anômalo, feita por Karplus e Luttinger em 1954 e foi o primeiro conceito da curvatura da fase de Berry. No entanto, como esses conceitos pareciam implicar numa corrente Hall intrínseca sem dissipação e não foram compreendidos até a formulação da fase de Berry, em 1984 [58], o efeito Hall anômalo foi alvo de muita polêmica.

Experimentalmente se observou que a dependência da resistividade Hall ρ_H em relação ao campo magnético perpendicular H_z aplicado ao sistema é diferente nos condutores ferromagnéticos e não-ferromagnéticos. Em condutores sem ferromagnetismo, a resistividade Hall cresce linearmente com H_z , figura 2.4(a); nos materiais ferromagnéticos, ρ_H atinge um valor de saturação para valores altos de H_z , se tornando quase independente desse campo e apresenta uma curva de histerese, 2.4(b). Na figura 2.5, pode-se observar esse efeito no Ni. Kundt, em 1893, notou que no Fe, Co e Ni o valor de saturação é aproximadamente proporcional à magnetização M_z [59] e que se o campo magnético for aplicado em outras direções, pouca anisotropia será medida. Outros dois trabalhos, por Pugh [60] e Pugh e Lippert [61] estabeleceram a relação:

$$\rho_H = R_L H_z + R_s M_z. \quad (2.29)$$

Essa regra se aplica a vários materiais e é válida para muitos valores de campos magnéticos externos. O primeiro termo representa o efeito Hall clássico da seção 2.1 e o segundo a contribuição devido à magnetização espontânea. Portanto, a curva de histerese da figura

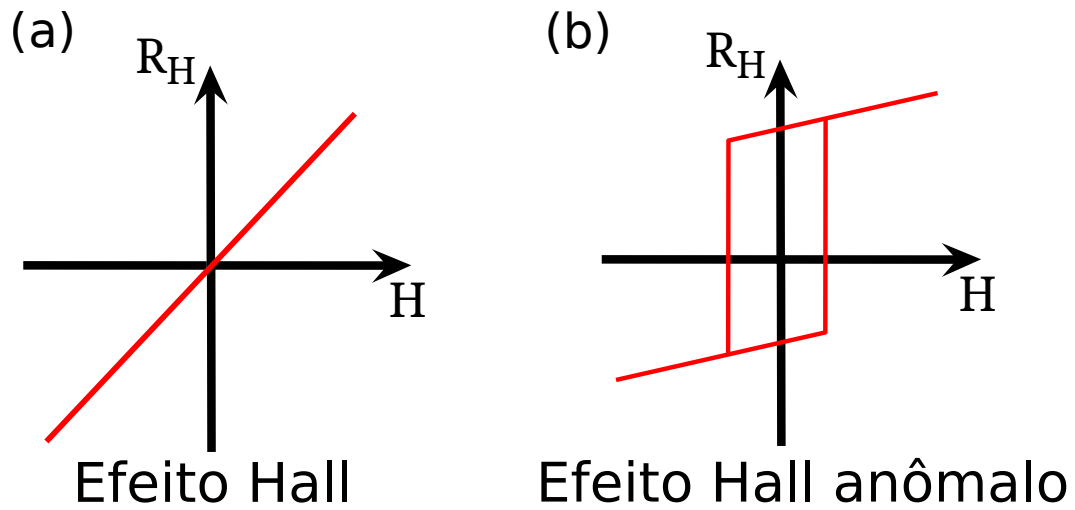


Figura 2.4: Dependência da resistividade Hall em função do campo magnético H no efeito Hall (a) e no efeito Hall anômalo (b). Figura adaptada de [1].

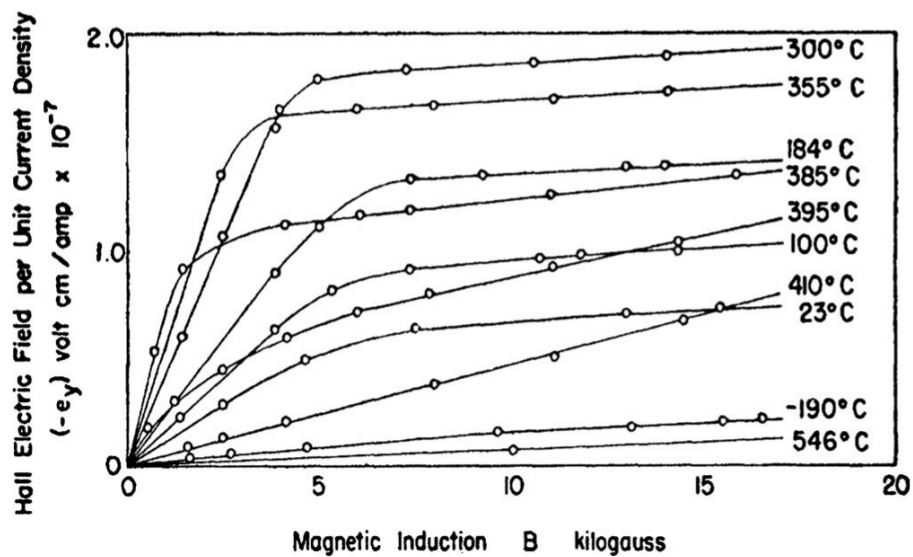


Figura 2.5: Efeito Hall no Ni. Dados de [3], figura de [4].

2.4(b) se deve a essa relação entre a resistividade Hall e a magnetização de um material, existindo mesmo quando o campo magnético externo é zero na equação 2.29. O termo R_s depende de muitos parâmetros dos materiais e também da resistividade longitudinal ρ_L , surgindo da interação de spin-órbita entre a corrente elétrica e os momentos magnéticos dos átomos [57]. Por causa dessa dependência fraca com o campo magnético externo, o efeito Hall anômalo pode ser observado sem ele.

2.5 Efeito Hall quântico anômalo

Como visto na seção 2.2, níveis de Landau são formados em um gás de elétrons bidimensional sujeito a um campo magnético externo suficientemente forte. Quando a temperatura $k_B T$ do sistema é baixa comparada ao espaçamento $\hbar\omega$ dos níveis de Landau, uma condutância Hall quantizada é observada e uma corrente elétrica flui somente em uma direção ao longo de cada uma das bordas da amostra. Como o elétron não pode se mover no sentido contrário na corrente nesse mesmo canal, não há retro-espalhamento e a corrente flui sem dissipação, qualidade que pode ser aplicada em dispositivos eletrônicos de alta velocidade com baixo consumo de energia. Essas observações deram origem ao efeito Hall quântico e é natural se perguntar se o efeito Hall anômalo também pode ser quantizado mesmo sem um campo magnético e, conseqüentemente, sem a formação dos níveis de Landau.

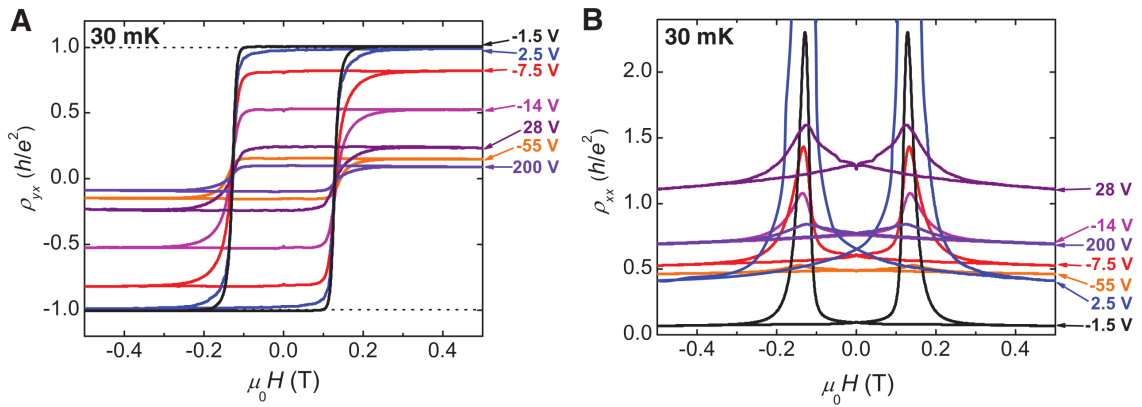


Figura 2.6: Dependência da resistência Hall ρ_H (ρ_{xy}) (a) e da resistência longitudinal ρ_L (ρ_{xx}) em função do campo magnético aplicado para diferentes valores de pontencial V_g a temperatura de 30mK. Figura de [5].

Haldane mostrou teoricamente [8] que o efeito Hall quântico poderia ser observado em uma rede hexagonal bidimensional, com férmions sem spin e com um campo magnético periódico, quebrando a simetria de inversão temporal e resultando em um fluxo magnético total igual a zero dentro de uma célula unitária. Como não há campo magnético líquido, não são formados níveis de Landau, formando o efeito Hall quântico anômalo. Experimentalmente, esse efeito foi observado em filmes finos de $(Bi, Sb)_2Te_3$ dopado com Cr e crescidos sobre substratos de $SrTiO_3$ em temperatura ultra-baixas [5]. Nessas amostras, enquanto há

aplicação de campo magnético, a resistividade de Hall ρ_H é praticamente invariante com o campo. A figura 2.6 mostra a dependência de ρ_H em (a) e de ρ_L em (b) com o campo aplicado, sugerindo que o efeito Hall observado se deve a características ferromagnéticas dos materiais [1] e portanto se trata realmente do efeito Hall anômalo quantizado.

2.6 Efeito Hall quântico de spin

O primeiro tipo de efeito Hall descoberto que possui correntes de elétrons com spin polarizado é o efeito Hall intrínseco de spin [62, 63]. Nesse efeito, a simetria de inversão temporal não é quebrada, diferentemente do que ocorre no efeito Hall usual. Isso ocorre porque não há campo magnético externo aplicado, sendo o efeito gerado pelo acoplamento de spin-órbita intrínseco, que gera um campo elétrico efetivo no material que é o responsável por mudar as trajetórias dos elétrons. O efeito Hall intrínseco de spin também foi observado em materiais isolantes [64], o que possibilitou que a polarização de spins fosse observadas em materiais que fossem isolantes topológicos.

Nas seções anteriores, foi mostrado como um campo magnético perpendicular a um sistema que conduz elétrons faz com que estes se desviem de seus caminhos e, se o campo magnético for grande, a trajetória do elétron se fecha em órbitas circulares quantizadas. Quanto maior o valor do campo, menor o raio dessas órbitas e o material nesse estado se torna um isolante topológico [65]. No entanto, se o material possuir estados de borda sem *gap* (caso do grafeno e do HgTe/CdTe), elétrons que se propagam próximos às bordas do material passam a se mover em órbitas grandes paralelas às bordas em canais unidimensionais com dois graus de liberdade: se propagando para frente ou para trás; e com condutância e^2/h por canal. A condutância Hall σ_L também é quantizada em frações inteiras ou fracionárias de e^2/h .

Um sistema que se encontra no estado Hall quântico possui elétrons que se movem somente em uma direção em uma de suas bordas e com spins polarizados em uma direção, a outra borda tem elétrons que se movem somente no direção oposta e a polarização do spin é invertida em comparação à outra corrente. A direção de propagação dos elétrons na borda é dada pela direção de aplicação do campo magnético. E como o elétron não consegue se mover no sentido oposto ao do canal em que se encontra, não há retroespalhamento entre elétrons e impurezas que se encontrem no material. Esse tipo de sistema, com somente um canal por borda é chamado de quiral e é retratado na figura 2.7(a).

Os efeitos Hall quântico inteiro ou fracionário foram os primeiros estados topológicos descobertos. Para que sejam observados, é necessária a existência de campos magnéticos muito fortes atuando sobre o sistema. Na busca de outros estados topológicos mas que não

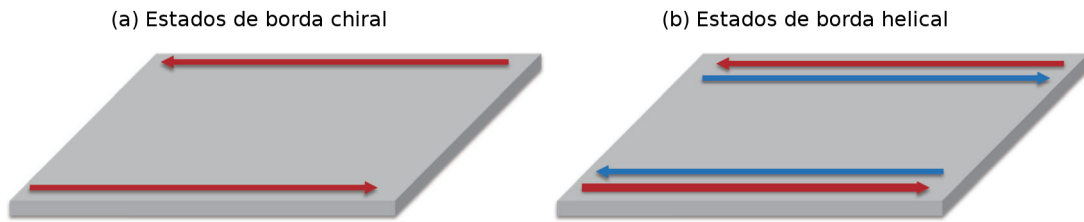


Figura 2.7: Estados de borda quirais no efeito Hall quântico e Hall quântico anômalo (a). Estados de bordas helicais do efeito Hall quântico de spin (b). Figura adaptada de [1].

requisitassem campos externos tão grandes e na tentativa de se observar um estado quantizado do efeito Hall intrínseco de spin, foi proposto teoricamente o efeito Hall quântico de spin, no final de 2005 por Kane e Mele [9] no grafeno e por Bernevig e Zhang [66] no efeito spin-órbita induzido por strain em semicondutores. Sua realização em laboratório em poços quânticos de HgTe ocorreu em 2007 [10, 11, 67, 68].

O efeito Hall quântico de spin proposto por Kane e Mele é alcançado a partir da consideração do acoplamento de spin-órbita intrínseco no grafeno, mesmo que este seja pequeno nesse material. E é topologicamente diferente do efeito Hall intrínseco de spin observado em isolantes ou em GaAs dopado, que não possuem *gap* de energia. Os resultados teóricos alcançados por Kane e Mele serão reproduzidos na seção 5.4 em que se mostrará que esse estado possui duas correntes eletrônicas em cada borda, ao invés de somente uma, como no diagrama da figura 2.7(b); e que cada borda possui uma projeção de spin bem definida.

Capítulo 3

O método de tight-binding

3.1 O modelo de primeiros vizinhos do tight-binding

Um átomo isolado possui níveis eletrônicos próprios que variam e dependem de suas características fundamentais. Quando dois átomos ou mais são aproximados entre si, seus níveis eletrônicos se recombinaem de modo a obter uma nova estrutura para o sistema como um todo. E, a aglomeração periódica de átomos numa estrutura única forma o que se entende por rede cristalina. Tratando-se de um material isolante, a superposição das funções de onda dos elétrons de valência nos átomos da rede cristalina é baixa, por estarem essas bem localizadas. Já no caso de um material condutor, essa superposição das funções de onda é grande e os elétrons adquirem grande mobilidade através do sólido. Os materiais semicondutores estão no meio dessa classificação, tendo uma distribuição eletrônica não muito bem localizada, e com superposição baixa entre os elétrons de valência dos átomos vizinhos.

O método de tight-binding é útil nesses casos, em que a sobreposição das funções de onda entre dois átomos vizinhos é grande o suficiente para exigir correções nas funções de onda de átomos isolados, mas não tão grande a ponto de tornar a descrição atômica irrelevante. Dessa maneira, assume-se que o Hamiltoniano, H_{rede} , de toda rede cristalina pode ser aproximada, na vizinhança de cada ponto da rede, pelo Hamiltoniano, H , do átomo localizado nesse ponto. No entanto, isso traz algumas desvantagens, porque esse método não nos permite incluir espectros contínuos e também não possui boa descrição para níveis abaixo dos estados de valência.

Para se encontrar as bandas de energia num sólido cristalino, tem-se que resolver a equação de Schrödinger:

$$H |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle, \quad (3.1)$$

sendo o Hamiltoniano escrito como

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \sum_{\vec{R}} V(\vec{r} - \vec{R}), \quad (3.2)$$

em que o primeiro termo é a energia cinética do elétron, o segundo o termo caracteriza o potencial periódico e $\vec{r} - \vec{R}$, a distância entre o elétron e o núcleo do átomo.

A auto-função $\Psi_n(\vec{k}, \vec{r})$ é uma função expressa como combinação linear de funções orbitais atômicas de Bloch $\phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r})$ para cada nível n e centrada em um átomo na origem.

Assim,

$$\Psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{n'=1}^j c_{nn'}(\vec{k}) \phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (3.3)$$

em que $c_{nn'}(\vec{k})$ são coeficientes a serem determinados. $\phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r})$ é escrito como

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

com ($n = 1, 2, \dots, j$), φ_n os orbitais atômicos, que pode ser representados como

$$\varphi(\vec{r} - \vec{R}) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_g} \right) \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{R})^2}{2\sigma_g^2} \right); \quad (3.5)$$

sendo $1/\sigma_g = Z_g/2\sqrt{3}a$ e $Z_g = 11.2$ [69].

O fator de fase $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$ tem a periodicidade da rede e o número de funções de onda na célula unitária é dado por j . Portanto, temos j funções de Bloch no sólido para um dado \vec{k} . As funções de Bloch são invariáveis por translações dos vetores da rede:

$$\begin{aligned} \phi_n(\vec{k}, \vec{r} + \vec{a}) &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \varphi_n(\vec{r} + \vec{a} - \vec{R}) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} \frac{1}{N} \sum_{\vec{R}-\vec{a}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}-\vec{a})} \varphi_n(\vec{r} - (\vec{R} - \vec{a})) \\ &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} \phi_n(\vec{k}, \vec{r}). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Como as auto-funções $\Psi_n(\vec{k}, \vec{r})$ também precisam satisfazer o teorema de Bloch 3.6, o somatório na equação 3.3 é tomado somente para orbitais de Bloch $\phi_{n'}(\vec{k}, \vec{r})$ com o mesmo valor de \vec{k} .

O n -ésimo auto estado $E_n(\vec{k})$, como função de \vec{k} é dado, portanto, por

$$E_n(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} = \frac{\int dr \Psi_n^* H \Psi_n}{\int dr \Psi_n^* \Psi_n} \quad (3.7)$$

Substituindo 3.3 em 3.7 e mudando os índices mudos, temos

$$E_i(\vec{k}) = \frac{\sum_{n,n'=1}^j c_{in}^* c_{in'} \langle \phi_n | H | \phi_{n'} \rangle}{\sum_{n,n'=1}^j c_{in}^* c_{in'} \langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle} \equiv \frac{\sum_{n,n'=1}^j H_{nn'}(\vec{k}) c_{in}^* c_{in'}}{\sum_{n,n'=1}^j S_{nn'}(\vec{k}) c_{in}^* c_{in'}}. \quad (3.8)$$

$H_{nn'}$ são conhecidos como elementos da integral de transferência, pois descrevem a troca dos elétrons com ligações do tipo π entre os diferentes átomos da rede. $S_{nn'}$ são os elementos da integral da matriz de *overlap* e representam a sobreposição dos mesmos orbitais π . Esses elementos são definidas por

$$H_{nn'}(\vec{k}) = \langle \phi_n | H | \phi_{n'} \rangle \quad (3.9)$$

$$S_{nn'}(\vec{k}) = \langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle. \quad (3.10)$$

Quando se fixam os valores das matrizes $H_{nn'}(\vec{k})$ e $S_{nn'}(\vec{k})$ na equação acima para um dado \vec{k} , o coeficiente c_{in}^* é otimizado de forma a minimizar a energia $E_i(\vec{k})$. Vendo que o coeficiente c_{in}^* também é função de \vec{k} e portanto, definido para cada \vec{k} , tomamos a derivada parcial para c_{in}^* enquanto mantemos $c_{in'}^*$, $c_{in'}$ e c_{in} constantes, obtendo assim, o mínimo local para energia

$$\frac{\partial E_i(\vec{k})}{\partial c_{in}^*} = \frac{\sum_{n'=1}^N H_{nn'}(\vec{k}) c_{in'}}{\sum_{n,n'=1}^N S_{nn'}(\vec{k}) c_{in}^* c_{in'}} - \frac{\sum_{n,n'=1}^N H_{nn'}(\vec{k}) c_{in}^* c_{in'}}{\left(\sum_{n,n'=1}^N S_{nn'}(\vec{k}) c_{in}^* c_{in'}\right)^2} \sum_{n'=1}^N S_{nn'}(\vec{k}) c_{in'} = 0 \quad (3.11)$$

Multiplicando os dois lados da equação 3.11 por $\sum_{n,n'=1}^N S_{nn'}(\vec{k}) c_{in}^* c_{in'}$ e usando a expressão 3.8 no segundo termo, obtemos

$$\sum_{n'}^N H_{nn'}(\vec{k}) c_{in'} = E_i(\vec{k}) \sum_{n'}^N S_{nn'}(\vec{k}) c_{in'} \quad (3.12)$$

e, definindo-se um vetor coluna

$$c_i = \begin{pmatrix} c_{i1} \\ c_{i2} \\ \vdots \\ c_{iN} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

escrevemos

$$Hc_i = E_i(\vec{k})Sc_i. \quad (3.14)$$

Pode-se ainda transpor o lado direito da equação 3.14, obtendo-se

$$[H - E_i(\vec{k})S]c_i = 0. \quad (3.15)$$

Se a inversa da matriz $[H - E_i(\vec{k})S]$ existir, multiplica-se os dois lados da equação 3.15 por $[H - E_i(\vec{k})S]^{-1}$ e obtemos

$$c_i = 0, \quad (3.16)$$

sendo este o caso trivial (em que não existe função de onda no sólido). Então, as autofunções somente existem se a matriz inversa não existir, de acordo com a condição

$$\det[H - ES] = 0, \quad (3.17)$$

conhecida como equação característica de grau j , à qual dá soluções de todos os j autovalores de $E_i(\vec{k})$ ($i = 1, \dots, j$) para um dado \vec{k} .

3.2 Os orbitais de Löwdin

Os orbitais atômicos φ_n , 3.5, usados na seção anterior se sobrepõem, dando origem a uma matriz de *overlap* $S_{nn'}$. Muitas vezes essas matrizes são simplesmente desconsideradas e as vezes podem levar a algumas complicações. Um dos tratamentos que pode ser dado a esse problema é se fazer a substituição dos orbitais atômicos por funções ortonormalizadas ψ_n , conhecidos como orbitais de Löwdin [70].

Partiremos dos orbitais atômicos φ_n ($n = 1, 2, \dots, j$), que são funções somente do vetor de espaço \vec{r} . A primeira condição que se faz sobre eles é que sejam normalizados, dessa forma

$$\int d^3r \varphi_n^* \varphi_n = 1. \quad (3.18)$$

As integrais de *overlap* podem então ser definidas como

$$S_{nn'} = \int d^3r \varphi_n^* \varphi_{n'} = \delta_{nn'}, \quad (3.19)$$

sendo $S_{nn} = 0$. Como os orbitais Ψ_n podem ser escritos como combinação linear dos orbitais atômicos, como pode-se ver nas equações 3.3 e 3.4, tem-se:

$$\int d^3r \Psi_n^* \Psi_n = 1. \quad (3.20)$$

Essa equação 3.20 e a (3.14) podem ser reescritas como

$$\sum_{n'=1}^j H_{nn'} c_{n'm} = \sum_{n'=1}^j (\delta_{nn'} + S_{nn'}) c_{n'm} E_m, \quad (3.21)$$

$$\sum_{nn'} x_{nm}^* (\delta_{nn'} + S_{nn'}) c_{n'm} = 1. \quad (3.22)$$

E as condições 3.21 e 3.22 podem ser simplificadas se for feita a substituição

$$c_{nm} = (1 + S)_{nn'}^{-1/2} C_{n'm} \quad (3.23)$$

em que

$$(1 + S)_{nn'}^{-1/2} = \delta_{nn'} - \frac{1}{2} S_{nn'} + \frac{3}{8} \sum_k S_{nk} S_{kn'} - \frac{5}{16} \sum_{kl} S_{nk} S_{kl} S_{ln'} + \dots \quad (3.24)$$

A substituição da equação 3.23 faz com que as equações 3.21 e 3.22 possam ser reescritas como

$$H'_{nn'} C_{n'm} = C_{kl} E_{li}; \quad (3.25)$$

$$C_{nm}^* C_{mn} = 1; \quad (3.26)$$

$$H'_{nn'} = (1 + S)_{nn'}^{-1/2} H_{n'k} (1 + S)_{kl}^{-1/2}. \quad (3.27)$$

Portanto, pode-se escrever o seguinte teorema (nas palavras do próprio Löwdin [70]): *O problema de se resolver equações características incluindo integrais de overlap $S_{nn'}$ pode ser tratado da mesma maneira do que em uma teoria simplificada (com S negligenciado) se a matriz H for substituído pela matriz 3.27. Essa nova matriz H' é auto-adjunta e pode ser expandida na forma*

$$\begin{aligned} H'_{nn'} = & H_{nn'} - \frac{1}{2} \sum_k (S_{nk} H_{kn'} + H_{nk} S_{kn'}) + \\ & + \frac{3}{8} \sum_{kl} (S_{nk} S_{kl} H_{ln'} + \frac{2}{3} S_{nk} H_{kl} S_{ln'} + \\ & + H_{nk} S_{kl} S_{ln'}) - \dots \end{aligned} \quad (3.28)$$

Os orbitais moleculares podem ser reescritos, usando-se da substituição definida com a equação 3.23, como

$$\Psi_n = \phi_n c_{nn'} = \phi_n (1 + S)_{nn'}^{-1/2} C_{n'm} = \psi_n C_{nm}, \quad (3.29)$$

em que se faz

$$\psi_n = \phi_n (1 + S)_{nn'}^{-1/2}. \quad (3.30)$$

Dessa equação, pode-se escrever

$$\psi_n = \phi_n - \frac{1}{2} \sum_k \phi_k S_{kn} + \frac{3}{8} \sum_{kl} \phi_k S_{kl} S_{ln} \quad (3.31)$$

e, finalmente,

$$H'_{nn'} = \int d^3r \psi_n^* H \psi_n. \quad (3.32)$$

Vê-se portanto, que $H'_{nn'}$ são os elementos matriciais da integral dos orbitais ψ_n . E, sendo C_{nm} os coeficientes de expansão com respeito às mesmas funções, Löwdin afirma [70]: *A solução do problema de se construir orbitais moleculares, levando as integrais de overlap em consideração, é a mesma que se considerarmos as funções ortonormalizadas, da equação 3.29, como orbitais atômicos reais.*

Nota-se que as funções de Löwdin ψ_n são reduzidas aos orbitais atômicos ϕ_n quando a distância interatômica é muito grande, mas que esses orbitais são deformados quando o *overlap* é apreciável.

Capítulo 4

O modelo de tight-binding aplicado ao grafeno

4.1 Tight-binding de primeiros vizinhos

A célula unitária do grafeno possui dois átomos distintos, identificados como sítios A e B na figura 4.1. A função de onda de um elétron deve ser uma combinação linear das funções atômicas de cada sítio:

$$|\Psi\rangle = \alpha(\vec{k}) |\phi_A\rangle + \beta(\vec{k}) |\phi_B\rangle \quad (4.1)$$

em que $\alpha(\vec{k})$ e $\beta(\vec{k})$ são coeficientes dos sítios A e B e as funções de Bloch são

$$|\phi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} |A_n\rangle \quad (4.2)$$

$$|\phi_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} |B_n\rangle. \quad (4.3)$$

Nessas funções, $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i}$ é o termo que mostra sua periodicidade, \vec{R}_i representa a posição do átomo de carbono que a função de Bloch representa com relação à origem de um sistema de coordenadas e $\frac{1}{\sqrt{N}}$ o fator de normalização (N é o número de átomos no grafeno).

A aproximação de tight-binding de primeiros vizinhos considera que um elétron só pode passar para os átomos que estão na sua vizinhança imediata, chamados de primeiros vizinhos. No caso do grafeno, são três os primeiros vizinhos. O hamiltoniano do grafeno pode ser escrito como:

$$H = H_{on} + H_h \quad (4.4)$$

em que o termo H_{on} representa a energia do sítio (*on site*),

$$H_{on} = \epsilon_0 \sum_n^N \{|A_n\rangle \langle A_n| + |B_n\rangle \langle B_n|\}; \quad (4.5)$$

e as letras A e B representam o tipo de sítio da célula unitária. O valor dessa energia pode ser definido como $\epsilon_0 = 0$ no nível de Fermi; assim, todo o termo H_{on} é zero. O outro termo da equação 4.4 define a troca (*hopping*) entre elétrons dos sítios que são primeiros vizinhos,

$$H_h = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (|A_i\rangle \langle B_j| + |B_j\rangle \langle A_i|); \quad (4.6)$$

sendo i e j os índices dos sítios e a somatória sobre $\langle i, j \rangle$ indica que somente serão considerados sítios i e j de átomos que sejam primeiros vizinhos. O termo t_{ij} se chama fator de troca ou fator de *hopping* e dá a amplitude de probabilidade de um elétron num sítio i passar a um sítio j . Ele possui o mesmo valor para os três primeiros vizinhos, $t_{ij} = 2,7eV$, podendo ser retirado da somatória. Este valor foi obtido nas referências [71, 72]. Note que no hamiltoniano só temos combinações de sítios A e B pois considera-se apenas os primeiros vizinhos: todo sítio A tem como primeiros vizinhos somente sítios B e vice-versa, como pode ser visto na figura 4.1(a).

Para se encontrar os valores das bandas energia do grafeno, usa-se a equação de Schrödinger e, conseqüentemente, os termos matriciais definidos na expressão 3.9. A matriz do hamiltoniano H , então, é definida pela matriz

$$H = \begin{pmatrix} \langle \phi_A | H | \phi_A \rangle & \langle \phi_A | H | \phi_B \rangle \\ \langle \phi_B | H | \phi_A \rangle & \langle \phi_B | H | \phi_B \rangle \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

em que os termos da diagonal principal representam as energias do sítio (*on site*) dos átomos, que foram tomadas como sendo zero e cada termo fora da diagonal principal da matriz representa o termo de *hopping*.

O termo $\langle \phi_A | H | \phi_B \rangle$ do hamiltoniano é calculado, então, com o uso das funções 4.2 e 4.3:

$$\langle \phi_A | H | \phi_B \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'} | H_h | B_n \rangle. \quad (4.8)$$

E, substituindo-se o termo H_h da equação 4.6, tem-se que

$$\begin{aligned}
\langle \phi_A | H_h | \phi_B \rangle &= -\frac{t}{N} \sum_{nn'} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'} | (|A_i\rangle \langle B_j| + |B_j\rangle \langle A_i|) | B_n \rangle \\
&= -\frac{t}{N} \sum_{nn'} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} (\langle A_{n'} | A_i \rangle \langle B_j | B_n \rangle \\
&\quad + \langle A_{n'} | B_j \rangle \langle A_i | B_n \rangle).
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Os produtos $\langle C_i | C_j \rangle$, ($C = A, B$) resultam em deltas de Kronecker, tais que

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases} \tag{4.10}$$

Assim,

$$\langle A_{n'} | A_i \rangle = \delta_{AA} \delta_{n'i} = \delta_{n'i}; \tag{4.11}$$

$$\langle A_{n'} | B_j \rangle = \delta_{AB} \delta_{n'j} = 0; \tag{4.12}$$

sendo o último termo igual a zero pois as funções de onda foram consideradas ortogonalizadas. O resultados desses dois produtos são então aplicados na equação 4.9, de forma que

$$\begin{aligned}
\langle \phi_A | H_h | \phi_B \rangle &= -\frac{t}{N} \sum_{nn'} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \delta_{n'i} \delta_{jn} \\
&= -\frac{t}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)}.
\end{aligned} \tag{4.13}$$

O vetor \vec{R}_j na exponencial da equação acima é o vetor entre a origem de um sistema de coordenadas xy e um átomo de carbono num sítio de índice j . O mesmo vale para o vetor \vec{R}_i . A diferença $\vec{R}_j - \vec{R}_i$ é a distância entre esses dois átomos. Considerando-se que o índice i está associado ao sítio A_i e que o índice j está associado aos três sítios B_j que são os seus vizinhos, pode-se afirmar que a diferença $\vec{R}_j - \vec{R}_i$ terá três valores diferentes. Para cada um desses valores, que corresponde a um vizinho, será associado um vetor \vec{d}_l , com ($l = 1, 2, 3$). A representação desses vetores é mostrada na figura 4.1(b). Esses três valores se repetem por todos os sítios A_i do grafeno e como são N átomos de sítio A , a somatória sobre $\langle i, j \rangle$ pode ser trocada por N somatórias em l . Com essas definições, os vetores de distância entre um

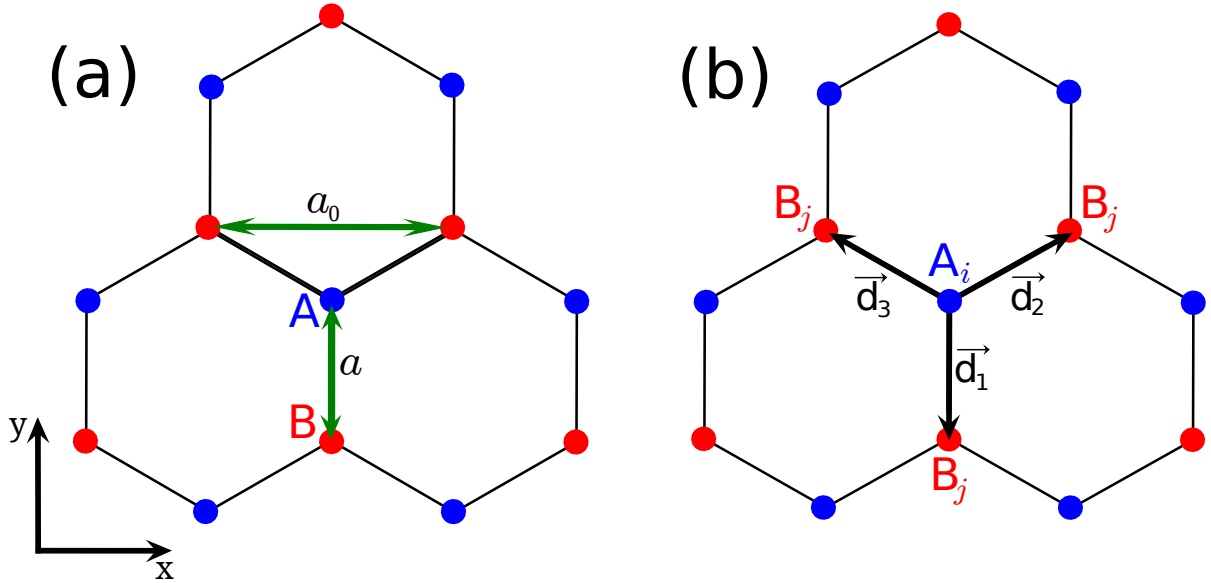


Figura 4.1: Distância a entre primeiros vizinhos e constante de rede do grafeno (a). Primeiros vizinhos de um sítio A , ligados por vetores \vec{d}_i a sítios B .

sítio A no grafeno e seus três primeiros vizinhos são:

$$\vec{d}_1 = -a\hat{j}; \quad (4.14)$$

$$\vec{d}_2 = +\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}; \quad (4.15)$$

$$\vec{d}_3 = -\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}; \quad (4.16)$$

o mesmo sendo podendo ser feito com os sítios B , em que os vetores de distâncias destes para seus primeiros vizinhos são:

$$\vec{d}_1 = a\hat{j}; \quad (4.17)$$

$$\vec{d}_2 = +\frac{a_0}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j}; \quad (4.18)$$

$$\vec{d}_3 = -\frac{a_0}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j}; \quad (4.19)$$

sendo $a = 1,42\text{\AA}$ a distância entre dois sítios A e B mais próximos e $a_0 = \sqrt{3}a$ a constante de rede do grafeno, mostrados na figura 4.1(a).

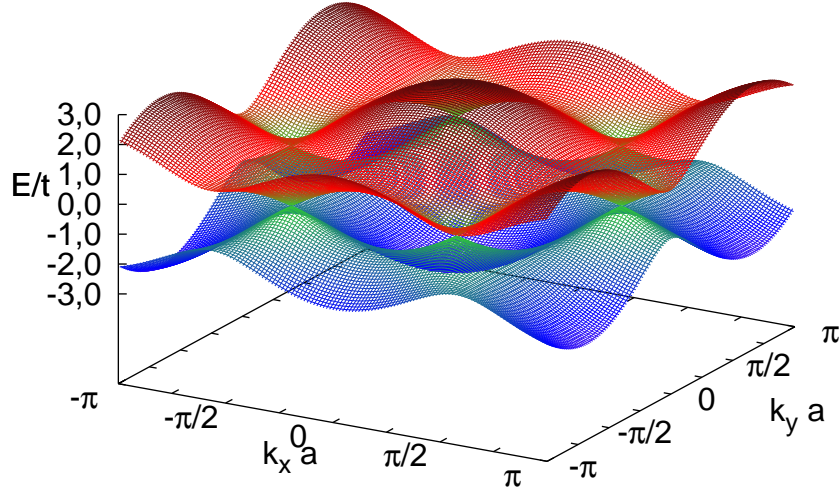


Figura 4.2: Dispersão de energia da 1ªBZ do grafeno. Os cones de Dirac nos pontos K e K' são as regiões próximas aos pontos em que as bandas de condução (superior) e de valência (inferior) se tocam.

A equação 4.13 se torna, portanto:

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_A | H_h | \phi_B \rangle &= -t \sum_l^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_l} \\
 &= -t \left[e^{-ik_y a} + e^{ik_x a_0/2 + ik_y a/2} + e^{-ik_x a_0/2 + ik_y a/2} \right] \\
 &= -t \left[e^{-ik_y a} + 2\cos\left(\frac{k_x a_0}{2}\right) e^{ik_y a/2} \right]
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

em que se pode definir

$$f = e^{-ik_y a} + 2\cos\left(\frac{k_x a_0}{2}\right) e^{ik_y a/2}. \tag{4.21}$$

E, com isso,

$$\langle \phi_A | H | \phi_B \rangle = -tf. \tag{4.22}$$

O termo $\langle \phi_B | H | \phi_A \rangle$ é o complexo conjugado da equação acima, portanto

$$\langle \phi_B | H | \phi_A \rangle = -tf^*. \tag{4.23}$$

A matriz do hamiltoniano para o grafeno toma forma:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -tf \\ -tf^* & 0 \end{pmatrix}. \tag{4.24}$$

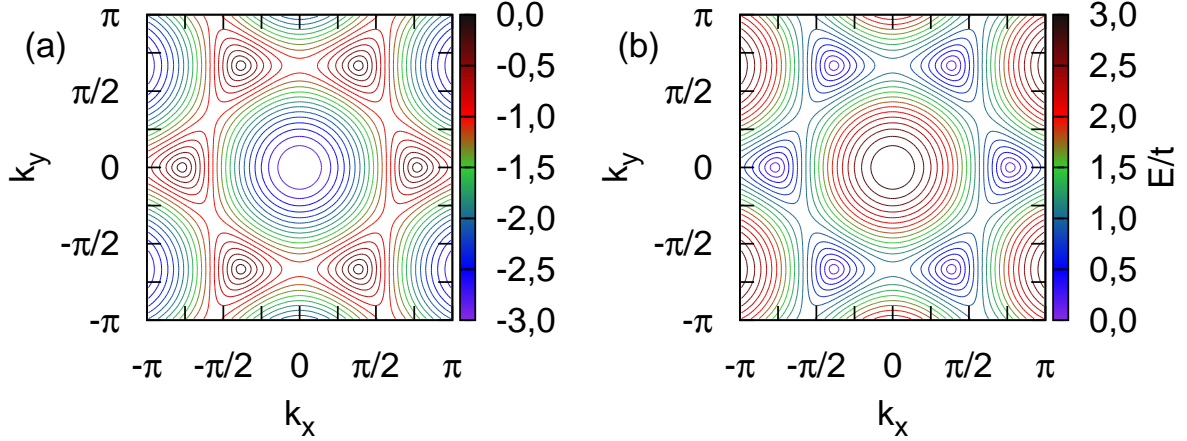


Figura 4.3: Curvas de nível da 1ªBZ do grafeno mostrando a banda de valência (a) e de condução (b).

E as energias do sistema, dadas pela equação de Schrödinger:

$$E \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -tf \\ -tf^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

A dispersão de energia das bandas de condução e valência do grafeno na primeira zona de Brillouin (1ªBZ) é mostrada na figura 4.2. Na figura 4.3, essas mesmas bandas são mostradas em curvas de nível e em perfil na figura 4.4. É notável a simetria do grafeno com relação a essas bandas, chamadas de simetria partícula-buraco. Os pontos K e K' também podem ser notados. Como as bandas apresentam degenerescência de spin, a simetria de inversão temporal também é preservada, já que naturalmente a igualdade $E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$ é preservada. Além disso, observa-se que o grafeno não possui *gap* e que a dispersão de energia próxima aos pontos K e K' , para baixas energias, é linear.

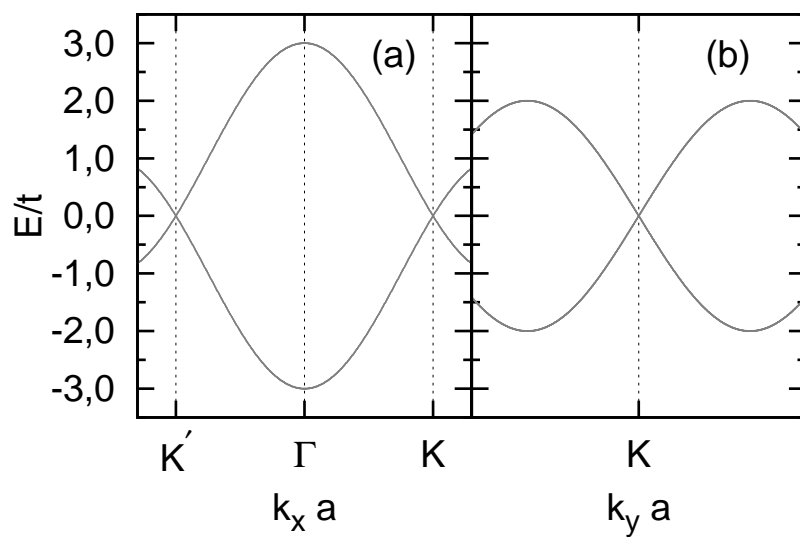


Figura 4.4: Perfil da 1^aBZ do grafeno com $k_y = 0$ em (a) e $k_x = 4\pi/3\sqrt{3}$ em (b).

4.2 Acoplamento de spin-órbita intrínseco

O acoplamento de spin-órbita intrínseco no grafite foi por muito tempo deixado de lado por ser muito fraco comparado a outros efeitos, como o acoplamento entre dois planos de grafeno. No entanto, o grafeno é facilmente afetado por perturbações em baixas energias e os efeitos devido ao acoplamento de spin-órbita devem se tornar relevantes a baixas temperaturas [9]. Apesar de ser de difícil realização experimental, esse tipo de acoplamento pode ser controlado a partir da deposição do grafeno sobre outros materiais.

O hamiltoniano do grafeno com acoplamento de spin-órbita intrínseco é escrito com os seguintes termos:

$$H = H_h + H_{so}, \quad (4.26)$$

em que H_h representa o termo de *hopping* descrito na seção anterior e dado pela equação 4.6, e H_{so} dado por:

$$H_{so} = \frac{2i}{\sqrt{3}} \lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{ss'} \left\{ |A_i, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A_j, s'| + h.c. \right\}. \quad (4.27)$$

sendo λ_{so} o parâmetro que define a intensidade do acoplamento de spin-órbita intrínseco e pode ser estimado como tendo valor de até 2,4K [9], $\vec{\gamma}$ é o vetor cuja as componentes são as matrizes de spin de Pauli, a somatória sobre $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ é realizada sobre os segundos vizinhos de um átomo no grafeno, mostrados na figura 4.5(a), os vetores \vec{d}_{mn} indicam as distâncias entre um átomo num sítio m e outro no sítio n como na figura 4.5(b) e s representam os estados de spin.

Um átomo de carbono no grafeno, em qualquer sítio que não esteja próximo às bordas, tem seis átomos como seus segundos vizinhos. O produto $(\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik})$ precisa ser feito para cada um dos seis. Para sítios A, começando do vizinho inferior direito (identificado como A_1 na figura 4.5), tem-se:

$$\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{i} - \frac{1}{2} a \hat{j} \right) \times (-a \hat{j}) = -\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \hat{k}. \quad (4.28)$$

O cálculo para os outros vizinhos A_l , até $l = 6$ é feito da mesma maneira e os resultados diferem somente pelo sinal. De uma maneira geral, o resultado será $\xi \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \hat{k}$, sendo $\xi = \pm 1$ definido pelo sentido do produto vetorial realizado e chamado de pseudo-spin. Além disso,

o produto $\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}$ gera vetores que só possuem componente no eixo z . Por esse motivo, o produto interno $\vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik})$ só terá como resultado, na parte de spin, componente γ_z .

A função de onda eletrônica escrita considerando-se o spin do elétron no termo s é

$$|\phi_A, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} |A_n, s\rangle. \quad (4.29)$$

Com isso, pode-se calcular o produto $\langle \phi_A, s' | H | \phi_A, s \rangle$:

$$\langle \phi_A, s' | H_{so} | \phi_A, s \rangle = \frac{1}{N} \sum_{nn'} \sum_{ss'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'}, s' | H_{so} | A_n, s \rangle \quad (4.30)$$

Aplicando o termo do hamiltoniano 4.27, tem-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, s' | H_{so} | \phi_A, s \rangle &= \\ &= \frac{\lambda_{so}}{N} \frac{2i}{\sqrt{3}} \sum_{nn'} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{ss'} \left\{ e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'}, s' | \right. \\ &\quad \left. [|A_i, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A_j, s' |] | A_n, s \rangle + h.c. \right\} \end{aligned} \quad (4.31)$$

em que se pode separar a parte de spin,

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, s' | H_{so} | \phi_A, s \rangle &= \\ &= \frac{\lambda_{so}}{N} \frac{2i}{\sqrt{3}} \sum_{nn'} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{ss'} \xi e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \delta_{n'i} \langle s' | \{ |s\rangle \gamma_z \langle s' | \} | s \rangle \delta_{nj} + h.c. \end{aligned} \quad (4.32)$$

e aplicando os deltas, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, s' | H_{so} | \phi_A, s \rangle &= \\ &= i \frac{\lambda_{so}}{N} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{ss'} \xi e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \langle s' | \{ |s\rangle \gamma_z \langle s' | \} | s \rangle + h.c. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Os produtos de spin são

$$\langle \uparrow | s \rangle \gamma_z \langle s' | \uparrow \rangle = \langle \uparrow | \gamma_z | \uparrow \rangle = 1 \quad (4.34)$$

$$\langle \uparrow | s \rangle \gamma_z \langle s' | \downarrow \rangle = \langle \uparrow | \gamma_z | \downarrow \rangle = 0 \quad (4.35)$$

$$\langle \downarrow | s \rangle \gamma_z \langle s' | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \gamma_z | \downarrow \rangle = -1 \quad (4.36)$$

Para o termo $\langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle$, portanto,

$$\langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle = i \frac{\lambda_{so}}{N} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \xi e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)}. \quad (4.37)$$

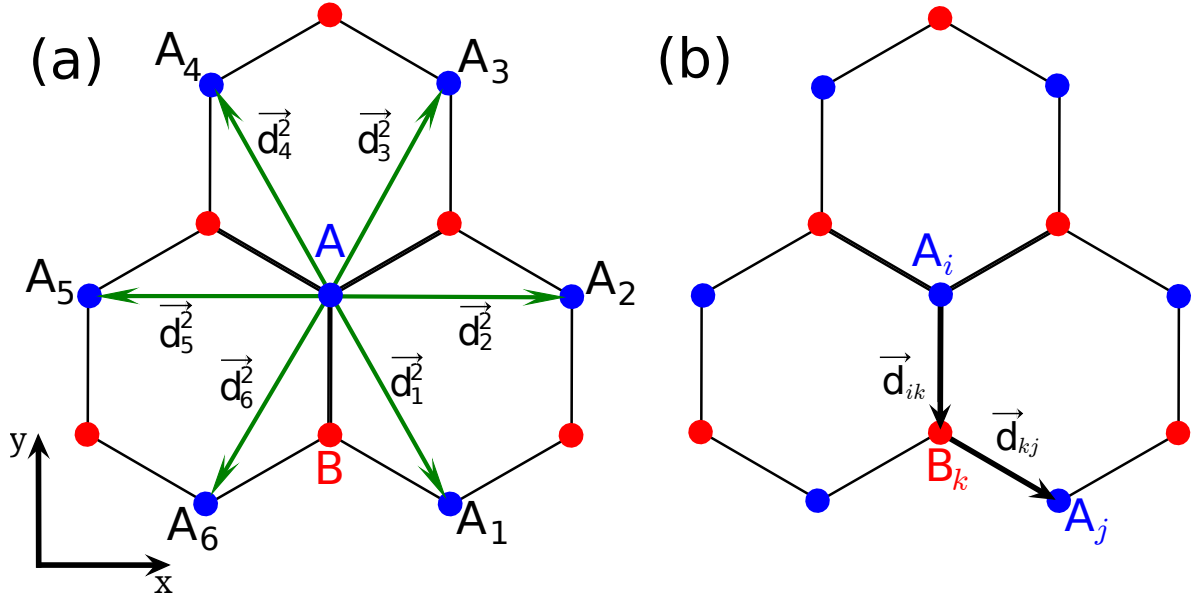


Figura 4.5: Segundos vizinhos de um sítio no grafeno em (a); vetores \vec{d}_{kj} e \vec{d}_{ik} do hamiltoniano.

Considerando que, como na seção anterior, a expressão $\vec{R}_j - \vec{R}_i$ é a distância entre dois átomos mas que agora são segundos vizinhos, e que tem-se seis segundos vizinhos, conforme a figura 4.5(a), pode-se definir um novo vetor \vec{d}_l^2 em que $l = 1 \dots 6$ que conecta um átomo no sítio A_i com um no sítio A_j . A expressão para cada um é dada por:

$$\vec{d}_1^2 = \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} - \frac{3}{2}\hat{j}; \quad (4.38)$$

$$\vec{d}_2^2 = \sqrt{3}\hat{i}; \quad (4.39)$$

$$\vec{d}_3^2 = \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + \frac{3}{2}\hat{j}; \quad (4.40)$$

$$\vec{d}_4^2 = -\vec{d}_1^2; \quad (4.41)$$

$$\vec{d}_5^2 = -\vec{d}_2^2; \quad (4.42)$$

$$\vec{d}_6^2 = -\vec{d}_3^2. \quad (4.43)$$

Esses vetores aparecem para todos os N átomos A_i do grafeno. Substituindo esses valores na expressão 4.37, tem-se

$$\langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle = i\lambda_{so} \left(-e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_1^2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_2^2} - e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_3^2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{d}_4^2} - e^{-i\vec{k} \cdot \vec{d}_5^2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_6^2} \right) \quad (4.44)$$

e com os vetores \vec{d}_l^z nessa equação, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle &= \\ &= i\lambda_{so} \left(-e^{ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} - ik_y \frac{3}{2}} + e^{ik_x \sqrt{3}} - e^{ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} + ik_y \frac{3}{2}} + e^{-ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} + ik_y \frac{3}{2}} \right. \\ &\quad \left. - e^{-ik_x \sqrt{3}} + e^{-ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} - ik_y \frac{3}{2}} \right) \end{aligned} \quad (4.45)$$

separando-se as exponenciais em k_x e k_y e adicionando e subtraindo 1,

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle &= \\ &= i\lambda_{so} \left(-e^{ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} - ik_y \frac{3}{2}} + e^{ik_x \sqrt{3}} - e^{ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} + ik_y \frac{3}{2}} - 1 \right. \\ &\quad \left. - e^{-ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} + ik_y \frac{3}{2}} - e^{-ik_x \sqrt{3}} + e^{-ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} - ik_y \frac{3}{2}} \right). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Então, se coloca as exponenciais em evidência, de modo que

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle &= \\ &= i\lambda_{so} \left(e^{ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} a} - e^{-ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} a} \right) \left\{ e^{ik_y \frac{3}{2} a} + e^{-ik_y \frac{3}{2} a} - e^{ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} a} - e^{-ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} a} \right\} \end{aligned} \quad (4.47)$$

E como $i = -1/i$, multiplica-se e divide-se a equação por 4

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle &= \\ &= -4\lambda_{so} \left(\frac{e^{ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} a} - e^{-ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} a}}{2i} \right) \left\{ \frac{e^{ik_y \frac{3}{2} a} + e^{-ik_y \frac{3}{2} a}}{2} - \frac{e^{ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} a} + e^{-ik_x \frac{\sqrt{3}}{2} a}}{2} \right\}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Dessa maneira, com o uso das fórmulas de Euler para cossenos e senos, finalmente

$$\langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle = -4\lambda_{so} \text{sen} \left(k_x \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \left\{ \cos \left(k_y \frac{3}{2} \right) - \cos \left(\frac{k_x \sqrt{3}}{2} \right) \right\}. \quad (4.49)$$

O termo $\langle \phi_A, \downarrow | H_{so} | \phi_A, \downarrow \rangle$, de acordo com a equação 4.36, terá somente um sinal diferente, portanto:

$$\langle \phi_A, \downarrow | H_{so} | \phi_A, \downarrow \rangle = 4\lambda_{so} \text{sen} \left(k_x \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \left\{ \cos \left(k_y \frac{3}{2} \right) - \cos \left(\frac{k_x \sqrt{3}}{2} \right) \right\}. \quad (4.50)$$

Os termos de sítio B, $\langle \phi_B, s | H_{so} | \phi_B, s \rangle$ podem ser calculados de maneira semelhante aos do sítio A. Os vetores \vec{d}_l^s , que ligam cada átomo aos seus segundos vizinhos são idênticos.

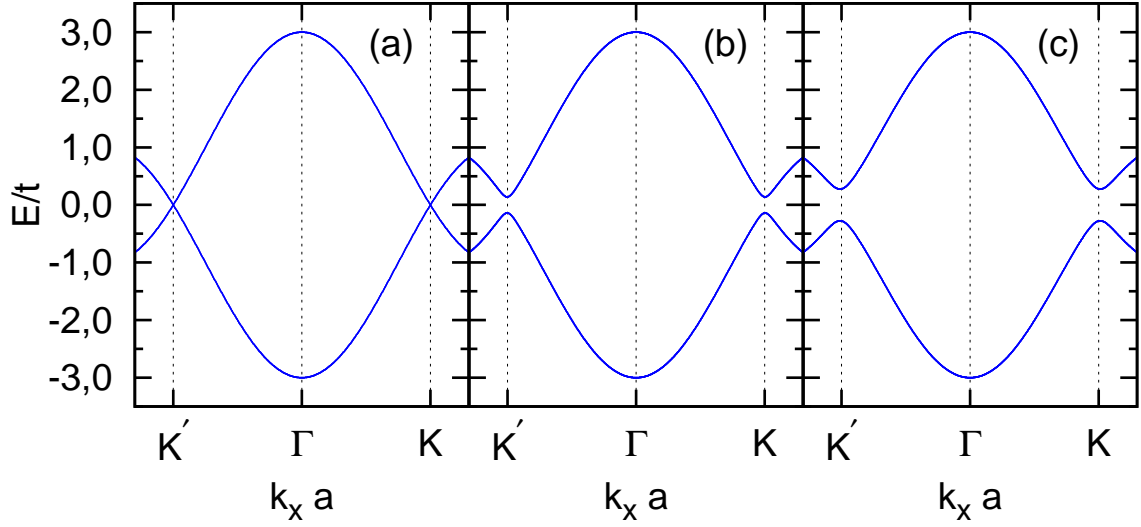


Figura 4.6: 1ªBZ do grafeno com parâmetro de acoplamento $\lambda_{so} = 0$ em (a), $\lambda_{so} = 0,03t$ em (b) e $\lambda_{so} = 0,06t$ em (c).

A única diferença são os sinais dos produtos vetoriais $\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}$, que se invertem. Assim,

$$\langle \phi_{A,\uparrow} | H_{so} | \phi_{A,\uparrow} \rangle = - \langle \phi_{B,\uparrow} | H_{so} | \phi_{B,\uparrow} \rangle ; \quad (4.51)$$

$$\langle \phi_{A,\downarrow} | H_{so} | \phi_{A,\downarrow} \rangle = - \langle \phi_{B,\downarrow} | H_{so} | \phi_{B,\downarrow} \rangle . \quad (4.52)$$

Se considerar-se que

$$t_{so} = 4\lambda_{so} \text{sen} \left(\frac{k_x \sqrt{3}}{2} \right) \left\{ \cos \left(\frac{3k_y}{2} \right) - \cos \left(\frac{k_x \sqrt{3}}{2} \right) \right\} , \quad (4.53)$$

a matriz do hamiltoniano para o grafeno incluindo o efeito intrínseco de spin-órbita é

$$H = \begin{pmatrix} t_{so} & -tf & 0 & 0 \\ -tf^* & -t_{so} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_{so} & -tf \\ 0 & 0 & -tf^* & t_{so} \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

e as energias serão dadas pela equação de Schrödinger:

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{so} & -tf & 0 & 0 \\ -tf^* & -t_{so} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_{so} & -tf \\ 0 & 0 & -tf^* & t_{so} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix} . \quad (4.55)$$

A diagonalização da matriz do hamiltoniano fornece as energias das bandas de condução e valência. Na figura 4.6, em (a) é mostrada cada uma dessas bandas quando o acoplamento spin-órbita intrínseco é nulo (para comparação), quando $\lambda_{so} = 0,03t$ em (b) e $\lambda_{so} = 0,06t$ em (c). Claramente o aumento do valor de λ_{so} aumenta o *gap* entre as duas bandas no grafeno. Nesse caso não existem estados de borda, como acontecem com as nanofitas zigzag que será vista no próximo capítulo, então esse sistema ainda não se torna um candidato para observação do efeito Hall quântico de spin. As simetrias observadas no grafeno, partícula-buraco e de simetria de inversão temporal, se mantém. Os pontos K e K' não são deslocados por esse tipo de efeito, permanecendo nos lugares de origem.

4.3 Acoplamento de spin-órbita Rashba

O acoplamento de spin-órbita Rashba pode se originar da aplicação de um campo elétrico externo perpendicular [73], da interação do grafeno com o substrato [74] ou da curvatura da folha [75, 76, 77]. O hamiltoniano do grafeno com acoplamento de spin-órbita Rashba é escrito como:

$$H = H_h + H_R, \quad (4.56)$$

em que H_h representa o termo de *hopping* dado pela equação 4.6, e H_R dado por:

$$H_R = i \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{ss'} \{ |A_i, s\rangle (\vec{u}_{ij} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_j, s'| + h.c. \} \quad (4.57)$$

sendo $\vec{\gamma}$ o vetor o qual as componentes representam as matrizes de spin de Pauli, a primeira somatória feita sobre os três primeiros vizinhos do grafeno e somatória sobre s e s' sobre os spins eletrônicos. O termo \vec{u}_{ij} é definido por [73]

$$\vec{u}_{ij} = \frac{e}{2m^2 a v_F} \vec{E} \times \vec{R}_{ij} = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{k} \times \vec{R}_{ij}, \quad (4.58)$$

em que e é a carga do elétron, m a massa de repouso do elétron, a a distância entre dois átomos de carbono e v_F a velocidade no nível de Fermi. O vetor $\vec{R}_{ij} = \vec{R}_j - \vec{R}_i$ dá diferença entre a posição de dois átomos da rede. Como discutido na seção 4.1 o vetor \vec{R}_{ij} é transformado no vetor \vec{d}_l , com ($l = 1, 2, 3$) que dá as distâncias de um átomo a seus três primeiros vizinhos,

$$\vec{d}_1 = -a\hat{j}; \quad (4.59)$$

$$\vec{d}_2 = +\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}; \quad (4.60)$$

$$\vec{d}_3 = -\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}. \quad (4.61)$$

Assim, tem-se

$$\vec{u}_l = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{k} \times \vec{d}_l, \quad (4.62)$$

em que o parâmetro de Rashba λ_R , o qual dá a intensidade do efeito Rashba spin-órbita sobre um sistema é definido como

$$\lambda_R = \frac{e}{2m^2 v_F} E. \quad (4.63)$$

O produto $(\vec{u}_l \cdot \vec{\gamma})$ é feito para cada um dos três vizinhos. Para o primeiro, tem-se

$$\vec{u}_1 \cdot \vec{\gamma} = \left[-\frac{\lambda_R}{a} \hat{k} \times (-a\hat{j}) \right] \cdot \vec{\gamma} = -\lambda_R \hat{i} \cdot \vec{\gamma} = -\lambda_R \gamma_x; \quad (4.64)$$

para o segundo,

$$\begin{aligned} \vec{u}_2 \cdot \vec{\gamma} &= \left[-\frac{\lambda_R}{a} \hat{k} \times \left(\frac{a_0}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \right) \right] \cdot \vec{\gamma} \\ &= \left(-\lambda_R \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} + \lambda_R \frac{1}{2} \hat{i} \right) \cdot \vec{\gamma} \\ &= \frac{1}{2} \lambda_R \gamma_x - \frac{\sqrt{3}}{2} \lambda_R \gamma_y; \end{aligned} \quad (4.65)$$

e, finalmente, para o terceiro

$$\begin{aligned} \vec{u}_3 \cdot \vec{\gamma} &= \left[-\frac{\lambda_R}{a} \hat{k} \times \left(-\frac{a_0}{2} \hat{i} + \frac{a}{2} \hat{j} \right) \right] \cdot \vec{\gamma} \\ &= \left(\lambda_R \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{j} + \lambda_R \frac{1}{2} \hat{i} \right) \cdot \vec{\gamma} \\ &= \frac{1}{2} \lambda_R \gamma_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \lambda_R \gamma_y. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Agora, para se calcular o termo $\langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle$ do hamiltoniano, faz-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \frac{i}{N} \sum_{nn'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'}, \uparrow | H_R | B_n, \downarrow \rangle \\ &= \frac{i}{N} \sum_{nn'} \sum_{ss'} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'}, \uparrow | A_i, s \rangle (\vec{u}_{ij} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_j, s' | B_n, \downarrow \rangle. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Separando-se as partes de spin e com os produtos $\langle A_{n'} | A_i \rangle = \delta_{n'i}$, chega-se a

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= \frac{i}{N} \sum_{nn'} \sum_{ss'} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \delta_{n'i} \langle \uparrow | s \rangle (\vec{u}_{ij} \cdot \vec{\gamma}) \langle s' | \downarrow \rangle \delta_{jn}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Então faz-se as substituições $(\vec{R}_j - \vec{R}_i) \rightarrow \vec{d}_l$ e $\vec{u}_{ij} \rightarrow \vec{u}_l$, para se obter:

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= i \sum_{ss'} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_l} \langle \uparrow | s \rangle (\vec{u}_l \cdot \vec{\gamma}) \langle s' | \downarrow \rangle. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Com a aplicação das equações 4.64, 4.65 e 4.66, chega-se a

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= i \left\{ e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_1} \langle \uparrow | \uparrow \rangle (-\lambda_R \gamma_x) \langle \downarrow | \downarrow \rangle \right. \\ &+ e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_2} \langle \uparrow | \uparrow \rangle \left(\frac{1}{2} \lambda_R \gamma_x - \frac{\sqrt{3}}{2} \lambda_R \gamma_y \right) \langle \downarrow | \downarrow \rangle \\ &\left. + e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_3} \langle \uparrow | \uparrow \rangle \left(\frac{1}{2} \lambda_R \gamma_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \lambda_R \gamma_y \right) \langle \downarrow | \downarrow \rangle \right\} \end{aligned} \quad (4.70)$$

Em que, agora, se substitui os vetores \vec{d}_l das equações 4.59, 4.60 e 4.61:

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= i \lambda_R \left\{ e^{i\vec{k} \cdot (-aj)} (-\gamma_x) + e^{i\vec{k} \cdot (\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j})} \left(\frac{1}{2} \lambda_R \gamma_x - \frac{\sqrt{3}}{2} \lambda_R \gamma_y \right) \right. \\ &\left. + e^{i\vec{k} \cdot (-\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j})} \left(\frac{1}{2} \lambda_R \gamma_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \lambda_R \gamma_y \right) \right\}, \end{aligned} \quad (4.71)$$

e realiza-se os produtos de spin,

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= i \lambda_R \left\{ -e^{-ik_y a} + e^{ik_x \frac{a_0}{2} + ik_y \frac{a}{2}} \left(\frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right. \\ &\left. + e^{-ik_x \frac{a_0}{2} + ik_y \frac{a}{2}} \left(\frac{1}{2} - i \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

As exponenciais em k_y podem ser colocadas em evidência, de modo que

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= i \lambda_R \left\{ -e^{-ik_y 3a/2} - \left(-\frac{1}{2} - i \frac{\sqrt{3}}{2} \right) e^{ik_x \frac{a_0}{2}} - \left(-\frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2} \right) e^{-ik_x \frac{a_0}{2}} \right\} e^{ik_y \frac{a}{2}}; \end{aligned} \quad (4.73)$$

e, reorganizando os termos, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= -i \lambda_R \left\{ e^{-ik_y 3a/2} - \frac{1}{2} \left(e^{ik_x \frac{a_0}{2}} + e^{-ik_x \frac{a_0}{2}} \right) - i \frac{\sqrt{3}}{2} \left(e^{ik_x \frac{a_0}{2}} - e^{-ik_x \frac{a_0}{2}} \right) \right\} e^{ik_y \frac{a}{2}}. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Considerando-se que

$$2 \cos \left(k_x \frac{a_0}{2} \right) = e^{ik_x \frac{a_0}{2}} + e^{-ik_x \frac{a_0}{2}}; \quad (4.75)$$

$$2i \operatorname{sen} \left(k_x \frac{a_0}{2} \right) = e^{ik_x \frac{a_0}{2}} - e^{-ik_x \frac{a_0}{2}}; \quad (4.76)$$

a expressão 4.74 se torna

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= -i\lambda_R \left\{ e^{-ik_y 3a/2} - \frac{1}{2} 2\cos\left(k_x \frac{a_0}{2}\right) + \frac{\sqrt{3}}{2} 2\text{sen}\left(k_x \frac{a_0}{2}\right) \right\} e^{ik_y \frac{a}{2}}; \end{aligned} \quad (4.77)$$

e, como

$$\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = -\frac{1}{2}, \quad (4.78)$$

$$\text{sen}\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad (4.79)$$

tem-se que

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= -i\lambda_R \left\{ e^{-ik_y 3a/2} + 2\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) \cos\left(k_x \frac{a_0}{2}\right) + 2\text{sen}\left(\frac{2\pi}{3}\right) \text{sen}\left(k_x \frac{a_0}{2}\right) \right\} e^{ik_y \frac{a}{2}}. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Com o uso da igualdade trigonométrica

$$\cos(a-b) = \cos(a)\cos(b) + \text{sen}(a)\text{sen}(b), \quad (4.81)$$

a expressão final para o elemento de matriz $\langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle$ fica

$$\langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle = -i\lambda_R \left\{ e^{-ik_y 3a/2} + 2\cos\left(k_x \frac{a_0}{2} - \frac{2\pi}{3}\right) \right\} e^{ik_y \frac{a}{2}}. \quad (4.82)$$

Para se realizar o cálculo do termo $\langle \phi_B, \uparrow | H_R | \phi_A, \downarrow \rangle$ tem-se que levar em conta que os primeiros vizinhos de um sítio B são

$$\vec{d}_1 = a\hat{j} \quad (4.83)$$

$$\vec{d}_2 = +\frac{a_0}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} \quad (4.84)$$

$$\vec{d}_3 = -\frac{a_0}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j}. \quad (4.85)$$

e que, por isso, os vetores \vec{u}_l serão

$$\vec{u}_1 = \lambda_R \gamma_x \quad (4.86)$$

$$\vec{u}_2 = -\frac{1}{2}\lambda_R \gamma_x - \frac{\sqrt{3}}{2}\lambda_R \gamma_y \quad (4.87)$$

$$\vec{u}_3 = -\frac{1}{2}\lambda_R \gamma_x + \frac{\sqrt{3}}{2}\lambda_R \gamma_y. \quad (4.88)$$

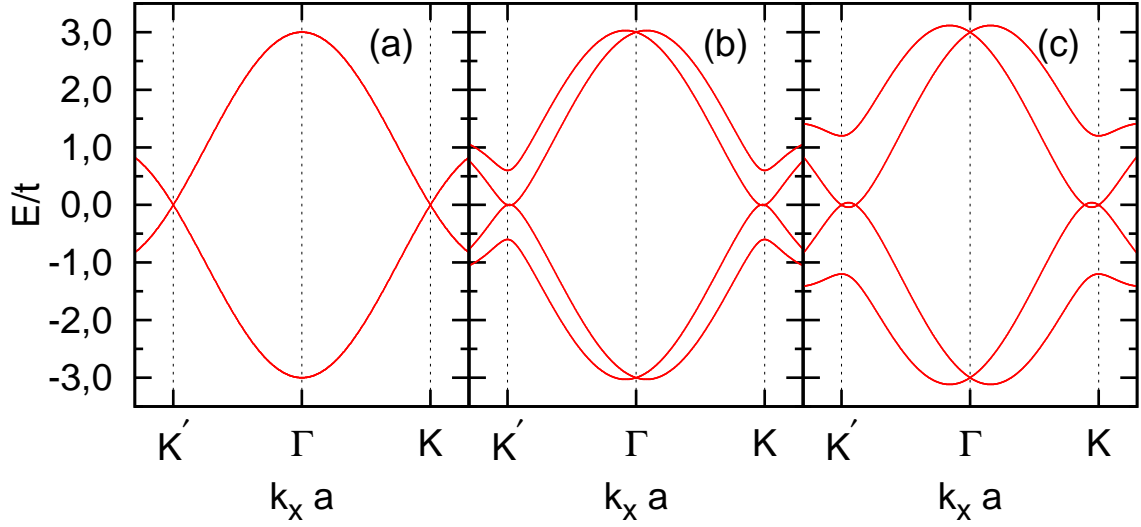


Figura 4.7: Projeção do eixo $k_x a$ da 1ªBZ do grafeno com parâmetro de acoplamento $\lambda_R = 0$ em (a), $\lambda_R = 0, 20t$ em (b) e $\lambda_R = 0, 40t$ em (c).

Dessa forma, a equação 4.71 será, agora para $\langle \phi_B, \uparrow | H_R | \phi_A, \downarrow \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \phi_B, \uparrow | H_R | \phi_A, \downarrow \rangle = i\lambda_R \left\{ e^{i\vec{k}\cdot(a\hat{j})}\gamma_x + e^{i\vec{k}\cdot(\frac{a_0}{2}\hat{i}-\frac{a}{2}\hat{j})}\left(-\frac{1}{2}\lambda_R\gamma_x - \frac{\sqrt{3}}{2}\lambda_R\gamma_y\right) \right. \\ \left. + e^{i\vec{k}\cdot(-\frac{a_0}{2}\hat{i}-\frac{a}{2}\hat{j})}\left(-\frac{1}{2}\lambda_R\gamma_x + \frac{\sqrt{3}}{2}\lambda_R\gamma_y\right) \right\}; \end{aligned} \quad (4.89)$$

E com essas mudanças, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_B, \uparrow | H_R | \phi_A, \downarrow \rangle = \\ = i\lambda_R \left\{ e^{ik_y 3a/2} + 2\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right)\cos\left(k_x \frac{a_0}{2}\right) - 2i\operatorname{sen}\left(\frac{2\pi}{3}\right)\operatorname{sen}\left(k_x \frac{a_0}{2}\right) \right\} e^{-ik_y \frac{a}{2}}, \end{aligned} \quad (4.90)$$

por fim,

$$\langle \phi_B, \uparrow | H_R | \phi_A, \downarrow \rangle = i\lambda_R \left\{ e^{ik_y 3a/2} + 2\cos\left(k_x \frac{a_0}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) \right\} e^{-ik_y \frac{a}{2}} \quad (4.91)$$

Se considerar-se que

$$\varphi_+ = \lambda_R \left\{ e^{ik_y 3a/2} + 2\cos\left(k_x \frac{a_0}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) \right\} e^{-ik_y \frac{a}{2}} \quad (4.92)$$

$$\varphi_- = \lambda_R \left\{ e^{-ik_y 3a/2} + 2\cos\left(k_x \frac{a_0}{2} - \frac{2\pi}{3}\right) \right\} e^{ik_y \frac{a}{2}}, \quad (4.93)$$

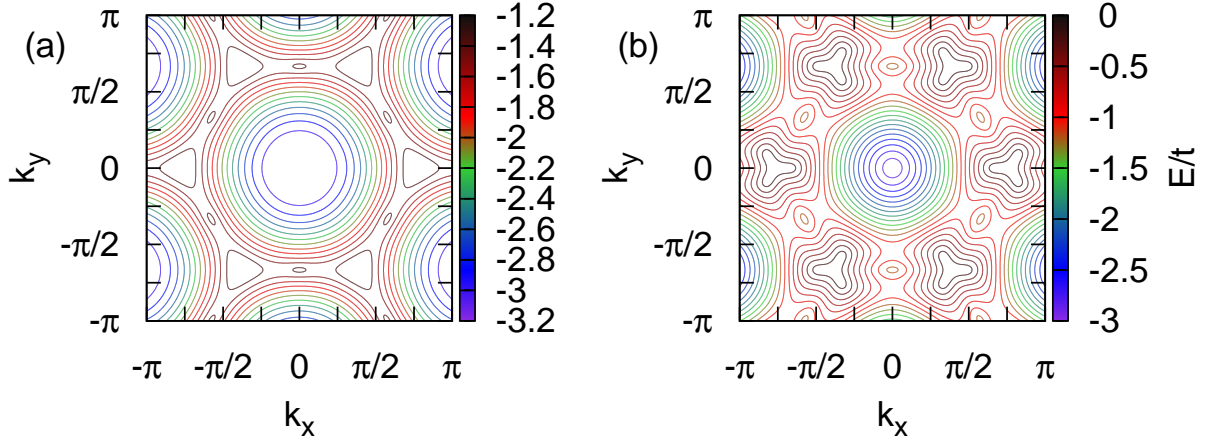


Figura 4.8: Bandas de valência da 1ªBZ do grafeno com parâmetro de acoplamento $\lambda_R = 0, 40t$ mostrando os dois níveis de energia degenerados.

a matriz do hamiltoniano para o grafeno incluindo o efeito Rashba de spin-órbita é

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -tf & 0 & -i\varphi_- \\ -tf^* & 0 & i\varphi_+^* & 0 \\ 0 & -i\varphi_+ & 0 & -tf \\ i\varphi_-^* & 0 & -tf^* & 0 \end{pmatrix} \quad (4.94)$$

em que φ^* representa o complexo conjugado de φ . As energias serão dadas pela equação de Schrödinger:

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -tf & 0 & -i\varphi_- \\ -tf^* & 0 & i\varphi_+ & 0 \\ 0 & -i\varphi_+^* & 0 & -tf \\ i\varphi_-^* & 0 & -tf^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.95)$$

Nota-se, da figura 4.7(b) e (c) que, quando o parâmetro de acoplamento é $\lambda_R = 0, 20t$ e $\lambda_R = 0, 40t$, respectivamente, há quebra da degenerescência de spin, em comparação com a figura 4.7(a) Essa característica também pode ser vista na figura 4.8. E próximo aos pontos K e K' os spins das bandas se misturam [78], além de mudarem sua posição. Mesmo assim, a simetria de inversão temporal é mantida, uma vez que $E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$; e a simetria partícula-buraco se mantém inalterada, pois $E \rightarrow -E$, o que pode ser observado através da simetria entre as bandas de condução e valência [73].

4.4 Campo de exchange

A interação de exchange, que acontece entre spins eletrônicos, pode ser observada no grafeno com a estabilização de uma fase ferromagnética, quando este apresenta baixa dopagem [79]. Cálculos de *ab initio* mostraram recentemente que grafeno dopado com Fe em sua superfície pode possuir ferromagnetismo intrínseco [78]. Essa interação surge quando a mudança no spin de um elétron muda a repulsão eletrostática entre elétrons próximos a ele. Essa interação adiciona um termo no hamiltoniano que inclui o acoplamento do movimento orbital e do spin dos elétrons com o campo de exchange. Neste trabalho, para simplificação dos cálculos e não perdemos generalidade, somente a parte de spin será levado em consideração. Assim, o hamiltoniano de exchange será,

$$H_{ex} = \lambda_{ex} \sum_{i;s} \{ |A_i, s\rangle \gamma_z \langle A_i, s| + h.c. \}, \quad (4.96)$$

com o campo de exchange apresentando parâmetro λ_{ex} , proporcional a $J_{eff}\mu'_z$, sendo J_{eff} a interação de exchange e ao campo magnético gerado pelo momento magnético efetivo μ'_z do elétron que se associa ao campo de exchange. Assim, H_{ex} descreve a resposta do momento magnético do spin de um elétron ao campo de exchange como no efeito Zeeman [80]. O termo γ_z é a matriz de Pauli.

Partindo da função de onda eletrônica para um elétron,

$$|\phi_A, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n,s} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} |A_n, s\rangle, \quad (4.97)$$

o produto $\langle A, s | H_{ex} | A, s \rangle$ pode ser calculado

$$\langle A, s | H_{ex} | A, s \rangle = \frac{\lambda_{ex}}{N} \sum_{n,n'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'}, s | (|A_i, s\rangle \gamma_z \langle A_i, s|) | A_n, s \rangle. \quad (4.98)$$

Separando a parte de spin, se obterá

$$\begin{aligned} \langle A, s | H_{ex} | A, s \rangle &= \frac{\lambda_{ex}}{N} \sum_{n,n'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \delta_{n'i} \langle s | (|s\rangle \gamma_z \langle s|) | s \rangle \delta_{in} \\ &= \frac{1}{N} \sum_i e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_i - \vec{R}_i)} \langle s | (|s\rangle \gamma_z \langle s|) | s \rangle \end{aligned} \quad (4.99)$$

Na exponencial da equação 5.101 observa-se o termo $\vec{R}_i - \vec{R}_i$, que é igual a zero. Isso

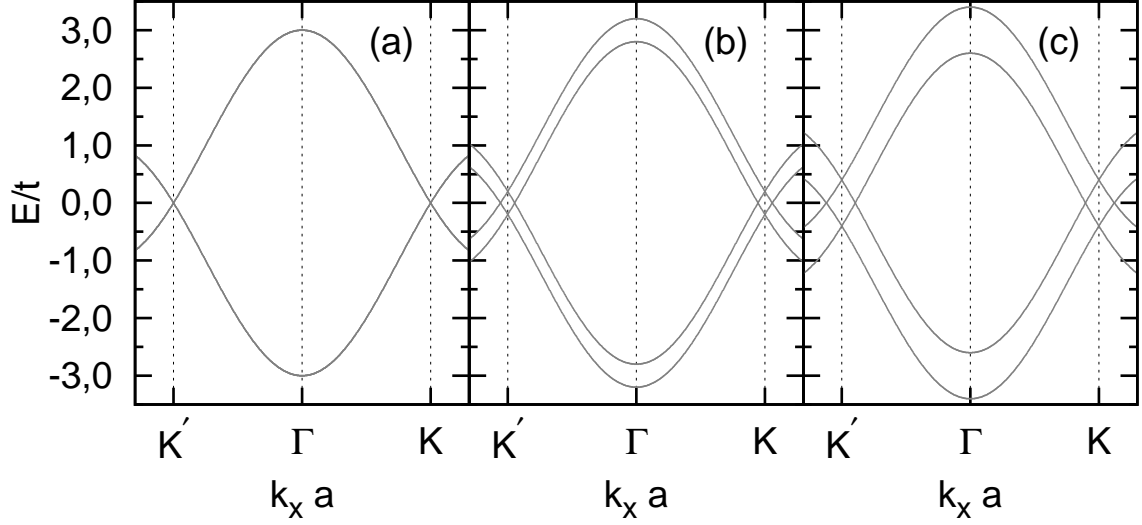


Figura 4.9: Perfis da 1ªBZ com $k_y = 0$: $\lambda_{ex} = 0$ em (a), $\lambda_{ex} = 0, 20t$ em (b) e $\lambda_{ex} = 0, 40t$ em (c).

significa que esse termo do hamiltoniano não inclui as distâncias entre os átomos de primeiros ou segundos vizinhos. Esse resultado é esperado da expressão do hamiltoniano 4.96. O termo $\langle B, s | H_{ex} | B, s \rangle$ terá, portanto, o mesmo resultado da equação 5.101. O único termo que muda a expressão é o produto de spin, assim:

$$\langle C, \uparrow | H_{ex} | C, \uparrow \rangle = \lambda_{ex} \quad (4.100)$$

$$\langle C, \downarrow | H_{ex} | C, \downarrow \rangle = -\lambda_{ex} \quad (4.101)$$

em que $C = A, B$ representa um dos dois sítios. A matriz do hamiltoniano para o grafeno, considerando-se o efeito do campo de exchange, tem a forma:

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_{ex} & -tf & 0 & 0 \\ -tf^* & \lambda_{ex} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_{ex} & -tf \\ 0 & 0 & -tf^* & -\lambda_{ex} \end{pmatrix} \quad (4.102)$$

e as energias serão dadas pela equação de Schrödinger:

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_{ex} & -tf & 0 & 0 \\ -tf^* & \lambda_{ex} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_{ex} & -tf \\ 0 & 0 & -tf^* & -\lambda_{ex} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix} \quad (4.103)$$

Com a aplicação do exchange, as equações geram a dispersão de energia como visto na figura 4.9. Em comparação à figura 4.9(a), em que não foi aplicado exchange e as bandas de energia são degeneradas, os casos 4.9(b) e 4.9(c) mostram que as bandas de spin up (down) são deslocadas para cima (baixo) e as quatro bandas se cruzam próximo ao ponto K e K'.

Quando o campo de exchange é aplicado ao grafeno, a simetria de inversão temporal é quebrada, pois nota-se na figura 4.9 que $E(\vec{k}, \uparrow) \neq E(-\vec{k}, \downarrow)$. Inicialmente, pode-se pensar que o grafeno ou nanofita que esteja sujeito a um campo de exchange não deve, portanto, suportar o estado Hall quântico de spin, pois este seria protegido pela simetria de inversão temporal [9, 74]. Mas descobriu-se um estado semelhante, chamado de pseudo-estado Hall quântico de spin ou estado Hall quântico de spin com simetria de inversão temporal quebrada [80] em que foi possível se observar correntes de spin polarizada nas bordas da nanofita. Além disso, o campo de exchange é fundamental para o controle da transição entre estados eletrônicos, de Hall quântico anômalo para Hall quântico de spin [16].

Capítulo 5

O modelo de tight-binding aplicado às nanofitas

5.1 Tipos de nanofitas de grafeno

O grafeno descrito no capítulo anterior é uma superfície bidimensional com dimensões tão grandes que os efeitos devido às bordas se tornem desprezíveis. Um dos subprodutos gerados a partir do grafeno é a nanofita. Uma nanofita é definida como uma folha de grafeno em que uma de suas dimensões é estreita e a outra aproximadamente infinita. As propriedades únicas que surgem devido a essa dimensão reduzida passam a ser muito importantes na modificação da estrutura de bandas das energia. O formato das bordas e a largura dessa dimensão definem a estrutura eletrônica que se obterá.

A classificação principal das nanofitas é feita com base no desenho das bordas da dimensão que tem largura não-infinita. A figura 5.1 apresenta os dois principais tipos de nanofitas, armchair(a) e zigzag(b). Embora a classificação possa ser feita de outra maneira e com outros tipos de borda, neste capítulo será mostrada a dispersão eletrônica nas nanofitas armchair e suas propriedades e, principalmente, as nanofitas zigzag, que por causa da formação de estados de borda será tratada de maneira mais detalhada neste capítulo e nos que se seguem.

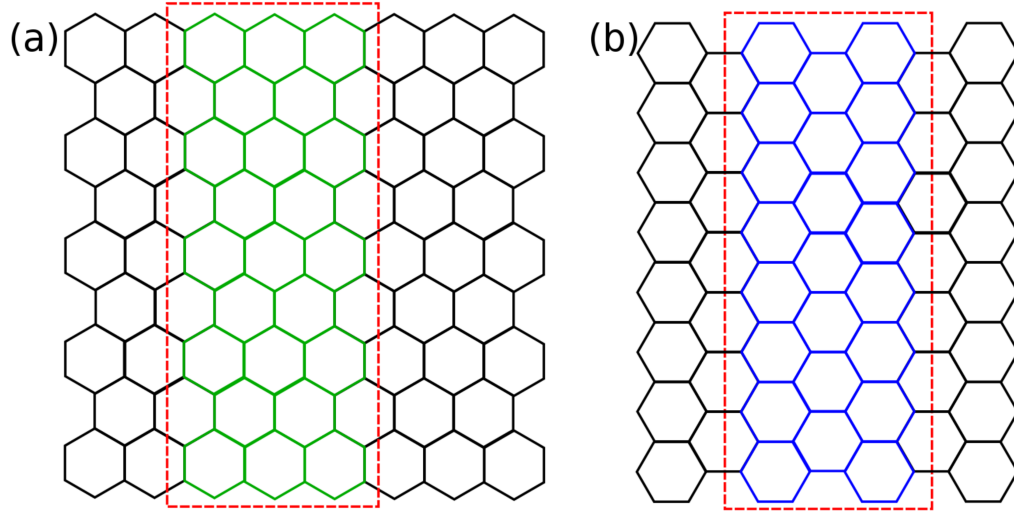


Figura 5.1: Representação das nanofitas armchair (a) e zigzag (b) que podem ser obtidas do grafeno.

5.2 Nanofitas de grafeno com fronteiras armchair

Para se escrever o hamiltoniano de uma nanofita armchair, é necessário definir a sua célula unitária m , como na figura 5.2(a). Assim, pode-se definir os átomos dos sítios A e B dentro dessa célula. Seguindo a figura 5.2(b), um átomo no sítio A é aquele que tem a posição de seus três vizinhos mais próximos descritos pelos vetores

$$\vec{d}_1 = -a\hat{i} \quad (5.1)$$

$$\vec{d}_2 = \frac{a}{2}\hat{i} - \frac{a_0}{2}\hat{j} \quad (5.2)$$

$$\vec{d}_3 = \frac{a}{2}\hat{i} + \frac{a_0}{2}\hat{j}; \quad (5.3)$$

Um átomo no sítio B, por sua vez, deve ter seus primeiros vizinhos descritos pelos vetores

$$\vec{d}_1 = a\hat{i} \quad (5.4)$$

$$\vec{d}_2 = -\frac{a_0}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} \quad (5.5)$$

$$\vec{d}_3 = -\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}; \quad (5.6)$$

A largura da nanofita armchair é definida pelo número de cadeias de átomos de sítios A e B que são paralelas às bordas, como na figura 5.2(a). Uma nanofita armchair possui,

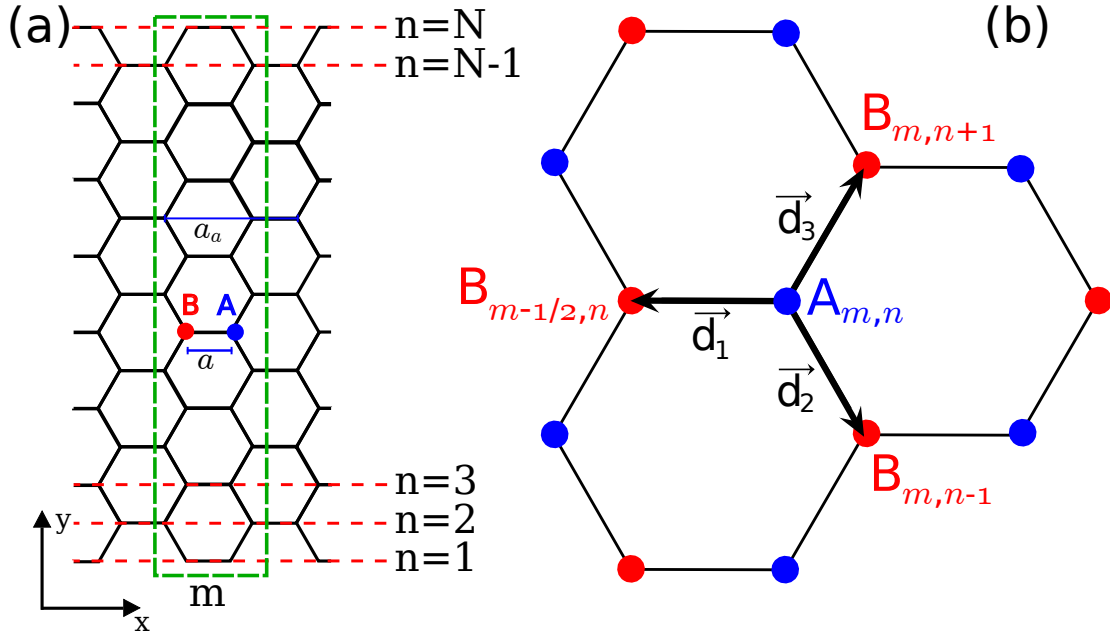


Figura 5.2: Representação da célula unitária de uma nanofitas armchair (a) e primeiros vizinhos de um sítio A (b).

então, N cadeias de largura. Como já dito, o comprimento de uma nanofita é, teoricamente, infinito. A distinção das cadeias de átomos perpendiculares às bordas é feita através da célula unitária da nanofita, que se repete infinitamente. Também na figura 5.2(a), um átomo na célula unitária M tem posição m . Com relação a um átomo de sítio A, o átomo de sítio B que é horizontalmente vizinho a ele, tem identificação $m - \frac{1}{2}$; os outros dois átomos de sítio B que são seus primeiros vizinhos e estão em outra cadeia, $n - 1$ para o verticalmente abaixo e $n + 1$ para o que se encontra acima, e estão na mesma célula unitária possuem identificação m .

O hamiltoniano da nanofita armchair, considerando os seus três vizinhos mais próximos, é definido pela equação

$$H = H_{on} + H_h, \quad (5.7)$$

em que o termo H_{on} representa a energia do sítio (*on site*),

$$H_{on} = \epsilon_0 \sum_{m,n}^N \{ |A_m, n\rangle \langle A_m, n| + |B_m, n\rangle \langle B_m, n| \}; \quad (5.8)$$

o valor dessa energia pode ser definido como $\epsilon_0 = 0$ no nível de Fermi e o outro termo H_h

representa a troca (*hopping*) entre elétrons dos sítios vizinhos mais próximos, sendo

$$H_h = - \sum_{\langle m,n \rangle}^N \{ t_1 |A_m, n\rangle \langle B_{m-1/2}, n| + t_2 |A_m, n\rangle \langle B_m, n-1| + t_3 |A_m, n\rangle \langle B_m, n+1| + h.c \}. \quad (5.9)$$

em que a somatória sobre $\langle m, n \rangle$ é realizada sobre os primeiros vizinhos de um átomo; o produto $|A_m, n\rangle \langle B_{m-1/2}, n|$ representa a troca de elétrons entre um átomo no sítio A, na posição m e n , e um átomo vizinho no sítio B que se encontra na posição $m - \frac{1}{2}$ e n . O parâmetro t é chamado de termo de troca (ou termo de *hopping*), e tem valor igual para os três primeiros vizinhos, $t = 2,7eV$, podendo ser colocado fora da somatória. O termo *h.c* representa o hermitiano conjugado dos termos explicitados, e definem as trocas de sítios B para sítios A.

O vetor de onda eletrônico é escrito como:

$$|\phi_{An}\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m,n}^N e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} |A_m, n\rangle, \quad (5.10)$$

em que

$$\vec{R}_m = m\vec{a}_0 \quad (5.11)$$

é o vetor entre um átomo e o seu vizinho na próxima célula unitária, correspondentes ao mesmo sítio, $\vec{a}_0 = \sqrt{3}a\hat{i}$ é a distância entre esse átomos e chamada constante de rede; $a = 1,42\text{\AA}$ é a distância entre dois átomos mais próximos, de sítios A e B.

Para se encontrar as energias do sistema, encontra-se a sua matriz do hamiltoniano e se resolve a equação de Schrödinger.

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Os termos $\langle \phi_{An''} | H | \phi_{Bn'} \rangle$ são:

$$\langle \phi_{An''} | H_h | \phi_{Bn'} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{m',n'}^N \sum_{m'',n''}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \langle A_{m'',n''} | H_h | A_{m',n'} \rangle. \quad (5.13)$$

Aplicando o hamiltoniano da equação 5.9, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_{An''} | H_h | \phi_{Bn'} \rangle &= \\ &= \frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle}^N \sum_{m,m'}^N \sum_{m'',n''}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \langle A_{m'',n''} | A_m, n \rangle \langle B_{m-1/2}, n | A_{m',n'} \rangle \\ &+ \langle A_{m'',n''} | A_m, n \rangle \langle B_m, n-1 | A_{m',n'} \rangle + \langle A_{m'',n''} | A_m, n \rangle \langle B_m, n+1 | A_{m',n'} \rangle. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Os produtos podem ser resolvidos de acordo com

$$\langle A_{m'',n''} | A_m, n \rangle = \delta_{m''m} \delta_{n''n}, \quad (5.15)$$

assim,

$$\begin{aligned} \langle \phi_{An''} | H_h | \phi_{Bn'} \rangle &= \\ &= -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle}^N \sum_{m,n}^{M,N} \sum_{m',n'}^{M',N'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \delta_{m''m} \delta_{n''n} \{ \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{nn'} \\ &+ \delta_{mm'} \delta_{(n-1)n'} + \delta_{mm'} \delta_{(n+1)n'} \}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Aplicando os deltas para $m'' = m$ e $n'' = n$, tem-se a expressão

$$\begin{aligned} \langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn'} \rangle &= \\ &= -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle}^N \sum_{m',n'}^{M',N'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \{ \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{nn'} + \delta_{mm'} \delta_{(n-1)n'} + \delta_{mm'} \delta_{(n+1)n'} \}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

que mostra três resultados possíveis, uma para cada delta que inclui um índice n :

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle = -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle}^N \sum_{m'}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \delta_{(m-1/2)m'}; \quad (5.18)$$

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n-1)} \rangle = -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle}^N \sum_{m'}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \delta_{mm'}; \quad (5.19)$$

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n+1)} \rangle = -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle}^N \sum_{m'}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \delta_{mm'}. \quad (5.20)$$

O primeiro produto, 5.18, fica

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle = -t \sum_{\langle m,n \rangle}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m-1/2} - \vec{R}_m)}; \quad (5.21)$$

e, como

$$\vec{R}_{m-1/2} - \vec{R}_m = [(m - 1/2) - m]\vec{a}_0 = -\frac{1}{2}a\hat{i}, \quad (5.22)$$

encontra-se

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle = -te^{-ik_x a/2}. \quad (5.23)$$

O segundo termo, 5.19 e o terceiro, 5.20 possuem na exponencial o termo $(\vec{R}_m - \vec{R}_m)$, que é igual a zero. Por esse motivo, o resultado final deles é

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n-1)} \rangle = -t; \quad (5.24)$$

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n+1)} \rangle = -t. \quad (5.25)$$

Os termos $\langle \phi_{Bn} | H_h | \phi_{An'} \rangle$ podem ser encontrados de maneira similar usando-se os vetores definidos na equações 5.4, 5.5 e 5.6; resultando em

$$\langle \phi_{Bn} | H_h | \phi_{An} \rangle = -te^{ik_x a/2}; \quad (5.26)$$

$$\langle \phi_{Bn} | H_h | \phi_{A(n-1)} \rangle = -t; \quad (5.27)$$

$$\langle \phi_{Bn} | H_h | \phi_{A(n+1)} \rangle = -t. \quad (5.28)$$

Assim, a energia é dada pela matriz do hamiltoniano para a nanofita armchair na equação de Schrödinger:

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & C & 0 & -t & 0 & \dots & 0 & 0 \\ C^* & 0 & -t & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & C & 0 & & 0 & 0 \\ -t & 0 & C^* & 0 & -t & & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & C \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & C^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix}, \quad (5.29)$$

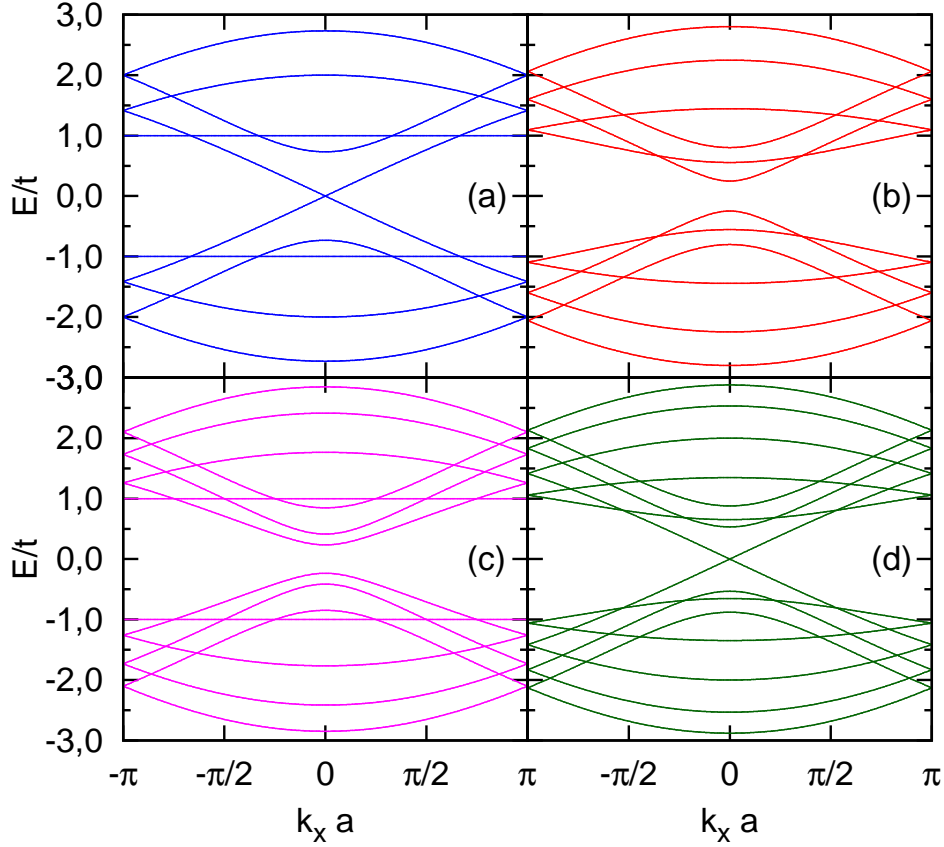


Figura 5.3: Dispersão de energia para nanofitas armchair com largura (a) $N = 5$, (b) $N = 6$, (c) $N = 7$ e (d) $N = 8$. Todas as escalas de energias são iguais.

em que $C = e^{-ik_x a/2}$ e C^* é seu complexo conjugado. Para se encontrar os termos dessa matriz, foram usadas condições de contorno tais que

$$\langle \phi_{A1} | H_h | \phi_{B0} \rangle = 0; \quad (5.30)$$

$$\langle \phi_{B1} | H_h | \phi_{A0} \rangle = 0; \quad (5.31)$$

$$\langle \phi_{A(N+1)} | H_h | \phi_{BN} \rangle = 0; \quad (5.32)$$

$$\langle \phi_{B(N+1)} | H_h | \phi_{AN} \rangle = 0; \quad (5.33)$$

pois as funções de onda devem ser zero nos sítios $|\phi_{A0}\rangle$, $|\phi_{B0}\rangle$, $|\phi_{A(N+1)}\rangle$ e $|\phi_{B(N+1)}\rangle$, já que eles se encontram além das bordas da nanofita armchair.

Como pode-se observar na figura 5.3, nem todas as nanofitas armchair são condutoras. Na verdade, somente aquelas que possuem largura $3n + 2$, sendo n um inteiro, é que vão ter essa característica [35, 81, 82]. Assim, as nanofitas representadas na figura 5.3(a) e 5.3(d) são

64 *CAPÍTULO 5. O MODELO DE TIGHT-BINDING APLICADO ÀS NANOFITAS*
condutoras, possuindo *gap* zero e as que têm sua energia mostradas na figura 5.3(b) e 5.3(c)
são isolantes.

5.3 Nanofitas de grafeno com fronteiras zigzag

Para se escrever o hamiltoniano de uma nanofita zigzag, é necessário definir a sua célula unitária m , como na figura 5.4(a). Assim, pode-se definir os átomos dos sítios A e B dentro dessa célula. Seguindo a figura 5.4(b), um átomo no sítio A é aquele que tem três vizinhos e a posição de cada vizinho pode ser descrita, individualmente, pelos vetores

$$\vec{d}_1 = -a\hat{j} \quad (5.34)$$

$$\vec{d}_2 = +\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j} \quad (5.35)$$

$$\vec{d}_3 = -\frac{a_0}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j}; \quad (5.36)$$

assim como foi feito na seção 4.1 para o grafeno. Portanto, um átomo no sítio B deve ter seus primeiros vizinhos descritos pelos vetores

$$\vec{d}_1 = a\hat{j} \quad (5.37)$$

$$\vec{d}_2 = +\frac{a_0}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j} \quad (5.38)$$

$$\vec{d}_3 = -\frac{a_0}{2}\hat{i} - \frac{a}{2}\hat{j}. \quad (5.39)$$

A largura da nanofita zigzag é definida pelo número de cadeias de átomos de sítios A ou B que são paralelas às bordas, como na figura 5.4(a). Uma nanofita possui, então, N cadeias de largura. Como já dito, o comprimento de uma nanofita é teoricamente infinito. A distinção das cadeias de átomos perpendiculares às bordas é feita através da célula unitária m da nanofita, que se repete infinitamente. Na figura 5.4(a), um átomo na célula unitária possui índice m . Os átomos que são horizontalmente vizinhos a ele, tem identificação $m + \frac{1}{2}$, se estiver a direita do mesmo; ou $m - \frac{1}{2}$, se estiver a esquerda do átomo de posição m . O vizinho abaixo (se for um átomo do tipo B, acima) possui o mesmo índice m .

O hamiltoniano, a partir da nomenclatura definida, é definido pela equação

$$H = H_{on} + H_h, \quad (5.40)$$

em que o termo H_{on} representa a energia do sítio (*on site*),

$$H_{on} = \epsilon_0 \sum_{m,n}^N \{ |A_m, n\rangle \langle A_m, n| + |B_m, n\rangle \langle B_m, n| \}; \quad (5.41)$$

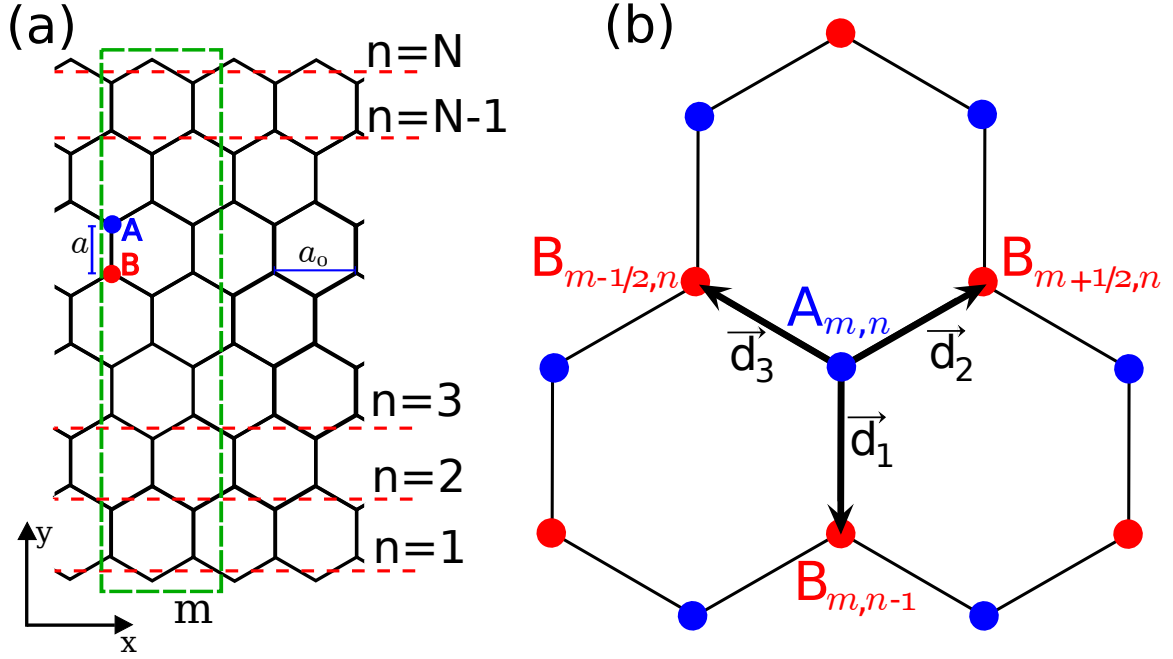


Figura 5.4: Representação da célula unitária de uma nanofita zigzag (a) e primeiros vizinhos de um sítio A (b).

o valor dessa energia pode ser definido como $\epsilon_0 = 0$ no nível de Fermi. O outro termo H_h representa a troca (*hopping*) entre elétrons dos sítios vizinhos mais próximos,

$$H_h = - \sum_{m,n}^N \{ t_1 |A_m, n\rangle \langle B_{m, n-1}| + t_2 |A_m, n\rangle \langle B_{m+1/2, n}| + t_3 |A_m, n\rangle \langle B_{m-1/2, n}| + h.c \}. \quad (5.42)$$

em que o produto $|A_m, n\rangle \langle B_{m-1/2, n}|$ representa a troca de elétrons entre um átomo no sítio A, na posição m e n , e um átomo no sítio B que se encontra na posição $m - \frac{1}{2}$ e n . O parâmetro t é chamado de termo de troca (ou termo de *hopping*), e tem valor igual para os três primeiros vizinhos, $t = 2,7eV$, podendo ser colocado fora da somatória. O termo chamado de *h.c* representa o hermitiano conjugado dos termos explicitados, e definem as trocas de sítios B para sítios A.

O vetor de onda eletrônico da nanofita é quantizado na direção perpendicular às suas bordas. Sua equação, portanto, pode ser escrita como

$$|\phi_{An}\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m,n}^N e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} |A_m, n\rangle \quad (5.43)$$

em que

$$\vec{R}_m = m\vec{a}_0 \quad (5.44)$$

é o vetor entre um átomo e o seu vizinho na próxima célula unitária, correspondentes ao mesmo sítio, $\vec{a}_0 = \sqrt{3}a\hat{i}$ é a distância entre esse átomos e chamada constante de rede; $a = 1,42\text{\AA}$ é a distância entre dois átomos mais próximos, de sítios A e B.

Para se encontrar as energias do sistema, é necessário se encontrar a matriz do hamiltoniano para se resolver a equação de Schrödinger.

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix}. \quad (5.45)$$

O termo $\langle \phi_{An''} | H_h | \phi_{Bn'} \rangle$ do hamiltoniano é

$$\begin{aligned} \langle \phi_{An''} | H_h | \phi_{Bn'} \rangle &= \\ &= -\frac{t}{M} \sum_{m,n;m'n'}^N e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{m'}-\vec{R}_{m''})} \{ \langle A_{m''}, n'' | A_m, n \rangle \langle B_m, n-1 | B, m', n' \rangle + \\ &+ \langle A_{m''}, n'' | A_m, n \rangle \langle B_{m-1/2}, n | B, m', n' \rangle + \\ &+ \langle A_{m''}, n'' | A_m, n \rangle \langle B_{m+1/2}, n | B, m', n' \rangle + h.c. \}. \end{aligned} \quad (5.46)$$

Como os produtos $\langle B | A \rangle$ que aparecem no termo h.c. dão zero, todos os termos hermitianos conjugados do hamiltoniano 6.105 se anulam. Os outros produtos semelhantes a $\langle A_{m''}, n'' | A_m, n \rangle$ resultam em:

$$\langle A_{m''}, n'' | A_m, n \rangle = \delta_{m''m} \delta_{n''n}; \quad (5.47)$$

e com isso,

$$\begin{aligned}
\langle \phi_{An''} | H_h | \phi_{Bn'} \rangle &= \\
&= -\frac{t}{M} \sum_{m,n}^{M,N} \sum_{m',n'}^{M',N'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \delta_{m''m} \delta_{n''n} \{ \delta_{mm'} \delta_{(n-1)n'} \\
&\quad + \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{nn'} + \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{nn'} \}; \tag{5.48}
\end{aligned}$$

aplicando os deltas $\delta_{m''m}$ e $\delta_{n''n}$,

$$\begin{aligned}
\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn'} \rangle &= \\
&= -\frac{t}{M} \sum_{m,n}^{M,N} \sum_{m',n'}^{M',N'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \{ \delta_{mm'} \delta_{(n-1)n'} + \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{nn'} + \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{nn'} \}. \tag{5.49}
\end{aligned}$$

Essa equação mostra dois resultados possíveis, um para cada delta que inclui um índice n :

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n-1)} \rangle = -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle}^N \sum_{m'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \delta_{mm'}; \tag{5.50}$$

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle = -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle}^N \sum_{m'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} (\delta_{(m+1/2)m'} + \delta_{(m-1/2)m'}). \tag{5.51}$$

O primeiro produto, 5.50, tem na exponencial um termo $\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m$ após a aplicação do $\delta_{mm'}$.

Essa diferença é igual a zero e portanto a exponencia tem valor igual a um. Com isso,

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n-1)} \rangle = -t \tag{5.52}$$

o segundo termo, 5.51, tem a exponencial resolvida da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
\exp\{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} \pm \vec{R}_m)\} \delta_{(m\pm 1/2)m'} &= \\
&= \exp\{i\vec{k} \cdot (\{(m' - m)a_0\hat{i}\}) \delta_{(m\pm 1/2)m'} \\
&= \exp\left\{i\vec{k} \cdot \left(m \pm \frac{1}{2} - m\right) a_0\hat{i}\right\} \\
&= \exp\left\{\pm ik_x \frac{a_0}{2}\right\}. \tag{5.53}
\end{aligned}$$

Assim,

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle = -t (e^{-ik_x a_0/2} + e^{ik_x a_0/2}) \tag{5.54}$$

e usando a relação $e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2\cos\theta$, finalmente obtém-se

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle = -2t\cos\left(\frac{k_x a_0}{2}\right). \quad (5.55)$$

Na nanofita zigzag, ainda há duas condições de contorno a serem levadas em consideração:

$$\langle \phi_{A1} | H_h | \phi_{B0} \rangle = 0, \quad (5.56)$$

$$\langle \phi_{A(N+1)} | H_h | \phi_{BN} \rangle = 0, \quad (5.57)$$

pois as funções de onda $|\phi_{A(N+1)}\rangle$ e $|\phi_{B0}\rangle$ se encontram além das bordas da nanofita e devem ter valor nulo.

Como a matriz do hamiltoniano é uma matriz hermitiana, tem-se a igualdade

$$\langle \phi_{Bn} | H_h | \phi_{An} \rangle = \langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle \quad (5.58)$$

$$\langle \phi_{Bn} | H_h | \phi_{A(n-1)} \rangle = \langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n-1)} \rangle \quad (5.59)$$

A equação de energia, com a matriz do hamiltoniano para a nanofita zigzag, é escrita como:

$$E \begin{pmatrix} \Psi_{A1} \\ \Psi_{B1} \\ \Psi_{A2} \\ \Psi_{B2} \\ \vdots \\ \Psi_{AN} \\ \Psi_{BN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & C & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ C & 0 & -t & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & -t & 0 & C & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & 0 & -t & & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & C \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & C & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{A1} \\ \Psi_{B1} \\ \Psi_{A2} \\ \Psi_{B2} \\ \vdots \\ \Psi_{AN} \\ \Psi_{BN} \end{pmatrix}, \quad (5.60)$$

em que se tem $C = -2t\cos\left(\frac{k_x a_0}{2}\right)$

Das figuras 5.5 e 5.6 pode-se ver que a dispersão de energia das nanofitas possuem tantos níveis quantizados quanto fileiras de átomos N . As nanofitas zigzag são condutoras, independentemente do número de fileiras de átomos, diferentemente das nanofitas armchair, vistas na seção anterior. Dos níveis quantizados, quatro (dois estados mais baixos de condução e dois estados mais altos de valência são degenerados) se conectam próximo do ponto em que $k_x a$ é igual a π e $E/t = 0$; esses estados são chamados de estados de borda ou *edge-states* e são representados pelas duas linhas mais próximas (uma acima e uma abaixo) do ponto

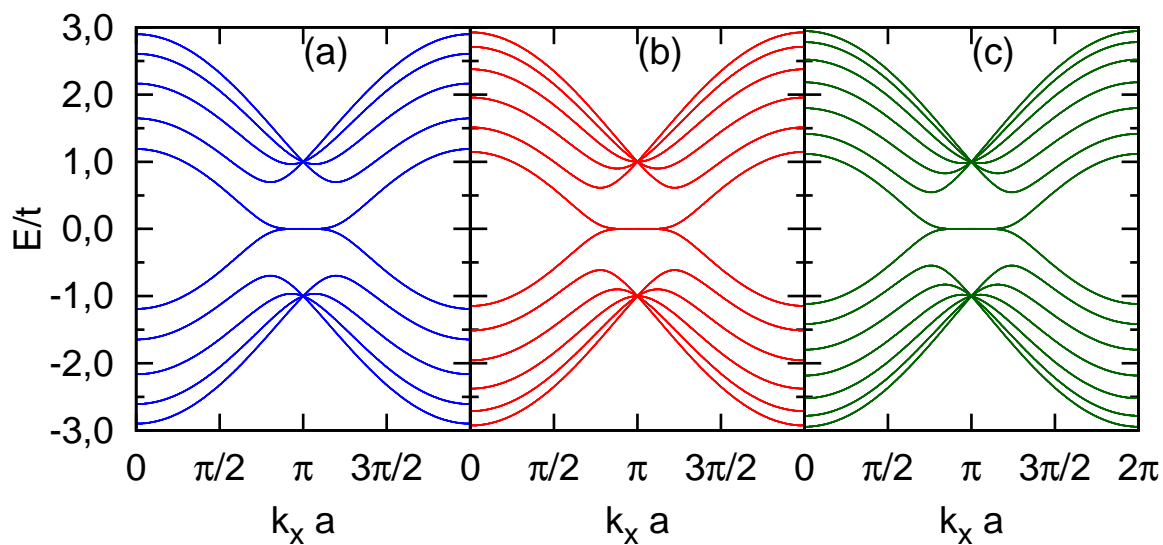


Figura 5.5: Dispersão de energia para nanofitas zigzag com (a) $N = 5$, (b) $N = 6$ e (c) $N = 7$

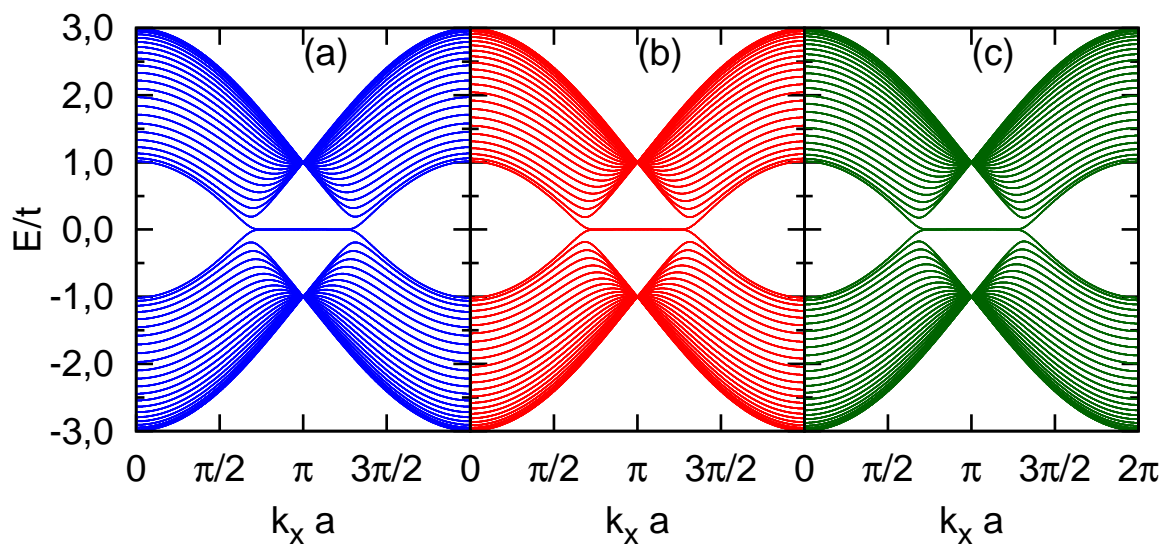


Figura 5.6: Dispersão de energia para nanofitas zigzag com (a) $N = 23$, (b) $N = 24$ e (c) $N =$

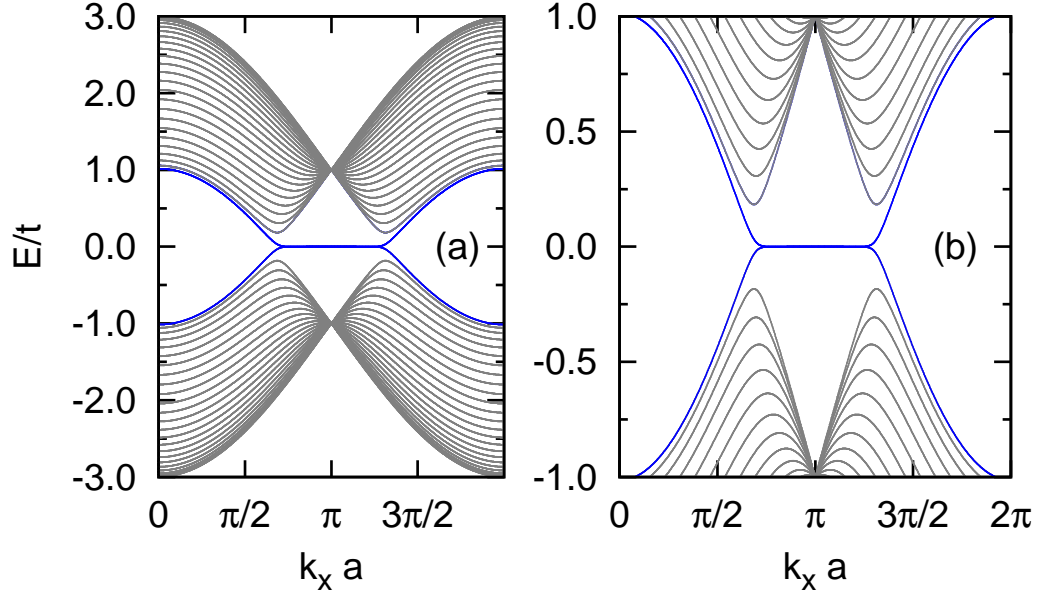


Figura 5.7: Dispersão de energia para uma nanofita zigzag com $N=24$, em uma figura ampla em (a) e aproximada em (b). Os estados que formam os estados de borda são as mais internas.

$E/t = 0, 0$ na figura 5.7 para a nanofita zigzag com $N = 24$. Os outros estados nessa figura são chamados de estados de *bulk*. Esses nomes se devem à distribuição dos elétrons nas fileiras de átomos das nanofitas zigzag, que pode ser verificada através do cálculo de distribuição eletrônica da subseção 5.3.1. Comparando-se os primeiros estados do *bulk*, nas figuras 5.5(a), 5.5(b) e 5.5(c), percebe-se que há uma diminuição na energia desses estados para valores de N maiores. Esse efeito é estendido para as figuras 5.6(a), 5.6(b) e 5.6(c), que possuem o primeiro estado do *bulk* com energia mais baixa com paradas às anteriores, mas a diminuição dessas energias já não é tão evidente.

A figura de dispersão de energia da nanofita zigzag é simétrica e pode ser analisada desse ponto de vista. Na figura 5.7, percebe-se que as bandas de valência, que possuem $E/t < 0$, são iguais às bandas de condução, em que $E > 0$. Essa simetria é chamada de simetria partícula-buraco. Outra simetria importante observada é a simetria de inversão temporal, que tem condição dada por $E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$, ou seja, se o momento do elétron é invertido, seu spin também deve se alterar enquanto a sua energia se mantém a mesma.

Essas simetrias podem ser quebradas dependendo do tipo de efeito considerado e a quebra (ou não) dessas simetrias traz muita informação a respeito da física que está acontecendo nas

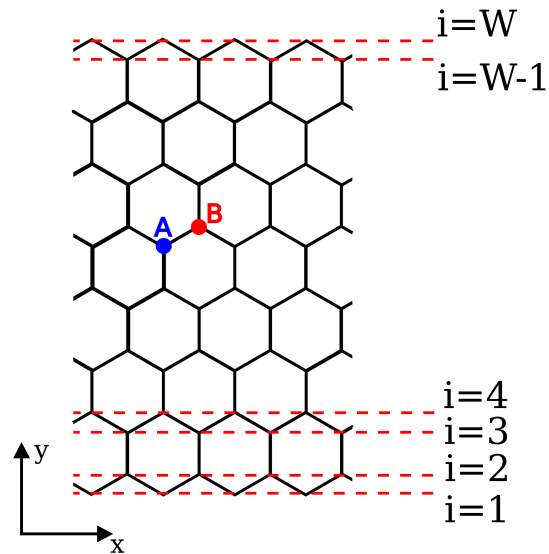


Figura 5.8: Representação da nomenclatura dos sítios de uma nanofita zigzag usada no cálculo de distribuição eletrônica.

nanofitas. Esse tipo de análise será levado em conta nas próximas seções deste trabalho.

5.3.1 Cálculo da distribuição eletrônica

Pode-se analisar a distribuição eletrônica de uma nanofita zigzag, ou seja, como os elétrons estão distribuídos na superfície de uma nanofita, calculando-se a densidade eletrônica em cada sítio ρ_i . Para isso, basta considerar que:

$$\rho_i(n) = \phi_i(n)\phi_i^*(n) \quad (5.61)$$

em que n representa o *edge-state* no nível de Fermi e i é o índice do sítio ao longo da nanofita, definido na figura 5.8, em que se vê que os sítios podem ser numerados de 1 até $2N$. Assim, no caso em que a largura da nanofita for $N = 24$, tem-se que $W = 48$. Essa nomenclatura tem como propósito facilitar a implementação da sub-rotina para esse cálculo.

A figura 5.9(a) é a distribuição eletrônica de um dos estados que compõe os estados de borda. No eixo vertical encontra-se a densidade eletrônica e no eixo horizontal a identificação dos sítios da nanofita. A maior concentração de elétrons está nas bordas, o que caracteriza os estados de borda. Na figura 5.9(b), foi calculada a distribuição eletrônica de um estado do

bulk. Percebe-se que a distribuição é diferente e os elétrons não mostram uma concentração preferencial junto às bordas.

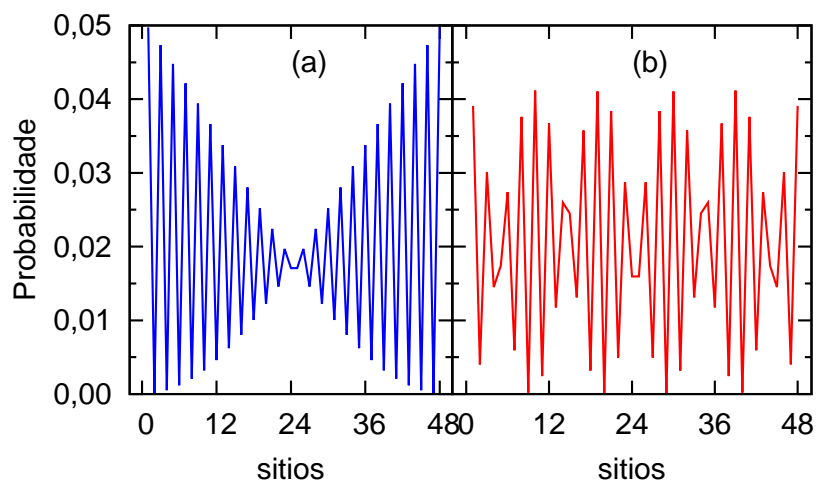


Figura 5.9: Distribuição eletrônica para uma nanofita com $W=48$ de um *edge-state* (a) e de um estado do *bulk* (b).

5.4 Acoplamento de spin-órbita intrínseco nas nanofitas zigzag

O hamiltoniano para as nanofitas zigzag com acoplamento de spin-órbita intrínseco é semelhante ao da seção 4.2 e leva em conta a interação de um elétron com seus segundos vizinhos, já visto na figura 4.5(a). Dessa maneira, escreve-se:

$$\begin{aligned}
 H_{so} = \frac{2i}{\sqrt{3}} \lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle}^N \sum_{ss'} \left\{ |A_m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A, m+1/2, n-1, s'| + \right. \\
 |A_m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A_{m+1}, n, s'| + \\
 |A_m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A_{m+1/2}, n+1, s'| + \\
 |A_m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A_{m-1/2}, n+1, s'| + \\
 |A_m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A_{m-1}, n, s'| + \\
 \left. |A_m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A_{m-1/2}, n-1, s'| + h.c. \right\} \quad (5.62)
 \end{aligned}$$

em que λ_{so} é o parâmetro que define a intensidade do acoplamento de spin-órbita intrínseco, $\vec{\gamma}$ é o vetor cuja as componentes são as matrizes de spin de Pauli, a somatória sobre $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ é realizada sobre os segundos vizinhos de um átomo no grafeno, mostrados na figura 4.5(a), os vetores \vec{d}_{mn} indicam as distâncias entre um átomo num sítio m e outro no sítio n como na figura 4.5(b) e s representam os estados de spin.

Em uma nanofita, um átomo em qualquer sítio, que não esteja próximo às bordas tem seis segundos vizinhos, igual ao caso da seção 4.2. Para se realizar o produto $(\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik})$ para sítios A, igualmente tem-se:

$$\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a \hat{i} - \frac{1}{2} a \hat{j} \right) \times (-a \hat{j}) = -\frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \hat{k}. \quad (5.63)$$

O cálculo para os outros vizinhos A_l , até $l = 6$ é feito da mesma maneira e os resultados diferem somente pelo sinal. De uma maneira geral, o resultado será $\xi \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \hat{k}$, sendo $\xi = \pm 1$ o pseudo-spin, definido pelo sentido do produto vetorial realizado. Além disso, o produto $\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}$ gera vetores que só possuem componente no eixo z . Por esse motivo, o produto interno $\vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik})$ só terá como resultado, na parte de spin, componente γ_z .

A função de onda eletrônica escrita para a nanofita zigzag e considerando o spin do elétron

5.4. ACOPLAMENTO DE SPIN-ÓRBITA INTRÍNSECO NAS NANOFITAS ZIGZAG 75

no termo s é

$$|\phi_A, n, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_m e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} |A_m, n, s\rangle. \quad (5.64)$$

Com isso, pode-se encontrar os níveis de energia a partir da equação de Schrödinger, como na seção anterior 5.3. Já se levando em consideração os produtos do tipo $\langle A_{m''}, n'' | A_m, n \rangle = \delta_{m''m} \delta_{n''n}$, o termo $\langle \phi_{An''}, s | H_{so} | \phi_{Bn'}, s \rangle$ é

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, n'', s | H_{so} | \phi_B, n', s \rangle &= \\ &= -i \frac{\lambda_{so}}{M} \sum_{m,n;m'n'}^M e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \delta_{m''m} \delta_{n''n} \langle s' | \{ |s\rangle \gamma_z \langle s' | \} | s \rangle \\ &\quad \{ \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{(n-1)n'} - \delta_{(m+1)m'} \delta_{nn'} + \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{(n+1)n'} \\ &\quad - \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{(n+1)n'} + \delta_{(m-1)m'} \delta_{nn'} - \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{(n-1)n'} \}. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Aplicando-se os deltas $\delta_{m''m} \delta_{n''n}$ e juntando-se os deltas restantes, tem-se que para

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, n'', s | H_{so} | \phi_B, n', s \rangle &= \\ &= -i \frac{\lambda_{so}}{M} \sum_{m,n;m'n'}^M e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \{ (\delta_{(m-1)m'} - \delta_{(m+1)m'}) \delta_{nn'} \\ &\quad + (\delta_{(m+1/2)m'} - \delta_{(m-1/2)m'}) \delta_{(n-1)n'} + (\delta_{(m+1/2)m'} - \delta_{(m-1/2)m'}) \delta_{(n+1)n'} \}. \end{aligned} \quad (5.66)$$

Essa soma é feita sobre todas as M células unitárias da nanofita. A expressão 5.66 mostra três resultados

$$\langle \phi_A, n, \uparrow | H_{so} | \phi_B, n-1, \uparrow \rangle = -2\lambda_{so} \text{sen}(k_x a_0); \quad (5.67)$$

$$\langle \phi_A, n, \uparrow | H_{so} | \phi_{B(n-1)}, \uparrow \rangle = 2\lambda_{so} \text{sen}\left(k_x \frac{a_0}{2}\right); \quad (5.68)$$

$$\langle \phi_A, n, \uparrow | H_{so} | \phi_{B(n+1)}, \uparrow \rangle = 2\lambda_{so} \text{sen}\left(k_x \frac{a_0}{2}\right). \quad (5.69)$$

O cálculo para os termos $\langle \phi_{Bn''}, \uparrow | H_{so} | \phi_{An'}, \uparrow \rangle$, dão um resultado semelhante:

$$\langle \phi_B, n-1, \uparrow | H_{so} | \phi_A, n, \uparrow \rangle = 2\lambda_{so} \text{sen}(k_x a_0); \quad (5.70)$$

$$\langle \phi_B, n-1, \uparrow | H_{so} | \phi_A, n-1, \uparrow \rangle = -2\lambda_{so} \text{sen}\left(k_x \frac{a_0}{2}\right); \quad (5.71)$$

$$\langle \phi_B, n-1, \uparrow | H_{so} | \phi_A, n+1, \uparrow \rangle = -2\lambda_{so} \text{sen}\left(k_x \frac{a_0}{2}\right). \quad (5.72)$$

Os termos com spin down terão sinal invertido, considerando-se a matriz de Pauli γ_z .

A equação de energia, com a matriz do hamiltoniano para a nanofita zigzag com efeito intrínseco de spin-órbita, é

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_2 & C & S_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ C & -S_2 & -t & -S_1 & 0 & & 0 & 0 \\ -S_1 & -t & S_2 & C & S_1 & & 0 & 0 \\ 0 & S_1 & C & -S_2 & -t & & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & S_2 & C \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & C & -S_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix} \quad (5.73)$$

em que se tem $C = -2t \cos\left(\frac{k_x a_0}{2}\right)$, $S_1 = 2\lambda_{so} \sin\left(k_x \frac{a_0}{2}\right)$ e $S_2 = -2\lambda_{so} \sin(k_x a_0)$.

As condições de contorno, nesse caso, são:

$$\langle \phi_{A1} | H_{so} | \phi_{B0} \rangle = 0; \quad (5.74)$$

$$\langle \phi_{AN} | H_{so} | \phi_{B(N+1)} \rangle = 0; \quad (5.75)$$

além das condições de contorno da nanofita zigzag descritas na seção anterior.

A partir da análise da figura 5.10(a) pode-se ver que os *edge-states* ainda mantêm o seu *gap* fechado. A nanofita, portanto, é metálica. Os estados do *bulk* possuem um *gap* grande, tornando-os isolantes. Além disso, a matriz do hamiltoniano 5.73 mostra que deveria existir quatro estados de *edge-state* mas a figura de dispersão mostra somente dois (chamadas nesta seção de estado A e B). Isso acontece porque esses estados são degeneradas: possuem mesma energia e spins diferentes, possuindo estados de spin bem definidos. Além disso, nem a simetria partícula-buraco nem a simetria de inversão temporal foram quebradas.

A figura 5.10(b) representa a distribuição eletrônica dos estados A e B na nanofita. Nota-se que esses estados são altamente localizadas em lados opostos da nanofita. Além disso, as velocidades desses estados possuem direções diferentes. Se considerar-se que a velocidade de um estado for definido por $\frac{\partial E(k)}{\partial k}$, o cálculo de seu valor e direção pode ser feito. Próximo à energia $E = 0,05t$, o estado A possui velocidade negativa e o estado B velocidade positiva.

O estado eletrônico em que a nanofita zigzag se encontra é conhecido como efeito Hall quântico de spin (HQS), definido teoricamente no grafeno por Kane e Mele [9] e verificado experimentalmente em poços quânticos de Mercúrio-Telúrio [83, 84]. Isso significa que

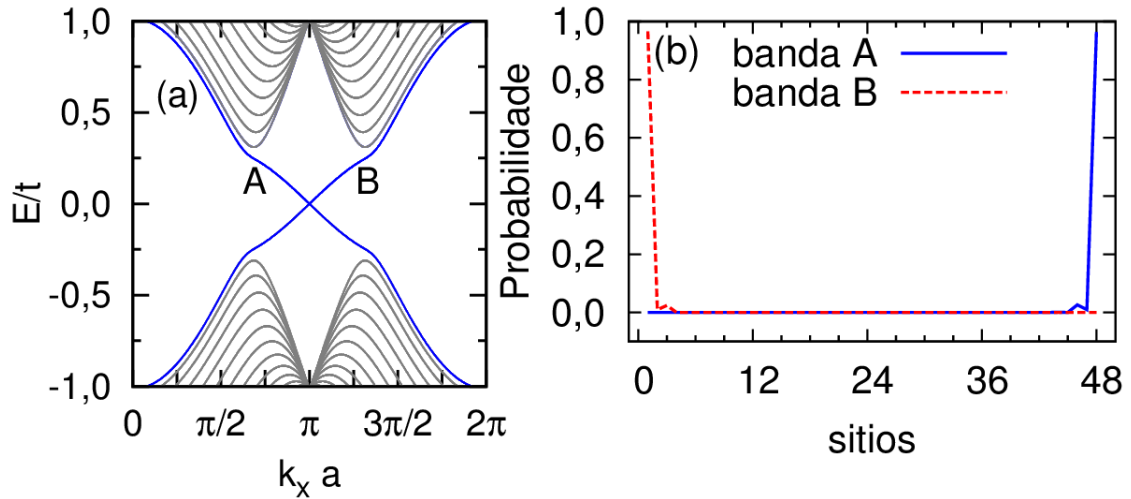


Figura 5.10: (a) Dispersão de energia das nanofitas zigzag com $N = 24$ e $\lambda_{so} = 0,05t$ e (b) localização eletrônica dos estados A e B tomada no nível de $E = 0,05t$.

correntes eletrônicas com spin polarizado são formadas nas bordas das nanofitas e que essas correntes não são alteradas pelos estados do *bulk*. Essas características fazem com que esse estado eletrônico não seja estritamente um estado isolante, mas associado a um invariante topológico Z_2 [74]. Nesse sistema, o estado Hall quântico de spin protege as correntes eletrônicas formadas nos *edge-states* através da simetria temporal. Esses estados formam um dubleto de Kramers e sua degenerescência não pode ser desfeita por qualquer perturbação que tenha simetria temporal [9]. Portanto, essas correntes não sofrem espalhamento de impurezas de origem não-magnéticas [85].

5.5 Acoplamento de spin-órbita Rashba nas nanofitas zigzag

Para a nanofita zigzag, a parte de Rashba do hamiltoniano do grafeno dado na equação 4.57 precisa ser adaptado para as nanofitas seguindo a ordenação dos átomos como feito na seção anterior. Dessa forma, o termo de Rashba do hamiltoniano das nanofitas zigzag é escrito como:

$$\begin{aligned}
 H_R = i \sum_{\langle m,n \rangle} \sum_{ss'}^N & [|A_m, n, s\rangle (\vec{u}_{n(n-1)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_m, n-1, s'| + \\
 & + |A_m, n, s\rangle (\vec{u}_{m(m+1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m+1/2}, n, s'| + \\
 & + |A_m, n, s\rangle (\vec{u}_{m(m-1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m-1/2}, n, s'| + h.c], \quad (5.76)
 \end{aligned}$$

com s representando a parte de spin, $\vec{\gamma}$ o vetor cujo as componentes são as matrizes de Pauli e

$$\vec{u}_{n(n-1)} = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{n(n-1)}; \quad (5.77)$$

$$\vec{u}_{m(m+1/2)} = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{m(m+1/2)}; \quad (5.78)$$

$$\vec{u}_{m(m-1/2)} = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{m(m-1/2)}. \quad (5.79)$$

As distâncias entre dois sítios vizinhos, a partir de um sítio A, são dadas pelos vetores \vec{d}_{ij} , definidos nas equações 4.59, 4.60 e 4.61. Considerando esses vizinhos, o valor de \vec{u}_{ij} para cada vizinho é

$$\vec{u}_{n(n-1)} = -\lambda_R \gamma_x; \quad (5.80)$$

$$\vec{u}_{m(m+1/2)} = \lambda_R \frac{\gamma_x}{2} - \lambda_R \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_y; \quad (5.81)$$

$$\vec{u}_{m(m-1/2)} = \lambda_R \frac{\gamma_x}{2} + \lambda_R \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_y. \quad (5.82)$$

$$(5.83)$$

Para se resolver a equação de Schrödinger, usa-se a função de onda da célula unitária

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,s} \alpha(\vec{k}, n, s) |\phi_{A,n,s}\rangle + \beta(\vec{k}, n, s) |\phi_{B,n,s}\rangle \quad (5.84)$$

sendo a função de onda de um elétron

$$|\phi_A, n, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_m e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} |A_m, n, s\rangle. \quad (5.85)$$

Nessa expressão, $\vec{R}_m = m\vec{a}_0$, igualmente ao definido na seção 5.3. O termo $\langle\phi_A, n'', s| H_R |\phi_B, n', s\rangle$, então, é

$$\begin{aligned} &\langle\phi_A, n'', \uparrow| H_R |\phi_B, n', \downarrow\rangle = \\ &= i \frac{1}{M} \sum_{\langle m, n \rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \{ \langle A_{m''}, n'', s | A_m, n, s \rangle (\vec{u}_{n(n-1)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_m, n-1, s' | B_{m'}, n', s \rangle \\ &+ \langle A_{m''}, n'', s | A_m, n, s \rangle (\vec{u}_{m(m+1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m+1/2}, n, s' | B_{m'}, n', s \rangle \\ &+ \langle A_{m''}, n'', s | A_m, n, s \rangle (\vec{u}_{m(m-1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m-1/2}, n, s' | B_{m'}, n', s \rangle + h.c. \end{aligned} \quad (5.86)$$

em que os produtos podem ser transformados em deltas, e por isso

$$\begin{aligned} &\langle\phi_A, n'', \uparrow| H_R |\phi_B, n', \downarrow\rangle = \\ &= i \frac{1}{M} \sum_{\langle m, n \rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{m'} - \vec{R}_{m''})} \delta_{m''m} \delta_{n''n} \{ \langle s'' | s \rangle (\vec{u}_{n(n-1)} \cdot \vec{\gamma}) \delta_{mm'} \delta_{(n-1)n'} \langle s | s' \rangle \\ &+ \langle s'' | s \rangle (\vec{u}_{m(m+1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \delta_{m(m+1/2)} \delta_{nn'} \langle s | s' \rangle \\ &+ \langle s'' | s \rangle (\vec{u}_{m(m-1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \delta_{m(m-1/2)} \delta_{nn'} \langle s | s' \rangle \}. \end{aligned} \quad (5.87)$$

Esse resultado pode ser separado em dois termos:

$$\begin{aligned} &\langle\phi_A, n, \uparrow| H_R |\phi_B, n-1, \downarrow\rangle = \\ &= i \frac{\lambda_R}{M} \sum_{\langle m, n \rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_m - \vec{R}_m)} \{ \langle s'' | s \rangle (-\gamma_x) \langle s | s' \rangle \} \\ &= -i\lambda_R \end{aligned} \quad (5.88)$$

e

$$\begin{aligned}
& \langle \phi_A, n, \uparrow | H_R | \phi_B, n, \downarrow \rangle = \\
& = i \frac{\lambda_R}{M} \sum_{\langle m, n \rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \left\{ \langle s'' | s \rangle \left(\frac{1}{2} \gamma_x - \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_y \right) \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{nn'} \langle s | s' \rangle \right. \\
& + \left. \langle s'' | s \rangle \left(\frac{1}{2} \gamma_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \gamma_y \right) \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{nn'} \langle s | s' \rangle \right\} \\
& = i \lambda_R \left\{ e^{ik_x a_0/2} \left(\frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2} \right) + e^{-ik_x a_0/2} \left(\frac{1}{2} - i \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \right\}. \tag{5.89}
\end{aligned}$$

Juntando as exponenciais com a fórmula de Euler, tem-se

$$\begin{aligned}
& \langle \phi_A, n, \uparrow | H_R | \phi_B, n, \downarrow \rangle = \\
& = i \lambda_R \left\{ \frac{1}{2} 2 \cos(k_x a_0/2) - \frac{\sqrt{3}}{2} 2 \operatorname{sen}(k_x a_0/2) \right\} \\
& = -i \lambda_R \left\{ -\frac{1}{2} 2 \cos(k_x a_0/2) + \frac{\sqrt{3}}{2} 2 \operatorname{sen}(k_x a_0/2) \right\}, \tag{5.90}
\end{aligned}$$

que pode ser reduzido a

$$\langle \phi_A, n, \uparrow | H_R | \phi_B, n, \downarrow \rangle = -2i \lambda_R \cos \left(k_x \frac{a_0}{2} - \frac{2\pi}{3} \right). \tag{5.91}$$

Analogamente, os termos do tipo $\langle \phi_B, n'', \uparrow | H_R | \phi_A, n', \downarrow \rangle$ resultam em:

$$\langle \phi_B, n, \uparrow | H_R | \phi_A, n+1, \downarrow \rangle = i \lambda_R \tag{5.92}$$

$$\langle \phi_B, n, \uparrow | H_R | \phi_A, n, \downarrow \rangle = 2i \lambda_R \cos \left(k_x \frac{a_0}{2} + \frac{2\pi}{3} \right) \tag{5.93}$$

Os termos que possuem spin contrário, $\langle \phi_A, n'', \downarrow | H_R | \phi_B, n', \uparrow \rangle$ e $\langle \phi_B, n'', \downarrow | H_R | \phi_A, n', \uparrow \rangle$ diferem por um sinal e são os complexos conjugados dos obtidos nas expressões 5.88, 5.91, 5.92 e 5.93.

A equação de energia, com a matriz do hamiltoniano para a nanofita zigzag e considerando-

se o acoplamento Rashba de spin-órbita é:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & C & 0 & 0 & \dots & 0 & -i\varphi_- & 0 & 0 & \dots \\ C & 0 & -t & 0 & & i\varphi_+ & 0 & i\lambda_R & 0 & \\ 0 & -t & 0 & C & & 0 & -i\lambda_R & 0 & -i\varphi_- & \\ 0 & 0 & C & 0 & & 0 & 0 & -i\lambda_R & 0 & \\ \vdots & & & & & & & & & \\ 0 & i\varphi_- & 0 & 0 & & 0 & C & 0 & 0 & \\ -i\varphi_+ & 0 & -i\lambda_R & 0 & & C & 0 & -t & 0 & \\ 0 & i\lambda_R & 0 & i\varphi_- & & 0 & -t & 0 & C & \\ 0 & 0 & i\lambda_R & 0 & & 0 & 0 & C & 0 & \\ \vdots & & & & & & & & & \end{pmatrix} \quad (5.94)$$

em que se tem

$$C = -2t \cos\left(\frac{k_x a_0}{2}\right) \quad (5.95)$$

$$\varphi_- = 2\lambda_R \cos\left(k_x \frac{a_0}{2} - \frac{2\pi}{3}\right) \quad (5.96)$$

$$\varphi_+ = 2\lambda_R \cos\left(k_x \frac{a_0}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) \quad (5.97)$$

A matriz do hamiltoniano mostra que as energias dos estados são diferentes para spins diferentes. Nesse caso, diz-se que há quebra de simetria de spin, ou seja, a equação para spin up dá um resultado diferente da equação para spin down. A consequência dessa quebra de simetria pode ser observada na figura 5.11 em que cada banda de energia se dividiu em dois, uma banda com spin up e a outra spin down, marcadas com cores diferentes. No entanto, um nível de energia não possui somente elétrons com orientação de spin up; os níveis possuem spin misturados com orientação preferencial para up ou down e assim a banda não possui spin completamente polarizado [78].

Comparando a figura 5.11(a) com a figura 5.11(b), pode-se ver que um aumento no parâmetro de acoplamento λ_R leva a uma redução do *gap* dos estados do *bulk* da nanofita.

O cálculo da distribuição eletrônica no nível de $E = 0,05t$, mostrado na figura 5.12, mostra que o aumento do parâmetro λ_R faz com que os estados A e D já não tenham localização preferencial nas bordas, portando não são *edge-states*; como pode se ver na figura 5.12(a)

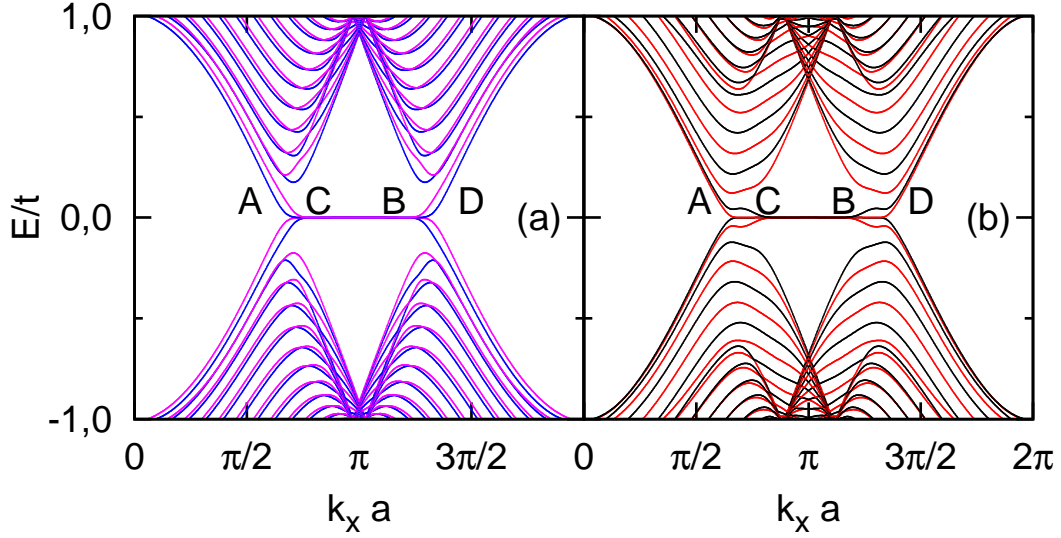


Figura 5.11: Dispersão de energia das nanofitas zigzag com $N = 24$, $\lambda_R = 0,05t$ (a) e $\lambda_R = 0,20t$ (b).

para um fator de rashba $\lambda_R = 0,05t$ e 5.12(b) para $\lambda_R = 0,20t$. Se λ_R for aumentado, os estados B e C se encontram mais localizadas próximas às bordas. No entanto, a concentração eletrônica nas bordas não é tão alta quando comparada ao caso da seção anterior, 5.4, quando o acoplamento intrínseco de spin-órbita estava sendo considerado (visto na figura 5.10(b)). Como as direções de spin não são bem definidas e a distribuição eletrônica não é tão concentrada nas bordas, não se pode dizer que o sistema se encontre no estado QAH ou QSH em nenhum dos casos apresentados, no entanto, esse o efeito é maior do que o acoplamento intrínseco [73] e pode ser combinado com outros efeitos para se controlar a transição entre estados eletrônicos [16].

A simetria de inversão temporal não é quebrada com o efeito Rashba. Como se pode ver no hamiltoniano da equação 5.94, e também nas figuras 5.11, a condição $E(\vec{k}, \uparrow) = E(-\vec{k}, \downarrow)$ ainda é satisfeita.

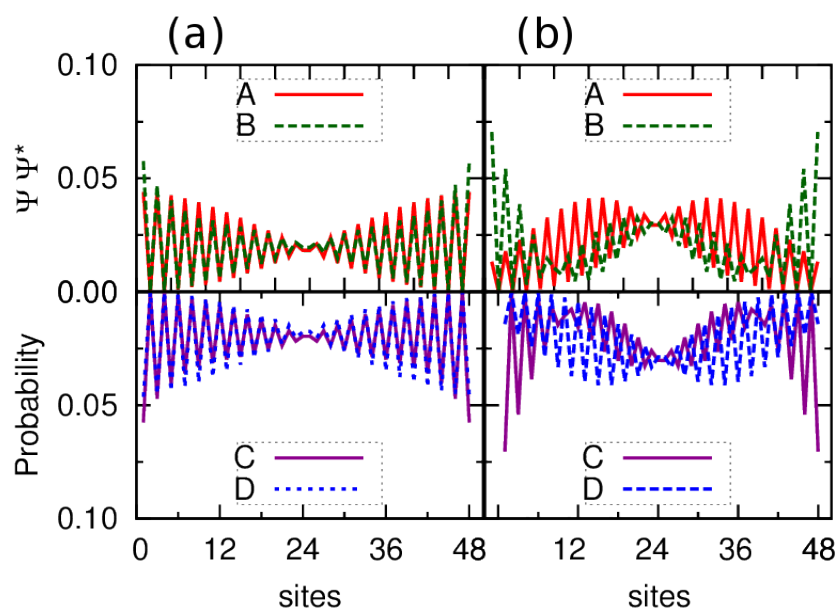


Figura 5.12: Distribuição eletrônica das nanofitas zigzag com $N = 24$, $\lambda_R = 0,05t$ (a) e $\lambda_R = 0,20t$ (b)

5.6 Campo de exchange nas nanofitas zigzag

O hamiltoniano para a campo de exchange nas nanofitas zigzag é

$$H_{ex} = \lambda_{ex} \sum_{m,n;s}^N \{ |A_m, n, s\rangle \gamma_z \langle A_m, n, s| + h.c. \}, \quad (5.98)$$

com o campo de exchange apresentando parâmetro λ_{ex} , devido ao campo magnético gerado pelo momento magnético efetivo do elétron. O termo γ_z corresponde à matriz de Pauli.

A função de onda eletrônica escrita para a nanofita zigzag e considerando o spin do elétron no termo s é

$$|\phi_A, n, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_m e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} |A_m, n, s\rangle. \quad (5.99)$$

E o produto $\langle \phi_A, n'', s | H_{ex} | \phi_A, n', s \rangle$ será

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, n'', s | H_{ex} | \phi_A, n', s \rangle &= \\ &= \frac{\lambda_{ex}}{N} \sum_{m'',m'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{m''}-\vec{R}_{m'})} \langle A_{m'', n'', s} | (|A_m, n, s\rangle \gamma_z \langle A_m, n, s|) | A_{m'}, n', s \rangle. \end{aligned} \quad (5.100)$$

Separando a parte de spin, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, n'', s | H_{ex} | \phi_A, n', s \rangle &= \frac{\lambda_{ex}}{N} \sum_{n,n'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n-\vec{R}_{n'})} \delta_{m''m} \delta_{n''n} \langle s | (|s\rangle \gamma_z \langle s|) | s \rangle \delta_{m'm} \delta_{n'n} \\ &= \frac{1}{N} \sum_m e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_m-\vec{R}_m)} \langle s | (|s\rangle \gamma_z \langle s|) | s \rangle. \end{aligned} \quad (5.101)$$

Na exponencial observa-se o termo $\vec{R}_m - \vec{R}_m$ que é igual a zero. Isso significa que esse termo do hamiltoniano não inclui as distâncias entre os átomos de primeiros ou segundos vizinhos. Esse resultado é esperado da expressão do hamiltoniano 5.98. O termo $\langle B, s | H_{ex} | B, s \rangle$ terá, portanto, o mesmo resultado da equação 5.101. O único termo que muda a resposta é o produto de spin, assim:

$$\langle C, n, \uparrow | C, n, \uparrow \rangle = \lambda_{ex}; \quad (5.102)$$

$$\langle C, n, \downarrow | C, n, \downarrow \rangle = -\lambda_{ex}; \quad (5.103)$$

em que $C = A, B$ representa um dos dois sítios. As energias serão dadas pela equação de

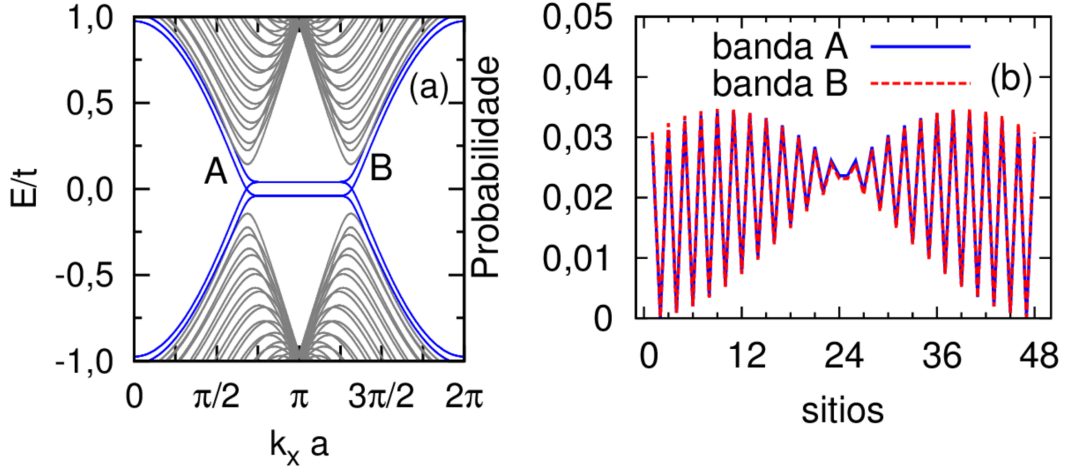


Figura 5.13: Dispersão de energia (a) e distribuição eletrônica (b) das nanofitas zigzag com $N = 24$ e $\lambda_{ex} = 0,04t$.

Schrödinger

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A1\uparrow} \\ \phi_{B1\uparrow} \\ \vdots \\ \phi_{A1\downarrow} \\ \phi_{B1\downarrow} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_{ex} & C & \dots & 0 & 0 & \dots \\ C & \lambda_{ex} & & 0 & 0 & \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & & -\lambda_{ex} & C & \\ 0 & 0 & & C & -\lambda_{ex} & \\ \vdots & & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A1\uparrow} \\ \phi_{B1\uparrow} \\ \vdots \\ \phi_{A1\downarrow} \\ \phi_{B1\downarrow} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (5.104)$$

sendo $C = -2t \cos\left(\frac{k_x a_0}{2}\right)$.

Essas equações geram a dispersão de energia como visto na figura 5.13, em que as bandas eletrônicas tem sua degenerescência de spin quebrada, com as bandas formadas por elétrons de spin down sendo deslocadas para baixo e as formadas por elétrons de spin up para cima. Com o campo de exchange, a simetria de inversão temporal é quebrada pois $E(\vec{k}, \uparrow) \neq E(-\vec{k}, \downarrow)$.

Capítulo 6

Strain uniaxial elástico

6.1 Teoria para uma deformação arbitrária

As deformações em um dado material podem ser aplicadas de muitas maneiras, dentre elas o crescimento de um filme fino sobre um outro material e a aplicação de uma força física sobre um material, que pode surgir de uma força externa ou a partir de sua curvatura. Essa deformação, também chamada de strain, será considerada elástica: válido apenas para pequenas forças e obedecendo à lei de Hooke. Para tal, o cristal tem que ser visto como um meio contínuo e homogêneo, ao invés de um arranjo periódico de átomos. O tratamento físico e matemático é dado se considerando que o strain aplicado ao sólido é diretamente proporcional ao stress; além disso, não será feita distinção entre deformações isotérmicas e adiabáticas, pois em temperatura ambiente ou mais baixas, a diferença entre esses dois tipos de deformação é muito pequena [86].

Considere que uma deformação uniforme e pequena será aplicada a um sólido e que este se encontra em um sistema de coordenadas com vetores unitários \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} . Em uma deformação uniforme, cada célula primitiva do cristal é deformada da mesma maneira. Os novos vetores unitários, serão [86]:

$$\vec{x}' = (1 + \epsilon_{xx})\hat{x} + \epsilon_{xy}\hat{y} + \epsilon_{xz}\hat{z}, \quad (6.1)$$

$$\vec{y}' = \epsilon_{yx}\hat{x} + (1 + \epsilon_{yy})\hat{y} + \epsilon_{yz}\hat{z}, \quad (6.2)$$

$$\vec{z}' = \epsilon_{zx}\hat{x} + \epsilon_{zy}\hat{y} + (1 + \epsilon_{zz})\hat{z}, \quad (6.3)$$

em que os termos $\epsilon_{\alpha\beta}$ são adimensionais e tem valor $\ll 1$ quando o strain é pequeno. Na forma matricial, a equação acima pode ser escrita como:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \epsilon_{xx}) & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & (1 + \epsilon_{yy}) & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & (1 + \epsilon_{zz}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

Os novos vetores nos eixos não terão tamanho unitário, como tinham os vetores do sistema sem strain. O novo tamanho dos vetores é dado por

$$\vec{x}' \cdot \vec{x}' = 1 + 2\epsilon_{xx} + \epsilon_{xx}^2 + \epsilon_{xy}^2 + \epsilon_{xz}^2 \quad (6.5)$$

sendo de maneira semelhante para os vetores \vec{y}' e \vec{z}' . Considerando somente os termos de primeira ordem, uma vez que as contribuições de ordem superior são baixas, escreve-se:

$$x' \cong 1 + \epsilon_{xx}. \quad (6.6)$$

O deslocamento de posição devido ao strain de um átomo que estava originalmente na posição $\vec{r} = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$ e agora ocupa a posição $\vec{r}' = x\vec{x}' + y\vec{y}' + z\vec{z}'$ é:

$$\vec{R} = \vec{r}' - \vec{r} = x(\vec{x}' - \hat{x}) + y(\vec{y}' - \hat{y}) + z(\vec{z}' - \hat{z}); \quad (6.7)$$

que, com o uso das expressões 6.1, 6.2 e 6.3 é

$$\vec{R} = (x\epsilon_{xx} + y\epsilon_{yx} + z\epsilon_{zx})\hat{x} + (x\epsilon_{xy} + y\epsilon_{yy} + z\epsilon_{zy})\hat{y} + (x\epsilon_{xz} + y\epsilon_{yz} + z\epsilon_{zz})\hat{z}. \quad (6.8)$$

Quando há ganho no volume associado ao material, a deformação é chamada de dilatação. Se uma pressão hidrostática é aplicada e o volume do sólido diminui, tem-se uma compressão.

Um cubo unitário de arestas \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} tem um volume deformado de

$$V' = \vec{x}' \cdot \vec{y}' \times \vec{z}' \quad (6.9)$$

que é

$$\vec{x}' \cdot \vec{y}' \times \vec{z}' = \begin{pmatrix} (1 + \epsilon_{xx}) & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & (1 + \epsilon_{yy}) & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & (1 + \epsilon_{zz}) \end{pmatrix} \simeq 1 + \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}; \quad (6.10)$$

se somente os termos de primeira ordem são considerados. A dilatação δ , então é

$$\delta = \frac{V' - V}{V} \simeq \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}. \quad (6.11)$$

6.2 Strain uniaxial aplicado ao grafeno

Em aplicações de eletrônica e spintrônica, o grafeno é comumente construído sobre outro material para ser utilizado, pois é um material extremamente fino. Esse tipo de construção causa deformações na rede do grafeno porque os átomos do material usado como base não se encontram nas mesmas posições que os átomos na rede do grafeno e, interagindo eletronicamente, eles podem aproximar ou se afastar os átomos de carbono. A aplicação de uma tensão externa na folha do grafeno ou nas nanofitas pode mudar suas propriedades eletrônicas, tal como acontece com os nanotubos [87, 88, 89, 90, 91]. Alguns cálculos [45] e experimentos [46] tem mostrado que essas deformações podem chegar a 20% da distância interatômica inicial sem que as posições dos átomos do grafeno sejam permanentemente deformadas.

Considere-se uma tensão \vec{T} aplicada a uma folha de grafeno ao longo de uma determinada direção. As coordenadas cartesianas serão definidas de modo a colocar seu eixo x paralelamente a uma cadeia de átomos que forma uma rede zigzag, como na figura 6.1. Dessa maneira, o vetor de tensão fica escrito como

$$\vec{T} = T \cos(\theta) \hat{i} + T \sin(\theta) \hat{j}. \quad (6.12)$$

Assume-se que a estrutura de rede do grafeno responde elasticamente à tensão aplicada. Assim, as equações da seção anterior, 6.1 podem ser aplicadas ao grafeno. De acordo com a lei de Hooke que relaciona stress τ_{ij} e strain ϵ_{ij} , tem-se

$$\tau_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl}; \quad (6.13)$$

$$\epsilon_{ij} = S_{ijkl} \tau_{kl}; \quad (6.14)$$

em que C_{ijkl} são as componentes do tensor de rigidez elástica e S_{ijkl} as componentes do tensor de deformação. Como o grafeno é um material bidimensional, pode-se diminuir a dimensão das componentes dos tensores de strain e de stress da matriz 6.4, desconsiderando-se sua componente na direção z :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \epsilon_{xx}) & \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{yx} & (1 + \epsilon_{yy}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (6.15)$$

E, por possuir rede hexagonal, as componentes elásticas são independentes do sistema de coordenadas [47] sob stress. Se a tensão aplicada for levada para o sistema de coordenadas

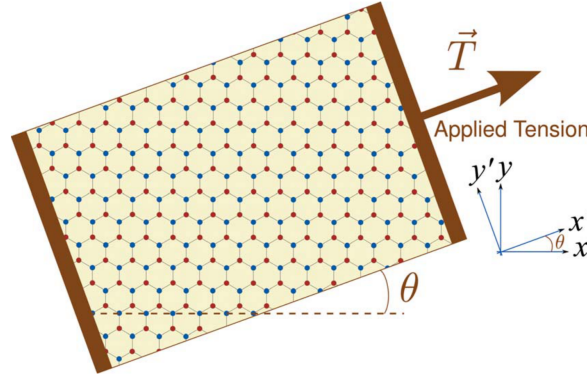


Figura 6.1: Representação de uma tensão aplicada no grafeno em uma direção arbitrária. A rede do grafeno pode ser tomada em relação aos eixos xoy ou $x'oy'$, que diferem entre si por uma inclinação de ângulo θ . Figura de [92].

$x'oy'$, com o eixo x' paralelo à \vec{T} , a tensão terá componente $\vec{T} = T\hat{x}'$ e as componentes de strain da equação 6.14 ficarão

$$\epsilon'_{ij} = S_{ijkl}\tau'_{kl} = TS_{ijkl}\delta_{kx}\delta_{lx} = TS_{ijxx}, \quad (6.16)$$

sendo que o stress é $\tau'_{kl} = T\delta_{kx}\delta_{lx}$, em que foi usado δ_{ik} , o delta de Kronecker. Como somente cinco componentes do tensor de rigidez elástica são independentes no grafite, sendo elas S_{xxxx} , S_{xxyy} , S_{xxzz} , S_{zzzz} , S_{yzyz} [93] e como o grafeno é um material bidimensional, as componentes não-nulas de strain são

$$\epsilon'_{xx} = TS_{xxxx}, \quad (6.17)$$

$$\epsilon'_{yy} = TS_{xxyy}, \quad (6.18)$$

que representam a deformação longitudinal e a contração transversal de Poisson. Designando-se o strain de tensão por $\epsilon = TS_{xxxx}$, o tensor de strain pode ser escrito em termos da razão de Poisson, $\nu = -S_{xxyy}/S_{xxxx} = 0.165$ [93]:

$$\epsilon' = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\nu \end{pmatrix}. \quad (6.19)$$

Nessa forma, vê-se que o grafeno é realmente um material elasticamente isotrópico, pois as componentes de fora da diagonal principal são zero. Como a matriz de strain está no eixo

coordenado $x'oy'$ e a rede do grafeno no sistema xoy , aplica-se uma rotação na matriz de strain para que os dois participem do mesmo sistema. Assim, tem-se [92]:

$$\epsilon = \varepsilon \begin{pmatrix} \cos^2\theta - \nu\text{sen}^2\theta & (1 + \nu)\cos\theta\text{sim}\theta \\ (1 + \nu)\cos\theta\text{sen}\theta & \text{sen}^2\theta - \nu\cos^2\theta \end{pmatrix}, \quad (6.20)$$

em que ε é o módulo de strain, que varia de 0 a 1. Fazendo a identificação:

$$\epsilon_{11} = \varepsilon[\cos^2\theta - \nu\text{sen}^2\theta]; \quad (6.21)$$

$$\epsilon_{12} = \varepsilon[(1 + \nu)\cos\theta\text{sen}\theta]; \quad (6.22)$$

$$\epsilon_{21} = \varepsilon[(1 + \nu)\cos\theta\text{sen}\theta]; \quad (6.23)$$

$$\epsilon_{22} = \varepsilon[\text{sen}^2\theta - \nu\cos^2\theta]; \quad (6.24)$$

a transformação de coordenadas de um átomo em sua posição (x, y) para a posição modificada pelo strain uniaxial (x', y') será

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \epsilon_{11}) & \epsilon_{12} \\ \epsilon_{21} & (1 + \epsilon_{22}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (6.25)$$

Ou, na forma vetorial

$$\vec{d}^s = (I + \epsilon)\vec{d} \quad (6.26)$$

em que \vec{d} é o vetor de distância entre dois átomos de carbono, que após o strain se torna \vec{d}^s ; I é a matriz identidade e ϵ a matriz 6.20. Assim, as componentes do vetor de distância interatômica entre os primeiros vizinhos do grafeno que foram dadas nas equações 4.14, 4.15 e 4.16, terão novas expressões expressões após a aplicação do strain, de forma que:

$$\vec{d}_1^s = -a\epsilon_{12}\hat{i} - (1 + \epsilon_{22})a\hat{j}; \quad (6.27)$$

$$\vec{d}_2^s = \frac{a}{2} [\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12}] \hat{i} + \frac{a}{2} [\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22})] \hat{j}; \quad (6.28)$$

$$\vec{d}_3^s = \frac{a}{2} [-\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12}] \hat{i} + \frac{a}{2} [-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22})] \hat{j}. \quad (6.29)$$

Na equação 6.20, θ é o ângulo em que o strain é aplicado, com respeito ao eixo x no sistemas de coordenadas da rede. Então, para $\theta = 0$, o strain é aplicado paralelamente à fronteira zigzag do grafeno ou da nanofita e, quando o strain é aplicado paralelamente à fronteira armchair, $\theta = \pi/2$.

O termo de *hopping* t que antes tinha o mesmo valor para os três primeiros vizinhos passa a ter valores distintos para cada um deles de acordo com a equação [92]

$$t_{i,j} = t_i = te^{-3.37(\vec{d}_i^s/a-1)} \quad (6.30)$$

com $t = 2,7\text{eV}$ o valor do termo de *hopping* sem strain, igual ao da seção 4.1.

A matriz do hamiltoniano para o grafeno modificado por strain pode então ter seus termos determinados, sendo que a equação 4.20 ficará

$$\begin{aligned} H_{AB} &= \langle \phi_A | H_h | \phi_B \rangle = - \sum_l^3 t_l \exp \left\{ i \vec{k} \cdot \vec{d}_l^s \right\} \\ &= - t_1 \exp(-ik_x a \epsilon_{12} - ik_y (1 + \epsilon_{22}) a) \\ &\quad - t_2 \exp \left(i \frac{a}{2} k_x \left[(1 + \epsilon_{11}) \sqrt{3} + \epsilon_{12} \right] + i \frac{a}{2} k_y \left[(1 + \epsilon_{22}) + \sqrt{3} \epsilon_{21} \right] \right) \\ &\quad - t_3 \exp \left(i \frac{a}{2} k_x \left[-(1 + \epsilon_{11}) \sqrt{3} + \epsilon_{12} \right] + i \frac{a}{2} k_y \left[(1 + \epsilon_{22}) - \sqrt{3} \epsilon_{21} \right] \right), \end{aligned} \quad (6.31)$$

idêntica à da equação 4.20 se o strain considerado tiver $\epsilon = 0$. O outro termo fora da diagonal será

$$H_{BA} = \langle \phi_B | H_h | \phi_A \rangle = \langle \phi_A | H_h | \phi_B \rangle^* \quad (6.32)$$

e os termos da diagonal principal H_{AA} e H_{BB} , terão valores iguais a zero, como feito na seção 4.1.

Com a identificação

$$f_s = - \sum_l^3 t_l \exp \left\{ i \vec{k} \cdot \vec{d}_l^s \right\}, \quad (6.33)$$

as energias do sistema, dadas pela equação de Schrödinger, serão:

$$E \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & f_s \\ f_s^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix}. \quad (6.34)$$

A solução da equação 6.34 dá as energias das bandas de valência mostradas na figura 6.2. Como as bandas de condução são simétricas às de valência, as conclusões serão as mesmas. Na figura 6.2(a), foi aplicado um módulo de strain de 15% na direção zigzag, ou seja, $\theta = 0$. Analisando-se os níveis de energia, é possível concluir que não houve abertura de *gap*. Essa propriedade também é observada na figura 6.2(b) em que se manteve o valor do módulo mas

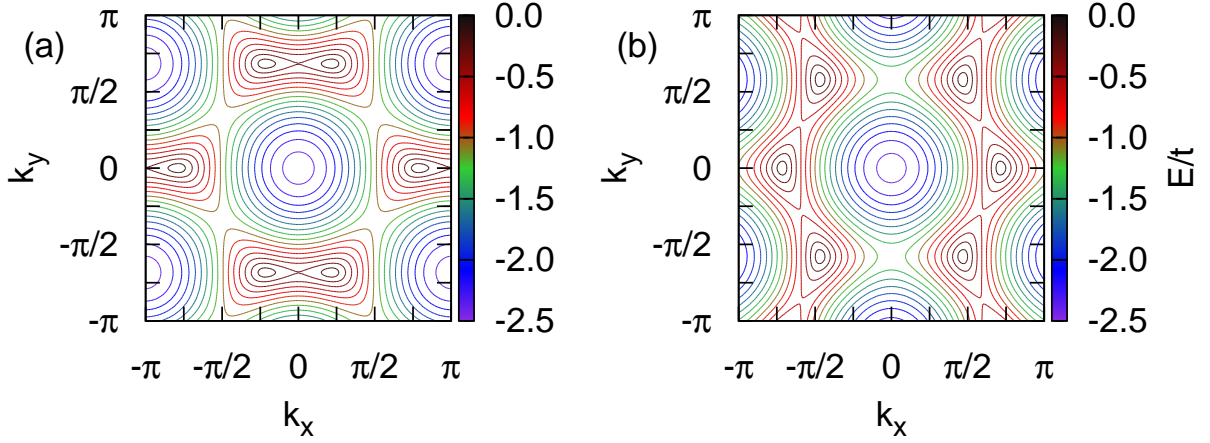


Figura 6.2: Banda de valência da 1ªBZ do grafeno com $\varepsilon = 0.15$ e $\theta = 0$ em (a) e $\theta = \pi/2$ em (b).

se aplicou o strain na direção das cadeias armchair ($\theta = \pi/2$). Mesmo que o strain fosse aumentado, o *gap* não se abre até um strain de pelo menos 23% [92]. Também é notório o fato dos cones de Dirac terem se deslocado dos pontos K e K' . Os cones ocupam a posição [69]

$$\vec{K} \cdot (\vec{d}_1^s - \vec{d}_2^s) = \arccos\left(\frac{t_3^2 - t_1^2 - t_2^2}{2t_1t_2}\right) \quad (6.35)$$

em que $\vec{K} = (K_x, K_y)$.

6.3 Strain uniaxial aplicado ao grafeno com acoplamento spin-órbita intrínseco

O hamiltoniano do efeito spin-órbita intrínseco, como visto na seção 4.2, tem a forma geral

$$H_{so} = \frac{2i}{\sqrt{3}} \lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{ss'} \left\{ |A_i, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A_j, s'| + h.c. \right\} \quad (6.36)$$

em que $\vec{\gamma}$ é o vetor cujas componentes são as matrizes de spin de Pauli, os vetores \vec{d}_{ik}^s indicam as distâncias entre um átomo num sítio i e outro no sítio k , neste caso, após sofrerem uma deformação devido ao strain, s representam os estados de spin, e a somatória sobre $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ é realizada sobre os segundos vizinhos de um átomo no grafeno.

No grafeno, um átomo em qualquer sítio que não esteja próximo às bordas, tem seis átomos como seus segundos vizinhos. O produto $(\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s)$ precisa ser feito para cada um dos seis. E para incluir o strain uniaxial, é necessário levar-se em conta as transformações geradas pela matriz 6.25 nas distâncias interatômicas. Assim, seguindo as operações feitas para o caso sem strain, tem-se:

$$\begin{aligned} \vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s &= \\ &\left\{ \left[(1 + \epsilon_{11}) \frac{\sqrt{3}}{2} a - \epsilon_{12} \frac{1}{2} a \right] \hat{i} + \left[\epsilon_{21} \frac{\sqrt{3}}{2} a - (1 + \epsilon_{22}) \frac{1}{2} a \right] \hat{j} \right\} \\ &\times (-a\epsilon_{12}\hat{i} - a(1 + \epsilon_{22})\hat{j}) = \\ &= \left(-(1 + \epsilon_{11})(1 + \epsilon_{22}) \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 + \epsilon_{12}\epsilon_{21} \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \right) \hat{k} \\ &= -\mu \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \hat{k} \end{aligned} \quad (6.37)$$

em que foi definido

$$\mu = (1 + \epsilon_{11})(1 + \epsilon_{22}) + \epsilon_{12}\epsilon_{21}. \quad (6.38)$$

Se o strain aplicado tiver módulo $\varepsilon = 0$, o resultado do produto $\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}$ será $-\frac{\sqrt{3}}{2} a^2$, igual ao da equação 5.63. O cálculo para os outros vizinhos A_l , até $l = 6$ é feito da mesma maneira e os resultados diferem somente pelo sinal. Esse sinal é o pseudo-spin $\sigma = \pm 1$, definido

6.3. STRAIN UNIAXIAL APLICADO AO GRAFENO COM ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA INTRÍN

pelo sentido do produto vetorial realizado. Assim, de uma maneira geral, o resultado será $\sigma\mu\frac{\sqrt{3}}{2}a^2\hat{k}$. Além disso, o produto $\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s$ gera vetores que só possuem componente no eixo z . Por esse motivo, o produto interno $\vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s)$ só terá como resultado, na parte de spin, componente γ_z .

Sendo a função de onda eletrônica definida como

$$|\phi_A, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} |A_n, s\rangle, \quad (6.39)$$

pode-se calcular o produto $\langle\phi_A, s'| H |\phi_A, s\rangle$,

$$\langle\phi_A, s'| H_{so} |\phi_A, s\rangle = \frac{1}{N} \sum_{nn'} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'}, s'| H_{so} |A_n, s\rangle. \quad (6.40)$$

E, com o uso do termo do hamiltoniano da equação 6.36,

$$\begin{aligned} \langle\phi_A, s'| H_{so} |\phi_A, s\rangle &= \\ &= \frac{\lambda_{so}}{N} \frac{2i}{\sqrt{3}} \sum_{nn'} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \langle A_{n'}, s'| \\ &\quad \left\{ |A_i, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A_j, s'| \right\} |A_n, s\rangle + h.c. \end{aligned} \quad (6.41)$$

Separando-se as partes de spin e realizando os produtos similares a $\langle A_{n'} | A_i \rangle = \delta_{n'i}$, tem-se

$$\begin{aligned} \langle\phi_A, s'| H_{so} |\phi_A, s\rangle &= \\ &= \frac{\lambda_{so}}{N} \frac{2i}{\sqrt{3}} \sum_{nn'} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_n - \vec{R}_{n'})} \delta_{n'i} \langle s'| \{ |s\rangle \gamma_z \sigma \mu \langle s'| \} |s\rangle \delta_{nj} + h.c. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Aplicando os deltas de kronecker e colocando μ em evidência,

$$\begin{aligned} \langle\phi_A, s'| H_{so} |\phi_A, s\rangle &= \\ &= i\mu \frac{\lambda_{so}}{N} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{ss'} \sigma e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_j - \vec{R}_i)} \langle s'| \{ |s\rangle \gamma_z \langle s'| \} |s\rangle + h.c. \end{aligned} \quad (6.43)$$

Como os produtos de spin são

$$\langle \uparrow | s \rangle \gamma_z \langle s' | \uparrow \rangle = 1, \quad (6.44)$$

$$\langle \uparrow | s \rangle s_z \langle s' | \downarrow \rangle = 0, \quad (6.45)$$

$$\langle \downarrow | s \rangle s_z \langle s' | \downarrow \rangle = -1, \quad (6.46)$$

vê-se que para o termo $\langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle$,

$$\langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle = i\mu \frac{\lambda_{so}}{N} \sum_{\langle \langle i,j \rangle \rangle} \sigma e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)}. \quad (6.47)$$

Considerando que, como nas seções anteriores, a expressão $\vec{R}_j - \vec{R}_i$ é a distância entre dois átomos mas que agora são segundos vizinhos, e que tem-se seis segundos vizinhos, pode-se definir um novo vetor \vec{d}_l^{s2} em que $l = 1 \dots 6$ que definem as distâncias entre esses vizinhos.

A expressão para cada distância sem strain é dada pelas equações

$$\vec{d}_1^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} - \frac{3}{2} \hat{j}; \quad (6.48)$$

$$\vec{d}_2^2 = \sqrt{3} \hat{i}; \quad (6.49)$$

$$\vec{d}_3^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{i} + \frac{3}{2} \hat{j}; \quad (6.50)$$

$$\vec{d}_4^2 = -\vec{d}_1^2; \quad (6.51)$$

$$\vec{d}_5^2 = -\vec{d}_2^2; \quad (6.52)$$

$$\vec{d}_6^2 = -\vec{d}_3^2; \quad (6.53)$$

e, após a aplicação de strain, de acordo com a equação 6.25

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1 + \epsilon_{11}) & \epsilon_{12} \\ \epsilon_{21} & (1 + \epsilon_{22}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad (6.54)$$

os vetores que ligam os segundos vizinhos \vec{d}_l^{s2} , serão

$$\vec{d}_1^{s2} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} (1 + \epsilon_{11}) - \frac{3}{2} \epsilon_{12} \right) \hat{i} + \left(-\frac{3}{2} (1 + \epsilon_{22}) + \frac{\sqrt{3}}{2} \epsilon_{21} \right) \hat{j}; \quad (6.55)$$

$$\vec{d}_2^{s2} = (1 + \epsilon_{11}) \sqrt{3} \hat{i} - \sqrt{3} \epsilon_{21} \hat{j}; \quad (6.56)$$

$$\vec{d}_3^{s2} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} (1 + \epsilon_{11}) + \frac{3}{2} \epsilon_{12} \right) \hat{i} + \left(\frac{3}{2} (1 + \epsilon_{22}) + \frac{\sqrt{3}}{2} \epsilon_{21} \right) \hat{j}; \quad (6.57)$$

$$\vec{d}_4^{s2} = -\vec{d}_1^2; \quad (6.58)$$

$$\vec{d}_5^{s2} = -\vec{d}_2^2; \quad (6.59)$$

$$\vec{d}_6^{s2} = -\vec{d}_3^2. \quad (6.60)$$

Substituindo esses valores na expressão 6.47, tem-se

$$\langle \phi_A, \uparrow | H_{so} | \phi_A, \uparrow \rangle = i\lambda_{so}\mu \left(-e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_1^{s2}} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_2^{s2}} - e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_3^{s2}} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{d}_4^{s2}} - e^{-i\vec{k} \cdot \vec{d}_5^{s2}} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_6^{s2}} \right), \quad (6.61)$$

6.3. STRAIN UNIAXIAL APLICADO AO GRAFENO COM ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA INTRÍN

que é similar ao obtido na equação 4.44, no limite em que $\varepsilon = 0$. Reorganizando os termos das exponenciais com as igualdades 6.58, 6.59 e 6.60, e reconsiderando-se o pseudo-spin σ ,

$$\langle \phi_{A, \uparrow} | H_{so} | \phi_{A, \uparrow} \rangle = i\lambda_{so}\mu \sum_l^3 \sigma_l \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^{\uparrow 2}} - e^{-i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^{\uparrow 2}} \right). \quad (6.62)$$

O termo $\langle \phi_{A, \downarrow} | H_{so} | \phi_{A, \downarrow} \rangle$, de acordo com a equação 6.46, terá somente um sinal diferente, de modo que

$$\langle \phi_{A, \downarrow} | H_{so} | \phi_{A, \downarrow} \rangle = -i\lambda_{so}\mu \sum_l^3 \sigma_l \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^{\downarrow 2}} - e^{-i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^{\downarrow 2}} \right). \quad (6.63)$$

E por fim,

$$\langle \phi_{B, \uparrow} | H_{so} | \phi_{B, \uparrow} \rangle = -\langle \phi_{A, \uparrow} | H_{so} | \phi_{A, \uparrow} \rangle; \quad (6.64)$$

$$\langle \phi_{B, \downarrow} | H_{so} | \phi_{B, \downarrow} \rangle = -\langle \phi_{A, \downarrow} | H_{so} | \phi_{A, \downarrow} \rangle. \quad (6.65)$$

Se considerar-se que

$$t_{sso} = i\lambda_{so}\mu \sum_l^3 \sigma_l \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^{\uparrow 2}} - e^{-i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^{\uparrow 2}} \right), \quad (6.66)$$

a matriz do hamiltoniano para o grafeno incluindo o efeito intrínseco de spin-órbita é

$$H = \begin{pmatrix} t_{sso} & -tf & 0 & 0 \\ -tf^* & -t_{sso} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_{sso} & -tf \\ 0 & 0 & -tf^* & t_{sso} \end{pmatrix} \quad (6.67)$$

e as energias serão dadas pela equação de Schrödinger:

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{sso} & f_s & 0 & 0 \\ f_s^* & -t_{sso} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_{sso} & f_s \\ 0 & 0 & f_s^* & t_{sso} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (6.68)$$

A alteração causada pelo strain uniaxial é mostrada nas figuras 6.3 e 6.4, em que foi considerado que $\lambda_{so} = 0,06t$. Pode-se observar que quando $\theta = 0$ o *gap* tende a diminuir com o aumento do módulo de strain, nas figuras 6.3(a), 6.3(b) e 6.3(c) em que o módulo de

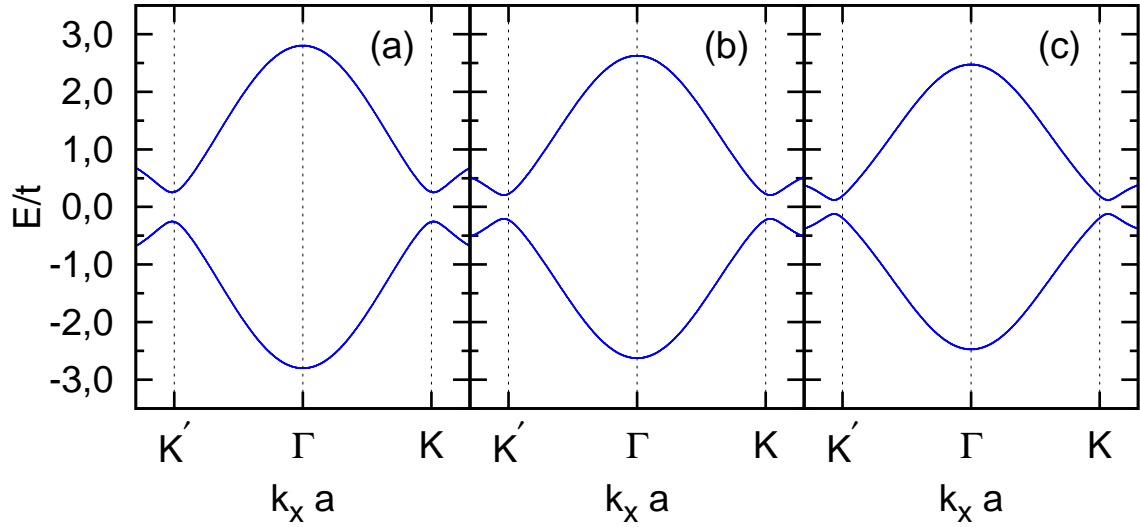


Figura 6.3: Perfil das bandas de valência e condução do grafeno da 1ªBZ do grafeno com $\lambda_{so} = 0,06t$ e $\varepsilon = 0,05$ em (a), $\varepsilon = 0,10$ em (b) e $\varepsilon = 0,15$ em (c). Todos os strains aplicados com ângulo $\theta = 0$.

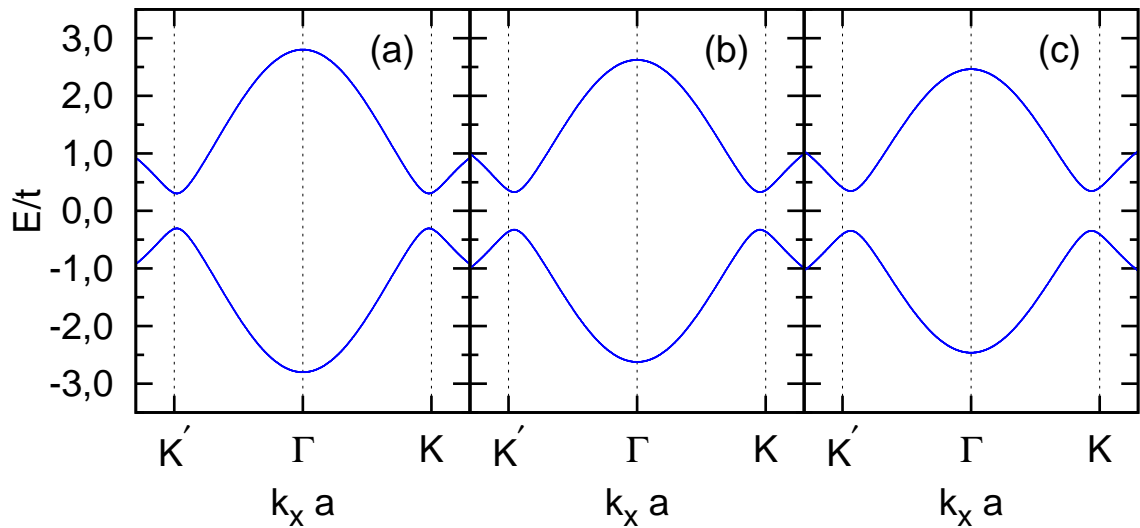


Figura 6.4: Perfil das bandas de valência e condução do grafeno da 1ªBZ do grafeno com $\lambda_{so} = 0,06t$ e $\varepsilon = 0,05$ em (a), $\varepsilon = 0,10$ em (b) e $\varepsilon = 0,15$ em (c). Todos os strains aplicados com ângulo $\theta = \pi/2$.

strain é $\varepsilon = 0,05$, $\varepsilon = 0,10$ e $\varepsilon = 0,15$, respectivamente. Além disso, os pontos de mínimo da banda de condução e máximo da banda de valência se deslocam para posições externas

6.3. STRAIN UNIAXIAL APLICADO AO GRAFENO COM ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA INTRÍN

às compreendidas pelos pontos K e K' . Quando o ângulo de aplicação do strain é $\theta = \pi/2$, figura 6.4, o *gap* praticamente não se altera e os pontos que antes formavam os cones de Dirac se deslocam para regiões internas às compreendidas pelos pontos K e K' . Em todos os casos, a dispersão de energia deixa de ser linear.

6.4 Strain uniaxial aplicado ao grafeno com acoplamento spin-órbita Rashba

O hamiltoniano de Rashba para o grafeno, como visto na equação 4.57, é definido por

$$H_R = i \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{ss'} \{ |A_i, s\rangle (\vec{u}_{ij} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_j, s'| + h.c. \}. \quad (6.69)$$

Levando em conta uma folha de grafeno submetida a uma tensão física, através de um strain uniaxial, o termo \vec{u}_{ij} precisa ser modificado para considerar as novas distâncias entre os átomos. Seguindo a equação 4.62, tem-se

$$\vec{u}_l = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_l^s, \quad (6.70)$$

em que \vec{d}_l^s representa os vetores de distância interatômicas de primeiros vizinhos modificados por strain das equações 6.27, 6.28 e 6.29, quando se considera os vizinhos de um sítio A,

$$\begin{aligned} \vec{d}_1^s &= -a\epsilon_{12}\hat{i} - (1 + \epsilon_{22})a\hat{j} \\ \vec{d}_2^s &= \frac{a}{2} \left[\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right] \hat{i} + \frac{a}{2} \left[\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right] \hat{j}; \\ \vec{d}_3^s &= \frac{a}{2} \left[-\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right] \hat{i} + \frac{a}{2} \left[-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right] \hat{j}. \end{aligned} \quad (6.71)$$

Assim, o produto da equação $\vec{u}_l \cdot \vec{\gamma}$ é, para $l = 1$,

$$\begin{aligned} \vec{u}_1 \cdot \vec{\gamma} &= \left\{ -\frac{\lambda_R}{a} \hat{k} \times [-a\epsilon_{12}\hat{i} - (1 + \epsilon_{22})a\hat{j}] \right\} \cdot \vec{\gamma} \\ &= \lambda_R [-(1 + \epsilon_{22})\hat{i} + \epsilon_{12}\hat{j}] \cdot \vec{\gamma} \\ &= \lambda_R [-(1 + \epsilon_{22})\gamma_x + \epsilon_{12}\gamma_y]; \end{aligned} \quad (6.72)$$

o próximo termo, com $l = 2$ é

$$\begin{aligned} \vec{u}_2 \cdot \vec{\gamma} &= \left\{ -\frac{\lambda_R}{a} \hat{k} \times \left[\frac{a}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right) \hat{i} + \frac{a}{2} \left(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \hat{j} \right] \right\} \cdot \vec{\gamma} \\ &= \frac{\lambda_R}{a} \left[-\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right) \hat{j} + \frac{1}{2} \left(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \hat{i} \right] \cdot \vec{\gamma} \\ &= \lambda_R \left[\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \gamma_x - \frac{1}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right) \gamma_y \right]; \end{aligned} \quad (6.73)$$

6.4. STRAIN UNIAXIAL APLICADO AO GRAFENO COM ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA RASHBA

e, por fim, com $l = 3$,

$$\begin{aligned}\vec{u}_3 \cdot \vec{\gamma} &= \left\{ -\frac{\lambda_R}{a} \hat{k} \times \left[\frac{a}{2} \left(-\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right) \hat{i} + \frac{a}{2} \left(-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \hat{j} \right] \right\} \cdot \vec{\gamma} \\ &= \frac{\lambda_R}{a} \left[\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) - \epsilon_{12} \right) \hat{j} + \frac{1}{2} \left(-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \hat{i} \right] \cdot \vec{\gamma} \\ &= \lambda_R \left[\frac{1}{2} \left(-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \gamma_x + \frac{1}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) - \epsilon_{12} \right) \gamma_y \right].\end{aligned}\quad (6.74)$$

Considerando-se o vetor de onda

$$|\phi_A, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n,s} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n^s} |A_n, s\rangle, \quad (6.75)$$

o produto $\langle \phi_A, s' | H_R | \phi_B, s \rangle$ é escrito como

$$\begin{aligned}\langle \phi_A, s' | H_R | \phi_B, s \rangle &= \\ &= \frac{i}{N} \sum_{nn'} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{s,s'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n^s - \vec{R}_{n'}^{s'})} [\langle A_{n'}, s' | A_i, s \rangle (\vec{u}_{ij} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_j, s' | B_n, s \rangle],\end{aligned}\quad (6.76)$$

em que se separa os produtos de spin e, assim, os produtos de coordenada são

$$\langle A_{n'} | A_i \rangle = \delta_{n'i}, \quad (6.77)$$

$$\langle B_j | B_n \rangle = \delta_{jn}. \quad (6.78)$$

Dessa maneira,

$$\begin{aligned}\langle \phi_A, s' | H_R | \phi_B, s \rangle &= \\ &= \frac{i}{N} \sum_{nn'} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{s,s'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_n^s - \vec{R}_{n'}^{s'})} [\delta_{n'i} \langle s' | |s \rangle (\vec{u}_{ij} \cdot \vec{\gamma}) \langle s' | |s \rangle \delta_{jn}].\end{aligned}\quad (6.79)$$

Se, nesse ponto, o produto $\langle \phi_C, s' | H_R | \phi_C, s \rangle$, com $C = A, B$, fosse considerado, o termo seria zero devido à ortogonalidade das funções. Aplicando-se os deltas da equação 6.78, segue-se que

$$\langle \phi_A, s' | H_R | \phi_B, s \rangle = \frac{i}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{s,s'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j^s - \vec{R}_i^{s'})} [\langle s' | |s \rangle (\vec{u}_{ij} \cdot \vec{\gamma}) \langle s' | |s \rangle], \quad (6.80)$$

e como visto na seção 4.1, $\vec{d}_l^s \equiv \vec{R}_j^s - \vec{R}_i^{s'}$. O mesmo vale para $\vec{u}_l \equiv \vec{u}_{ij}$. Portanto,

$$\langle \phi_A, s' | H_R | \phi_B, s \rangle = \frac{i}{N} \sum_l \sum_{s,s'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^s} [\langle s' | |s \rangle (\vec{u}_l \cdot \vec{\gamma}) \langle s' | |s \rangle]. \quad (6.81)$$

Substituindo as expressões 6.72, 6.73 e 6.74, tem-se

$$\begin{aligned}
\langle \phi_A, s' | H_R | \phi_B, s \rangle = & \\
= i \left\{ e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_1^s} \langle s' | (|s\rangle \lambda_R [-(1 + \epsilon_{22})\gamma_x + \epsilon_{12}\gamma_y] \langle s' |) |s\rangle \right. & \\
+ e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_2^s} \langle s' | (|s\rangle \lambda_R \left[\frac{1}{2} (\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22})) \gamma_x - \frac{1}{2} (\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12}) \gamma_y \langle s' |) |s\rangle \right] & \\
+ e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_3^s} \langle s' | \left[|s\rangle \lambda_R \left(\frac{1}{2} (-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22})) \gamma_x \right. \right. & \\
\left. \left. + \frac{1}{2} (\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) - \epsilon_{12}) \gamma_y \langle s' |) |s\rangle \right] \right\} & \quad (6.82)
\end{aligned}$$

Usando novamente as identidades

$$\langle \uparrow | (|\gamma\rangle \sigma_x^{\gamma\gamma'} \langle \gamma' |) | \uparrow \rangle = 0; \quad (6.83)$$

$$\langle \uparrow | (|\gamma\rangle \sigma_y^{\gamma\gamma'} \langle \gamma' |) | \uparrow \rangle = 0; \quad (6.84)$$

$$\langle \uparrow | (|\gamma\rangle \sigma_x^{\gamma\gamma'} \langle \gamma' |) | \downarrow \rangle = 1; \quad (6.85)$$

$$\langle \uparrow | (|\gamma\rangle \sigma_y^{\gamma\gamma'} \langle \gamma' |) | \downarrow \rangle = -i; \quad (6.86)$$

vê-se que para o termo $\langle \phi_A, s | H_R | \phi_B, s \rangle$, o produto de spin da equação acima será zero, assim esse termo possui valor zero. Consequentemente, restam os termos $\langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle$ e $\langle \phi_A, \downarrow | H_R | \phi_B, \uparrow \rangle$. Calculando o primeiro,

$$\begin{aligned}
\langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle = & \\
= i\lambda_R \left\{ e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_1^s} [-(1 + \epsilon_{22}) - i\epsilon_{12}] \right. & \\
+ e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_2^s} \left[\frac{1}{2} (\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22})) + i\frac{1}{2} (\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12}) \right] & \\
+ e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_3^s} \left[\frac{1}{2} (-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22})) - i\frac{1}{2} (\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) - \epsilon_{12}) \right] \left. \right\} & \quad (6.87)
\end{aligned}$$

e, definido-se

$$\rho_1 = 1 + \epsilon_{22} + i\epsilon_{12} \quad (6.88)$$

6.4. STRAIN UNIAXIAL APLICADO AO GRAFENO COM ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA RASHBA

tem-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= i\lambda_R \left\{ -\rho_1 e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_1^s} \right. \\ &\quad \left. + \exp \left\{ ik_x \frac{a}{2} \left[\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right] + ik_y \frac{a}{2} \left[\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right] \right\} \right. \end{aligned} \quad (6.89)$$

$$\left[\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) + i\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right) \right]$$

$$\left. + \exp \left\{ ik_x \frac{a}{2} \left[-\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right] + ik_y \frac{a}{2} \left[-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right] \right\} \right\} \quad (6.90)$$

$$\left[\frac{1}{2} \left(-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) - i\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) - \epsilon_{12} \right) \right] \left. \right\} \quad (6.91)$$

Assim, se

$$\xi_1 = \frac{k_x a}{2} \epsilon_{12} + \frac{k_y a}{2} (1 + \epsilon_{22}); \quad (6.92)$$

$$\xi_2 = \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} (1 + \epsilon_{11}) + \frac{\sqrt{3}k_y a}{2} \epsilon_{21}; \quad (6.93)$$

se terá

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= i\lambda_R \left\{ -\rho_1 e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_1^s} + e^{i\xi_1} \left[e^{i\xi_2} \left(\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) + i\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) + \epsilon_{12} \right) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{-i\xi_2} \left(\frac{1}{2} \left(-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) - i\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) - \epsilon_{12} \right) \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (6.94)$$

Agrupando-se as exponenciais em ξ_2 ,

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= \\ &= i\lambda_R \left\{ -\rho_1 e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_1^s} + e^{i\xi_1} \left[\frac{1}{2} \left(e^{i\xi_2} + e^{-i\xi_2} \right) \left((1 + \epsilon_{22}) + i\epsilon_{12} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\sqrt{3}}{2} \left(e^{i\xi_2} - e^{-i\xi_2} \right) \left(\epsilon_{21} + i(1 + \epsilon_{11}) \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (6.95)$$

obtem-se

$$\begin{aligned} \langle \phi_A, \uparrow | H_R | \phi_B, \downarrow \rangle &= i\lambda_R \left\{ -\rho_1 e^{-3i\xi_1} + \left(\frac{1}{2} \rho_1 \right) 2\cos(\xi_2) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\sqrt{3}}{2} 2\sen(\xi_2) (1 + \epsilon_{11} - i\epsilon_{21}) \right\} e^{i\xi_1} \end{aligned} \quad (6.96)$$

Essa equação é igual à equação 4.77 quando o strain é desconsiderado, ou seja, $\varepsilon = 0$, caso em que:

$$\rho_1 = 1; \quad (6.97)$$

$$\xi_1 = \frac{k_y a}{2}; \quad (6.98)$$

$$\xi_2 = \frac{\sqrt{3}k_x a}{2}. \quad (6.99)$$

Se for considerado que $\rho_2 = 1 + \epsilon_{11} - i\epsilon_{21}$, a expressão final para o termo $\langle \phi_{A, \uparrow} | H_R | \phi_{B, \downarrow} \rangle$ é

$$\langle \phi_{A, \uparrow} | H_R | \phi_{B, \downarrow} \rangle = -i\lambda_R \left\{ \rho_1 e^{-3i\xi_1} - \rho_1 \cos(\xi_2) + \sqrt{3}\rho_2 \sin(\xi_2) \right\} e^{i\xi_1}. \quad (6.100)$$

De maneira semelhante,

$$\langle \phi_{B, \uparrow} | H_R | \phi_{A, \downarrow} \rangle = i\lambda_R \left\{ \rho_1 e^{3i\xi_1} - \rho_1 \cos(\xi_2) - \sqrt{3}\rho_2 \sin(\xi_2) \right\} e^{-i\xi_1}. \quad (6.101)$$

Para se escrever esses termos em forma matricial, identifica-se

$$\varphi_{s-} = \lambda_R \left\{ \rho_1 e^{-3i\xi_1} - \rho_1 \cos(\xi_2) + \sqrt{3}\rho_2 \sin(\xi_2) \right\} e^{i\xi_1}; \quad (6.102)$$

$$\varphi_{s+} = \lambda_R \left\{ \rho_1 e^{3i\xi_1} - \rho_1 \cos(\xi_2) - \sqrt{3}\rho_2 \sin(\xi_2) \right\} e^{-i\xi_1}; \quad (6.103)$$

que resultará na equação de Schrödinger

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & f_s & 0 & -i\varphi_{s-} \\ f_s^* & 0 & i\varphi_{s+} & 0 \\ 0 & -i\varphi_{s+}^* & 0 & f_s \\ i\varphi_{s-}^* & 0 & f_s^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{A\uparrow} \\ \phi_{B\uparrow} \\ \phi_{A\downarrow} \\ \phi_{B\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (6.104)$$

Essa equação fornece as energias das bandas de condução e valência, apresentadas na figura 6.5, em que foi considerado $\lambda_R = 0, 20$ e o strain foi variado entre $\varepsilon = 0, 05$ em (a), $\varepsilon = 0, 10$ em (b) e $\varepsilon = 0, 15$ em (c), com ângulo $\theta = 0$ em todos esses casos. Como já mostrado antes, o acoplamento Rashba quebra a degenerescência de spin, o que resulta em duas bandas de condução e duas de valência, cada uma com orientação de spin preferência l. Um *gap* se abre quando o módulo do strain é aumentado, sendo significativo no caso em que $\varepsilon = 0, 15$. Se o ângulo de aplicação de strain for $\theta = \pi/2$ (figura 6.6), o movimento das bandas com a variação do módulo de strain é muito baixo, de maneira que o grafeno ainda não apresenta *gap*.

6.4. STRAIN UNIAXIAL APLICADO AO GRAFENO COM ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA RASHBA

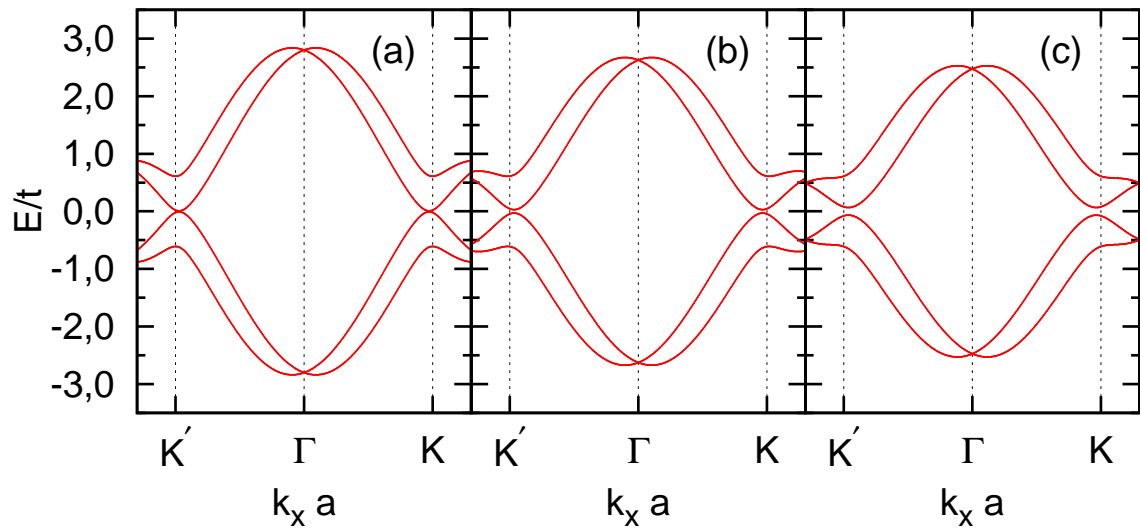


Figura 6.5: Perfil das bandas de valência e condução do grafeno da 1ªBZ do grafeno com $\lambda_R = 0,20t$ e $\varepsilon = 0,05$ em (a), $\varepsilon = 0,10$ em (b) e $\varepsilon = 0,15$ em (c). Todos os strains aplicados com ângulo $\theta = 0$.

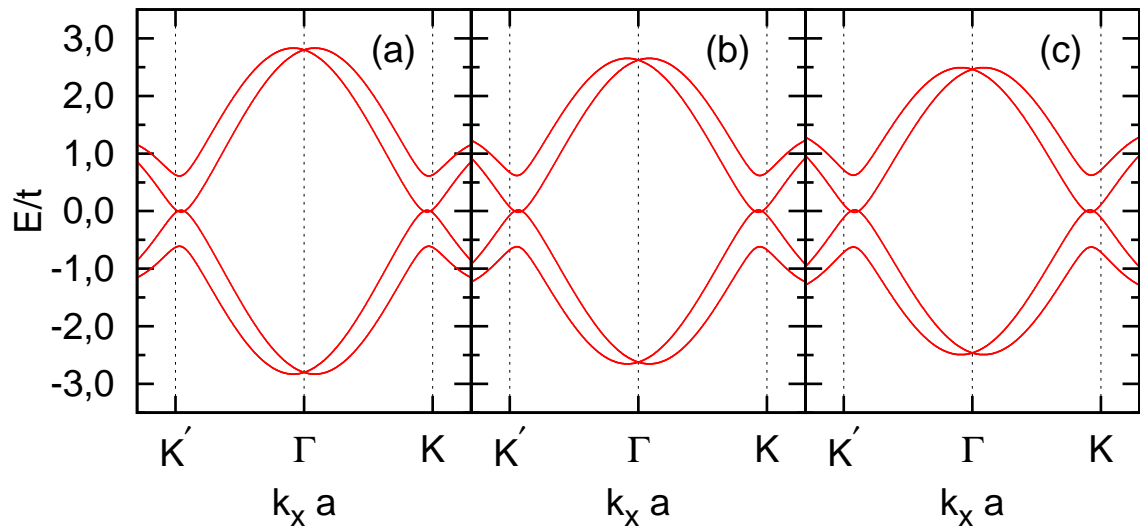


Figura 6.6: Perfil das bandas de valência e condução do grafeno da 1ªBZ do grafeno com $\lambda_R = 0,20t$ e $\varepsilon = 0,05$ em (a), $\varepsilon = 0,10$ em (b) e $\varepsilon = 0,15$ em (c). Todos os strains aplicados com ângulo $\theta = \pi/2$.

6.5 Strain uniaxial aplicado à nanofita zigzag

O hamiltoniano para a nanofita zigzag modificado pelo strain uniaxial é igual ao da seção 5.3 e é escrito como

$$H_h = - \sum_{m,n}^N \{ t_1 |A_m, n\rangle \langle B_m, n-1| + t_2 |A_m, n\rangle \langle B_{m+1/2}, n| + t_3 |A_m, n\rangle \langle B_{m-1/2}, n| + h.c \}, \quad (6.105)$$

em que os termos t_l , com $l = 1, 2$ ou 3 representam o fator de *hopping* para cada um dos três primeiros vizinhos e após ser modificado por strain, tem expressão dada pela equação 6.30:

$$t_l = t e^{-3.37(\vec{d}_l^s/a-1)}, \quad (6.106)$$

sendo \vec{d}_i^s o vetor que separa cada um dos primeiros vizinhos modificado por strain, dados nas equações 5.37, 5.38 e 5.39.

O vetor de onda de uma partícula é

$$|\phi_{An}\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m,n}^N e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m^s} |A_m, n\rangle \quad (6.107)$$

em que o vetor \vec{R}_m^s é o vetor de rede, alterado pelo strain. Essa alteração é dada pela transformação definida em 6.25; portanto,

$$\vec{R}_m^s = (1 + \epsilon_{11})ma_0\hat{i} + \epsilon_{21}ma_0\hat{j}. \quad (6.108)$$

Resolvendo a equação de Schrödinger para esse sistema,

$$E \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} \phi_{A1} \\ \phi_{B1} \\ \phi_{A2} \\ \phi_{B2} \\ \vdots \\ \phi_{AN} \\ \phi_{BN} \end{pmatrix}, \quad (6.109)$$

obtém-se expressões parecidas com as das equações 5.50 e 5.51:

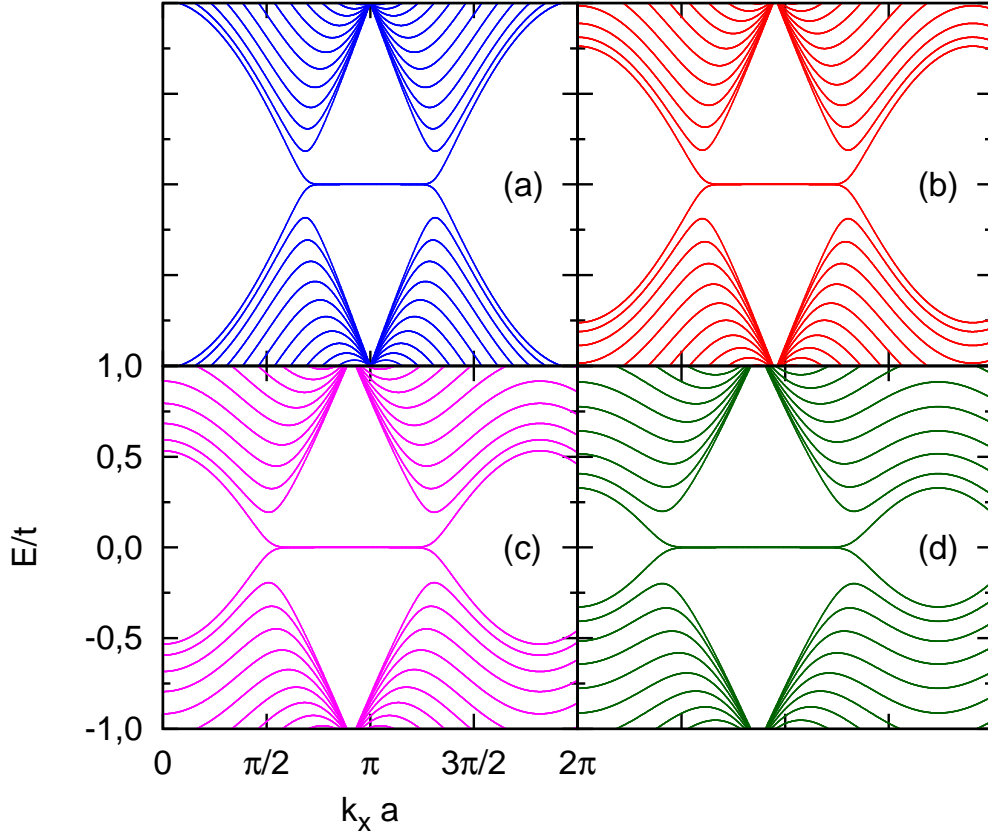


Figura 6.7: Dispersão de energia da primeira zona de Brillouin de uma nanofita zigzag com $N = 24$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); para ângulos de aplicação de strain $\theta = 0$.

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n-1)} \rangle = -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle} \sum_{m'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_m^s)} \delta_{mm'}; \quad (6.110)$$

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle = -\frac{t}{M} \sum_{\langle m,n \rangle} \sum_{m'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_m^s)} (\delta_{(m+1/2)m'} + \delta_{(m-1/2)m'}). \quad (6.111)$$

Como na nanofita o vetor de onda é quantizado em uma das direções, o vetor \vec{k} só apresenta componente na direção \hat{i} . Assim, os termos das exponenciais são:

$$\begin{aligned} \exp \left[i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_m^s) \right] \delta_{mm'} &= \exp \left[ik_x (m' - m) a_0 \{ (1 + \epsilon_{11}) \} \delta_{mm'} \right] \\ &= \exp \left[ik_x (m - m) a_0 \{ (1 + \epsilon_{11}) \hat{i} \} \right] = e^0 = 1. \end{aligned} \quad (6.112)$$

e

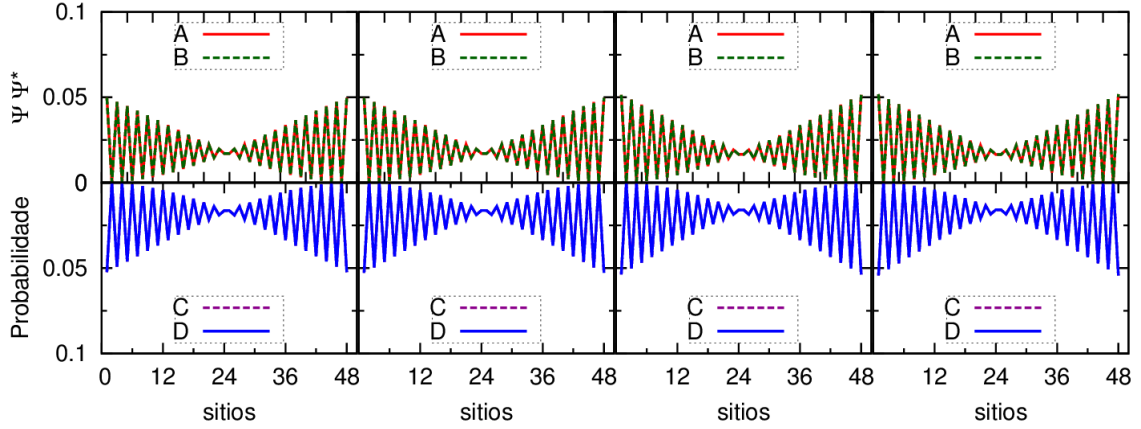


Figura 6.8: Distribuição eletrônica de uma nanofita zigzag com $N = 24$ (ou $W = 48$) e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = 0$.

$$\begin{aligned}
 \exp \left[i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_m^s) \right] \delta_{(m\pm 1/2)m'} &= \exp \left[ik_x(m' - m)a_0\{(1 + \epsilon_{11})\} \delta_{(m\pm 1/2)m'} \right] \\
 &= \exp \left[ik_x \left(m \pm \frac{1}{2} - m \right) a_0\{(1 + \epsilon_{11})\} \right] \\
 &= \exp \left[\pm ik_x \frac{a_0}{2} \{(1 + \epsilon_{11})\} \right]. \tag{6.113}
 \end{aligned}$$

Com esses resultados, obtém-se os termos da matriz do hamiltoniano hamiltoniano

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{B(n-1)} \rangle = -t_1 \tag{6.114}$$

e

$$\langle \phi_{An} | H_h | \phi_{Bn} \rangle = - \left(t_2 e^{i\frac{a_0}{2} k_x (1+\epsilon_{11})} + t_3 e^{-i\frac{a_0}{2} k_x (1+\epsilon_{11})} \right). \tag{6.115}$$

que possibilitam o cálculo das bandas de energia do sistema. Fazendo-se

$$\omega = \frac{a_0}{2} k_x (1 + \epsilon_{11}); \tag{6.116}$$

$$C_s = - (t_2 e^{i\omega} + t_3 e^{-i\omega}); \tag{6.117}$$

a matriz do hamiltoniano será, então:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & C_s & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ C_s^* & 0 & -t_1 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & -t_1 & 0 & C_s & & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & C_s^* & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & & & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & C_s & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & C_s^* & 0 & -t_1 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & -t_1 & 0 & C_s & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & C_s^* & 0 & \\ \vdots & & & & & & & & & \end{pmatrix} \quad (6.118)$$

Com esse hamiltoniano, a equação de Schrödinger fornece as energias do sistema, mostrados na figura 6.7. Em (a), a dispersão de energia da nanofita zigzag com $N = 24$ é mostrada ainda sem aplicação de strain. Em (b) foi aplicado um strain de 5% ($\varepsilon = 0,05$) na direção $\theta = 0$. O *gap* das bandas do *bulk* diminui um pouco e os cones de Dirac formados pelas bandas foram deslocados para um ponto com $k_x a < \pi$. No entanto, a figura ainda apresenta as simetrias partícula-buraco e de inversão temporal. A mesma análise segue para as figuras (c) e (d), os *gap* das bandas do *bulk* diminuem gradativamente e o deslocamento dos cones de Dirac é maior.

As distribuições eletrônicas dos *edge-states* da figura 6.7 podem ser vistas na figura 6.8, a partir do caso sem strain em 6.8(a) e aumentando o valor de ε até 15%. Praticamente não há alterações com relação ao strain aplicado nessa direção.

Quando o strain foi aplicado na direção $\theta = \pi/2$, a distribuição eletrônica fica como mostrado na figura 6.9, em que se vê que os cones de Dirac praticamente não se deslocam e o *gap* das bandas do *bulk* diminui conforme o módulo de strain ε aumenta.

As distribuições eletrônicas vistas na figura 6.10 mostram que os *edge-states* apresentam localização preferencial nas bordas sem strain, em 6.10(a) e deixando de ser tão concentrados na borda com o aumento de strain se este for aplicado na direção $\theta = \pi/2$, casos 6.10(b)-(d), localizando-se um pouco mais internamente na nanofita.

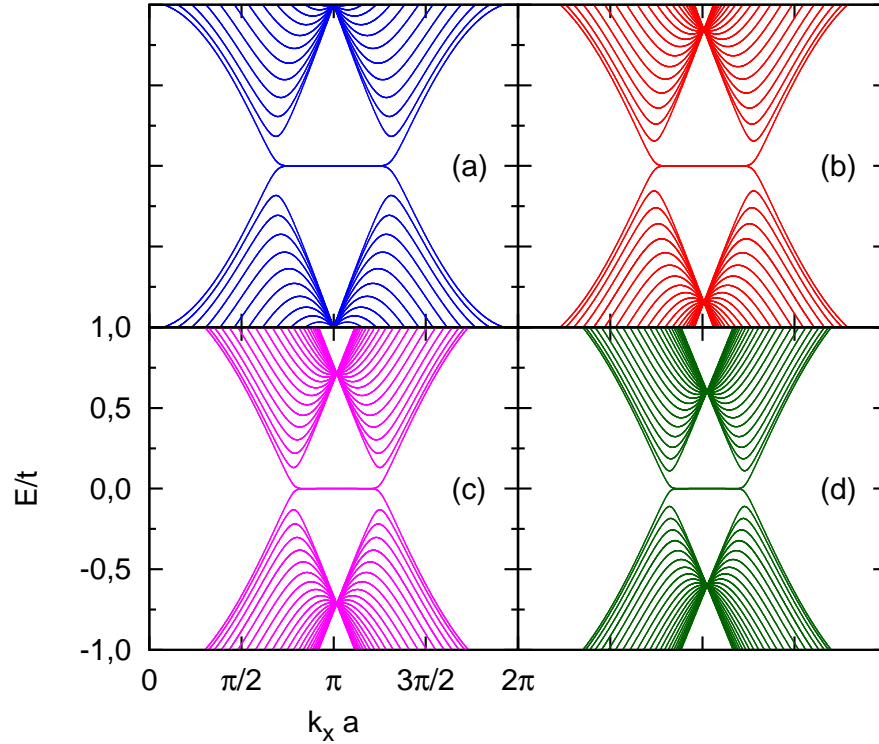


Figura 6.9: Dispersão de energia da primeira zona de Brillouin de uma nanofita zigzag com $N = 24$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = \pi/2$.

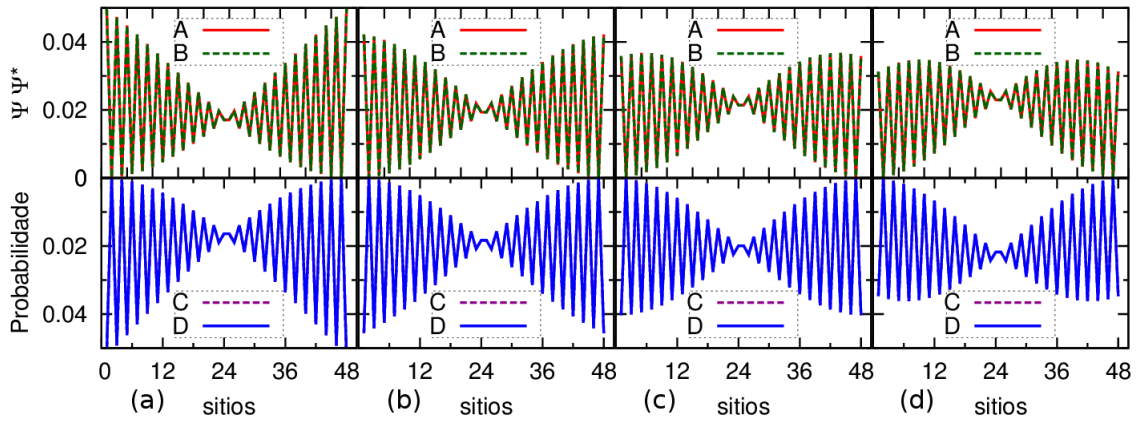


Figura 6.10: Distribuição eletrônica de uma nanofita zigzag com $N = 24$ (ou $W = 48$) e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = \pi/2$.

6.6 Strain uniaxial com spin-órbita intrínseco nas nanofitas zigzag

Para as nanofitas zigzag com acoplamento de spin-órbita intrínseco sob efeito do strain uniaxial, o hamiltoniano é semelhante ao da seção 5.4. A partir da equação 5.62, deve-se modificar os termos que incluem as distâncias entre os sítios, agora deformadas. A expressão do hamiltoniano é:

$$\begin{aligned}
 H_{so} = \frac{2i}{\sqrt{3}} \lambda_{so} \sum_{m,n} \sum_{ss'} \left\{ |A, m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A, m + 1/2, n - 1, s'| + \right. \\
 |A, m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A, m + 1, n, s'| + \\
 |A, m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A, m + 1/2, n + 1, s'| + \\
 |A, m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A, m - 1/2, n + 1, s'| + \\
 |A, m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A, m - 1, n, s'| + \\
 \left. |A, m, n, s\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A, m - 1/2, n - 1, s'| + h.c. \right\} \quad (6.119)
 \end{aligned}$$

sendo λ_{so} o parâmetro do acoplamento de spin-órbita intrínseco, $\vec{\gamma}$ o vetor cujo as componentes são as matrizes de spin de Pauli e os vetores \vec{d}_{ab}^s os que indicam as distâncias entre um átomo num sítio a e outro em um sítio b modificadas pelo strain uniaxial.

O produto vetorial $\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s$, para o primeiro termo do hamiltoniano 6.119 é, então

$$\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s = -\mu \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \hat{k}, \quad (6.120)$$

resultado idêntico ao da equação 6.37, sendo que novamente

$$\mu = (1 + \epsilon_{11})(1 + \epsilon_{22}) + \epsilon_{12}\epsilon_{21}. \quad (6.121)$$

Para os outros vizinhos o cálculo é semelhante e o resultado difere somente por um sinal, o pseudo-spin $\sigma = \pm 1$.

A função de onda eletrônica escrita para a nanofita zigzag e considerando o spin do elétron no termo s é

$$|\phi_{An}, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_m e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m^s} |A_m, n, s\rangle. \quad (6.122)$$

Como tem-se produtos do tipo $\langle A_{m''}, n'' | A_m, n \rangle = \delta_{m''m} \delta_{n''n}$, o termo $\langle \phi_{An''}, s | H_{so} | \phi_{An'}, s \rangle$ fica

$$\begin{aligned} \langle \phi_{An''}, s | H_{so} | \phi_{An'}, s \rangle &= \\ &= -i\mu \frac{\lambda_{so}}{M} \sum_{m,n;m'n'}^M e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_{m''}^s)} \delta_{m''m} \delta_{n''n} \langle s' | \{ |s\rangle \gamma_z \langle s' | \} |s\rangle \\ &\quad \{ \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{(n-1)n'} - \delta_{(m+1)m'} \delta_{nn'} + \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{(n+1)n'} \\ &\quad - \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{(n+1)n'} + \delta_{(m-1)m'} \delta_{nn'} - \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{(n-1)n'} \} \end{aligned} \quad (6.123)$$

Aplicando-se os deltas $\delta_{m''m} \delta_{n''n}$ e juntando-se os deltas restantes, tem-se que para

$$\begin{aligned} \langle \phi_{An''}, \uparrow | H_{so} | \phi_{An'}, \uparrow \rangle &= \\ &= -i\mu \frac{\lambda_{so}}{M} \sum_{m,n;m'n'}^M e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_m^s)} \{ (\delta_{(m-1)m'} - \delta_{(m+1)m'}) \delta_{nn'} \\ &\quad + (\delta_{(m+1/2)m'} - \delta_{(m-1/2)m'}) \delta_{(n-1)n'} + (\delta_{(m+1/2)m'} - \delta_{(m-1/2)m'}) \delta_{(n+1)n'} \} \end{aligned} \quad (6.124)$$

Sendo

$$\vec{R}_m^s = (1 + \epsilon_{11}) m a_0 \hat{i} + \epsilon_{21} m a_0 \hat{j}, \quad (6.125)$$

se terá, para o caso $\delta_{(m+1/2)m'}$

$$\exp\{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_m^s)\} \delta_{(m+1/2)m'} = \exp\left\{i \frac{1}{2} a_0 k_x (1 + \epsilon_{11})\right\} \quad (6.126)$$

já se considerando que o termo $k_y = 0$, uma vez que a direção y da nanofita é quantizada.

A expressão 6.124, com a soma feita sobre todas as M células unitárias da nanofita, mostra três resultados

$$\langle \phi_{An}, \uparrow | H_{so} | \phi_{An}, \uparrow \rangle = -2\lambda_{so} \mu s e n (k_x a_0 (1 + \epsilon_{11})) \quad (6.127)$$

$$\langle \phi_{An}, \uparrow | H_{so} | \phi_{A(n-1)}, \uparrow \rangle = 2\lambda_{so} \mu s e n \left(k_x \frac{a_0}{2} (1 + \epsilon_{11}) \right) \quad (6.128)$$

$$\langle \phi_{An}, \uparrow | H_{so} | \phi_{A(n+1)}, \uparrow \rangle = 2\lambda_{so} \mu s e n \left(k_x \frac{a_0}{2} (1 + \epsilon_{11}) \right) \quad (6.129)$$

O cálculo para os termos $\langle \phi_{Bn''}, \uparrow | H_{so} | \phi_{An'}, \uparrow \rangle$, dão um resultado semelhante:

$$\langle \phi_{Bn}, \uparrow | H_{so} | \phi_{Bn}, \uparrow \rangle = 2\lambda_{so} \mu s e n (k_x a_0 (1 + \epsilon_{11})) \quad (6.130)$$

$$\langle \phi_{Bn}, \uparrow | H_{so} | \phi_{B(n-1)}, \uparrow \rangle = -2\lambda_{so} \mu s e n \left(k_x \frac{a_0}{2} (1 + \epsilon_{11}) \right) \quad (6.131)$$

$$\langle \phi_{Bn}, \uparrow | H_{so} | \phi_{B(n+1)}, \uparrow \rangle = -2\lambda_{so} \mu s e n \left(k_x \frac{a_0}{2} (1 + \epsilon_{11}) \right) \quad (6.132)$$

6.6. STRAIN UNIAXIAL COM SPIN-ÓRBITA INTRÍNSECO NAS NANOFITAS ZIGZAG113

Os termos com spin down terão sinal invertido por causa da matriz de Pauli γ_z .

Nas seis equações acima, é claro que se $\varepsilon = 0$, se terá $\mu = 1$ e o argumento do seno será $k_x \frac{a_0}{2}$, repetindo os casos da seção 5.4.

A matriz do hamiltoniano pode ser escrita, então, como:

$$H = \begin{pmatrix} -t_{ss01} & C_s & t_{ss02} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ C_s^* & t_{ss01} & -t_1 & -t_{ss02} & & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ t_{ss02} & -t_1 & -t_{ss01} & C_s & & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & -t_{ss02} & C_s^* & t_{ss01} & & 0 & 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & & & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & t_{ss01} & C_s & -t_{ss02} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & C_s^* & -t_{ss01} & -t_1 & t_{ss02} & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & -t_{ss02} & -t_1 & t_{ss01} & C_s & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & t_{ss02} & C_s^* & -t_{ss01} & \\ \vdots & & & & & & & & & \end{pmatrix} \quad (6.133)$$

em que foi usado

$$\omega = \frac{a_0}{2} k_x (1 + \epsilon_{11}); \quad (6.134)$$

$$C_s = -(t_2 e^{i\omega} + t_3 e^{-i\omega}); \quad (6.135)$$

$$t_{ss01} = 2\lambda_{so} \mu \text{sen}(2\omega); \quad (6.136)$$

$$t_{ss02} = 2\lambda_{so} \mu \text{sen}(\omega); \quad (6.137)$$

e C_s^* é o complexo conjugado de C_s .

As bandas de energia do sistema são encontrados a partir do hamiltoniano 6.133. Na figura 6.11, foram usados os parâmetros $N = 24$ e $\lambda_{so} = 0,05t$ com o strain variando entre $\varepsilon = 0$ em (a) até $\varepsilon = 0,15$ em (d). É possível notar que o ângulo de aplicação de strain além de deslocar os cones de Dirac altera a velocidade $v_x = \partial E(k)/\partial k_x$ das correntes eletrônicas dos *edge-states*, sendo que para $\theta = 0$ a velocidade tende a diminuir para valores maiores de ε . Em contrapartida, quando o strain é aplicado na direção $\theta = \pi/2$, nos painéis da figura 6.12 as velocidades dos *edge-states* aumentam com o aumento de ε . A figura de distribuição eletrônica 6.13 mostra dois casos em que as correntes eletrônicas são distribuídas igualmente; o módulo ou ângulo de aplicação de strain não troca a posição das bandas.

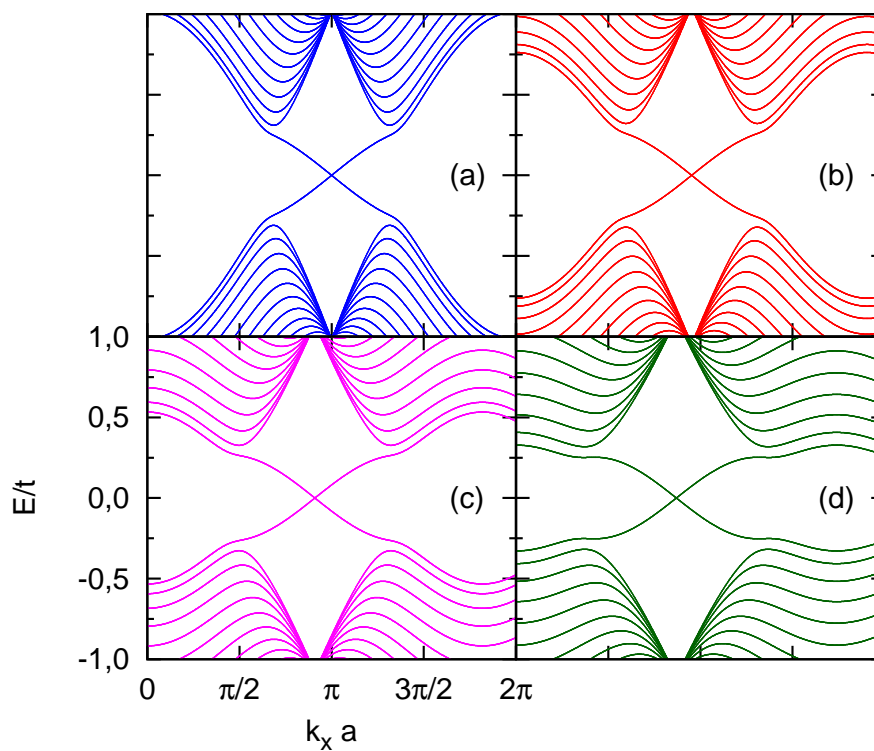


Figura 6.11: Dispersão de energia da primeira zona de Brillouin de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_{so} = 0,05t$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d) para $\theta = 0$; e $\varepsilon = 0$ em (e), $\varepsilon = 0,05$ em (f), $\varepsilon = 0,10$ em (g) e $\varepsilon = 0,15$ em (h) para $\theta = \pi/2$

6.6. STRAIN UNIAXIAL COM SPIN-ÓRBITA INTRÍNSECO NAS NANOFITAS ZIGZAG115

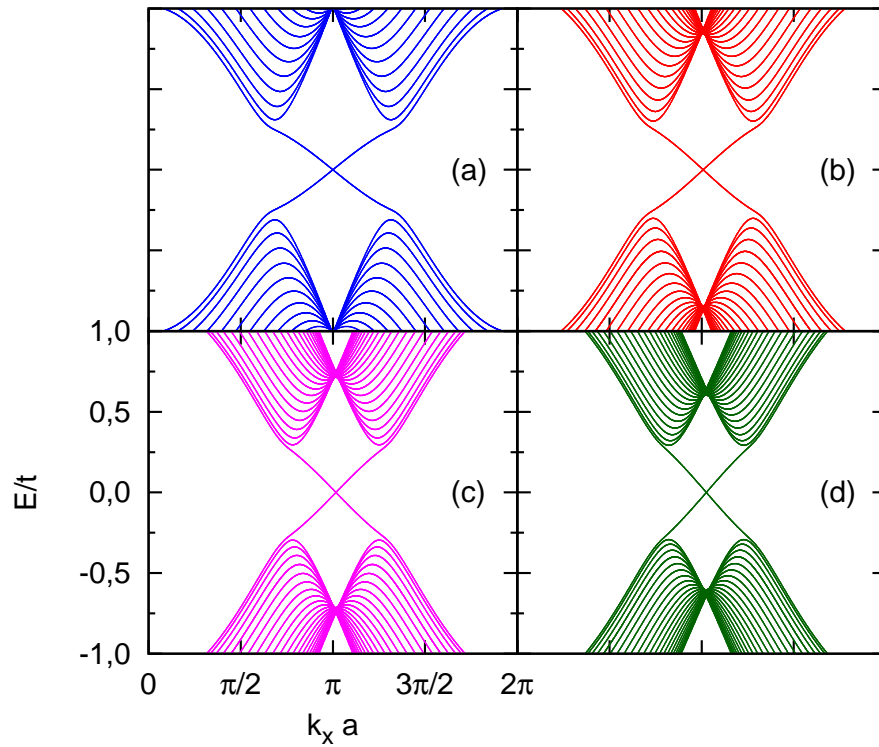


Figura 6.12: Dispersão de energia da primeira zona de Brillouin de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_{so} = 0,05t$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = \pi/2$.

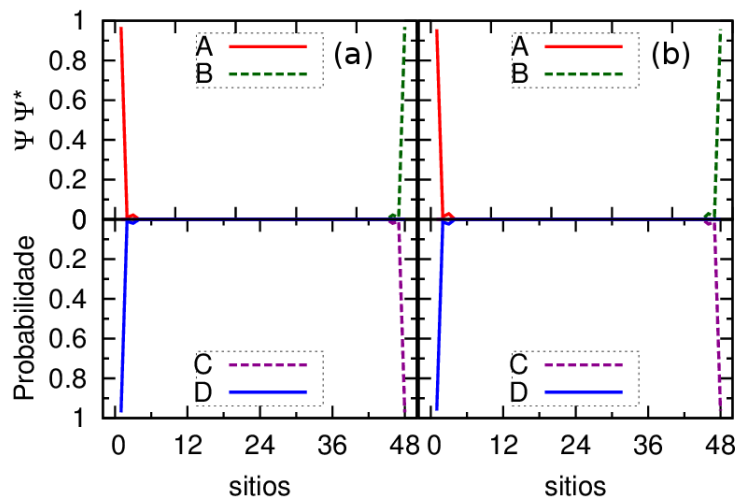


Figura 6.13: Distribuição eletrônica dos *edge-states* de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_{so} = 0,05t$ e $\varepsilon = 0,05$ aplicado na direção $\theta = 0$ em (a) e $\theta = \pi/2$ em (b).

6.7 Strain uniaxial com spin-órbita Rashba nas nanofitas zigzag

A parte de Rashba do hamiltoniano de uma nanofita zigzag quando strain uniaxial é aplicado é semelhante ao caso da seção 5.5, quando o strain não foi considerado.

$$\begin{aligned}
H_R = & i \sum_{m,n}^N \sum_{ss'} [|A_m, n, s\rangle (\vec{u}_{n(n-1)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_m, n-1, s'| + \\
& + |A_m, n, s\rangle (\vec{u}_{m(m+1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m+1/2}, n, s'| + \\
& + |A_m, n, s\rangle (\vec{u}_{m(m-1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m-1/2}, n, s'| + h.c] \quad (6.138)
\end{aligned}$$

com a somatória s representando a parte de spin e

$$\vec{u}_{n(n-1)} = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{n(n-1)}^s; \quad (6.139)$$

$$\vec{u}_{m(m+1/2)} = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{m(m+1/2)}^s; \quad (6.140)$$

$$\vec{u}_{m(m-1/2)} = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{m(m-1/2)}^s. \quad (6.141)$$

As distâncias entre dois sítios vizinhos são, agora, modificadas por strain de acordo com a equação $\vec{d}_{ij}^s = (I + \epsilon)\vec{d}_{ij}$, como na equação 6.26, atribuídos a cada um dos três primeiros vizinhos de um átomo de carbono:

$$\vec{d}_1^s = -a\epsilon_{12}\hat{i} - (1 + \epsilon_{22})a\hat{j}; \quad (6.142)$$

$$\vec{d}_2^s = \frac{a}{2} \left[(1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right] \hat{i} + \frac{a}{2} \left[\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right] \hat{j}; \quad (6.143)$$

$$\vec{d}_3^s = \frac{a}{2} \left[-(1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right] \hat{i} + \frac{a}{2} \left[-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right] \hat{j}; \quad (6.144)$$

sendo que esses três vetores se referem a vizinhos de um átomo de sítio A.

Esses resultados permitem o cálculo dos termos \vec{u}_{ij} :

$$\vec{u}_{n(n-1)} = -\lambda_R \{ (1 + \epsilon_{22})\hat{i} - \epsilon_{12}\hat{j} \}; \quad (6.145)$$

$$\vec{u}_{m(m+1/2)} = \frac{\lambda_R}{2} \left\{ \left(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \hat{i} - \left((1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right) \hat{j} \right\}; \quad (6.146)$$

$$\vec{u}_{m(m-1/2)} = \frac{\lambda_R}{2} \left\{ \left(-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \hat{i} - \left(-(1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right) \hat{j} \right\}; \quad (6.147)$$

Para se resolver a equação de Schrödinger, a função de onda é

$$|\Psi\rangle = \sum_{n,s} \alpha(\vec{k}, n, s) |\phi_{An,s}\rangle + \beta(\vec{k}, n, s) |\phi_{Bn,s}\rangle \quad (6.148)$$

6.7. STRAIN UNIAXIAL COM SPIN-ÓRBITA RASHBA NAS NANOFITAS ZIGZAG117

e função de onda de um elétron é:

$$|\phi_A, n, s\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_m e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} |A_m, n, s\rangle. \quad (6.149)$$

com $\vec{R}_m^s = (1 + \epsilon_{11})ma_0\hat{i} + \epsilon_{21}ma_0\hat{j}$, igualmente ao definido na equação 6.108. O termo $\langle\phi_A, n'', s| H_R |\phi_B, n', s\rangle$, então, é

$$\begin{aligned} &\langle\phi_A, n'', \uparrow| H_R |\phi_B, n', \downarrow\rangle = \\ &= i \frac{1}{M} \sum_{\langle m, n \rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_{m''}^s)} \{ \langle A_{m''}, n'', s | A_m, n, s \rangle (\vec{u}_{n(n-1)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_m, n-1, s' | B_{m'}, n', s \rangle \\ &+ \langle A_{m''}, n'', s | A_m, n, s \rangle (\vec{u}_{m(m+1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m+1/2}, n, s' | B_{m'}, n', s \rangle \\ &+ \langle A_{m''}, n'', s | A_m, n, s \rangle (\vec{u}_{m(m-1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m-1/2}, n, s' | B_{m'}, n', s \rangle + h.c. \end{aligned} \quad (6.150)$$

em que os produtos podem ser transformados em deltas, e por isso

$$\begin{aligned} &\langle\phi_A, n'', \uparrow| H_R |\phi_B, n', \downarrow\rangle = \\ &= i \frac{1}{M} \sum_{\langle m, n \rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{m'}^s - \vec{R}_{m''}^s)} \delta_{m''m} \delta_{n''n} \{ \langle s'' | s \rangle (\vec{u}_{n(n-1)} \cdot \vec{\gamma}) \delta_{mm'} \delta_{(n-1)n'} \langle s | s' \rangle \\ &+ \langle s'' | s \rangle (\vec{u}_{m(m+1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \delta_{m(m+1/2)} \delta_{nn'} \langle s | s' \rangle \\ &+ \langle s'' | s \rangle (\vec{u}_{m(m-1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \delta_{m(m-1/2)} \delta_{nn'} \langle s | s' \rangle \} \end{aligned} \quad (6.151)$$

Esse resultado pode ser separado em dois termos. O primeiro,

$$\begin{aligned} &\langle\phi_A, n, \uparrow| H_R |\phi_B, n-1, \downarrow\rangle = \\ &= i \frac{\lambda_R}{M} \sum_{\langle m, n \rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_m - \vec{R}_m)} \{ \langle s'' | s \rangle (-\{(1 + \epsilon_{22})\gamma_x - \epsilon_{12}\gamma_y\}) \langle s | s' \rangle \} \\ &= -i\lambda_R \{(1 + \epsilon_{22}) + i\epsilon_{12}\} \end{aligned} \quad (6.152)$$

$$= -i\lambda_R \rho_1 \quad (6.153)$$

em que foi utilizado $\rho_1 = 1 + \epsilon_{22} + i\epsilon_{12}$, da expressão 6.88; e o segundo,

$$\begin{aligned}
& \langle \phi_{An}, \uparrow | H_R | \phi_{Bn'}, \downarrow \rangle = \\
& = i \frac{\lambda_R}{M} \sum_{\langle m,n \rangle} \sum_{ss'} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)} \left\{ \langle s'' | s \rangle \left[\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \gamma_x - \right. \right. \\
& - \left. \frac{1}{2} \left((1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right) \gamma_y \right] \delta_{(m+1/2)m'} \delta_{nn'} \langle s | s' \rangle \\
& + \langle s'' | s \rangle \left[\frac{1}{2} \left(-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) \gamma_x - \right. \\
& \left. \left. - \frac{1}{2} \left(-(1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right) \gamma_y \right] \delta_{(m-1/2)m'} \delta_{nn'} \langle s | s' \rangle \right\} \quad (6.154)
\end{aligned}$$

sendo que as exponenciais foram resolvidas a exemplo de

$$\begin{aligned}
\exp\{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{m'} - \vec{R}_m)\} \delta_{(m+1/2)m'} & = \exp\left\{i \frac{k_x a_0}{2} (1 + \epsilon_{11})\right\} \\
& = \exp\{i\omega\} \quad (6.155)
\end{aligned}$$

já se considerando que o termo $k_y = 0$, como na seção anterior, uma vez que a direção y da nanofita é quantizada; também com a definição

$$\omega = \frac{k_x a_0}{2} (1 + \epsilon_{11}) \quad (6.156)$$

Isso leva o termo da equação 6.154 a ser

$$\begin{aligned}
& \langle \phi_{An}, \uparrow | H_R | \phi_{Bn}, \downarrow \rangle = \\
& = i\lambda_R \left\{ e^{i\omega} \left[\frac{1}{2} \left(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) + i \frac{1}{2} \left((1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right) \right] \right. \\
& \left. + e^{-i\omega} \left[\frac{1}{2} \left(-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right) + i \frac{1}{2} \left(-(1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right) \right] \right\}. \quad (6.157)
\end{aligned}$$

Agrupando as exponenciais

$$\begin{aligned}
& \langle \phi_{A, n}, \uparrow | H_R | \phi_{B, n}, \downarrow \rangle = \\
& = i\lambda_R \left\{ [e^{i\omega} + e^{-i\omega}] \left[\frac{1}{2} (1 + \epsilon_{22} + i\epsilon_{12}) \right] + [e^{i\omega} - e^{-i\omega}] \left[\frac{\sqrt{3}}{2} ((1 + \epsilon_{11})i + \epsilon_{21}) \right] \right\} \quad (6.158)
\end{aligned}$$

pode simplificar a equação para

$$\langle \phi_{A, n}, \uparrow | H_R | \phi_{B, n}, \downarrow \rangle = -i\lambda_R \left\{ 2\cos(\omega) \left[-\frac{1}{2}\rho_1 \right] + 2\sen(\omega) \frac{\sqrt{3}}{2}\rho_2 \right\}, \quad (6.159)$$

6.7. STRAIN UNIAXIAL COM SPIN-ÓRBITA RASHBA NAS NANOFITAS ZIGZAG119

semelhante à equação 5.90 do caso sem strain. Finalmente essa equação é escrita como

$$\langle \phi_A, n, \uparrow | H_R | \phi_B, n, \downarrow \rangle = -i\lambda_R \left\{ -\rho_1 \cos(\omega) + \sqrt{3}\rho_2 \sin(\omega) \right\}. \quad (6.160)$$

Para os termos $\langle \phi_B, n, \uparrow | H_R | \phi_A, n, \downarrow \rangle$, pode-se calcular

$$\langle \phi_B, n, \uparrow | H_R | \phi_A, n, \downarrow \rangle = i\lambda_R \left\{ -\rho_1 \cos(\omega) - \sqrt{3}\rho_2 \sin(\omega) \right\}. \quad (6.161)$$

A matriz do hamiltoniano tem a mesma forma da matriz 5.94 e é dada por

$$H = \begin{pmatrix} 0 & C_s & 0 & 0 & \dots & 0 & -i\varphi_- & 0 & 0 & \dots \\ C_s^* & 0 & -t_1 & 0 & & i\varphi_+ & 0 & i\lambda_R \rho_1 & 0 & \\ 0 & -t_1 & 0 & C_s & & 0 & -i\lambda_R \rho_1 & 0 & -i\varphi_- & \\ 0 & 0 & C_s^* & 0 & & 0 & 0 & i\varphi_+ & 0 & \\ \vdots & & & & & & & & & \\ 0 & i\varphi_-^* & 0 & 0 & & 0 & C_s & 0 & 0 & \\ -i\varphi_+^* & 0 & -i\lambda_R \rho_1 & 0 & & C_s^* & 0 & -t_1 & 0 & \\ 0 & i\lambda_R \rho_1 & 0 & i\varphi_-^* & & 0 & -t_1 & 0 & C_s & \\ 0 & 0 & -i\varphi_+^* & 0 & & 0 & 0 & C_s^* & 0 & \\ \vdots & & & & & & & & & \end{pmatrix} \quad (6.162)$$

mas agora com

$$C_s = -(t_2 e^{i\omega} + t_3 e^{-i\omega}); \quad (6.163)$$

$$\varphi_- = \lambda_R \left\{ -\rho_1 \cos(\omega) + \sqrt{3}\rho_2 \sin(\omega) \right\}; \quad (6.164)$$

$$\varphi_+ = \lambda_R \left\{ -\rho_1 \cos(\omega) - \sqrt{3}\rho_2 \sin(\omega) \right\}. \quad (6.165)$$

As bandas energia mostradas na figura 6.14 são relativas à nanofita com largura $N = 24$ e com parâmetro de acoplamento Rashba de spin-órbita $\lambda_R = 0, 20t$. O strain uniaxial foi aplicado em um ângulo $\theta = 0$ e seu módulo varia de $\varepsilon = 0$ em (a) a $\varepsilon = 0, 15$ em (d). Essa mudança não afeta o *gap* das bandas do *bulk* significativamente mas estas são deslocadas mas as bandas no *edge-state* se aproximam bastante e próximo à região do ponto K e K' tendem a ser degeneradas. Quando o ângulo de aplicação de strain é $\theta = \pi/2$, caso da figura 6.15, as bandas do *bulk* têm seu *gap* muito reduzido, chegando quase a zero, e os dois cones de Dirac se aproximam, tendendo ao ponto $k_x a = \pi$.

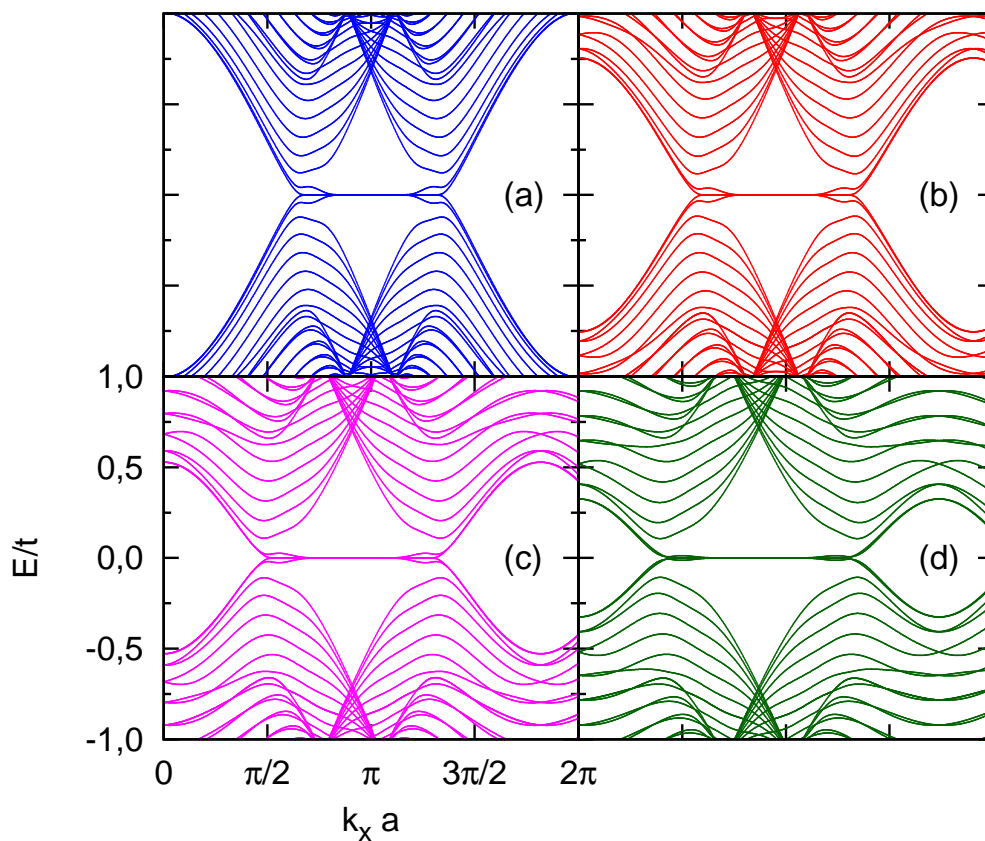


Figura 6.14: Dispersão de energia da 1^aBZ de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_R = 0, 20t$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0,05$ em (b), $\varepsilon = 0,10$ em (c) e $\varepsilon = 0,15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = 0$.

6.7. STRAIN UNIAXIAL COM SPIN-ÓRBITA RASHBA NAS NANOFITAS ZIGZAG121

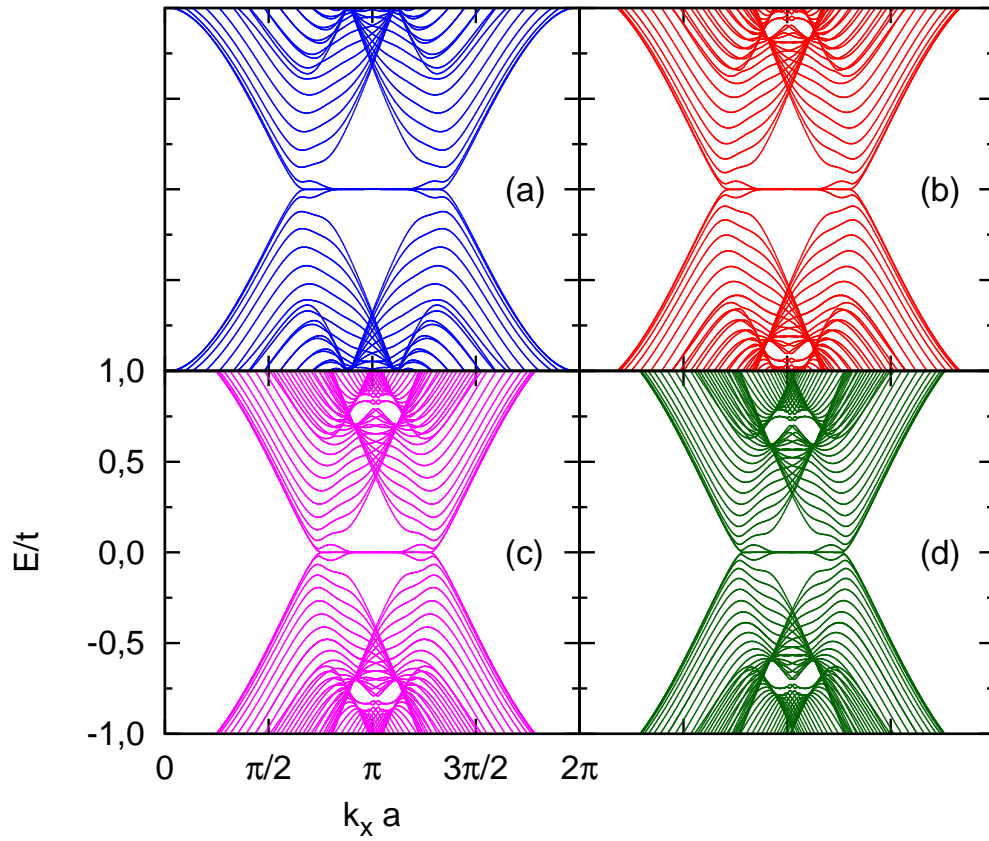


Figura 6.15: Dispersão de energia da 1^aBZ de uma nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_R = 0, 20t$ e $\varepsilon = 0$ em (a), $\varepsilon = 0, 05$ em (b), $\varepsilon = 0, 10$ em (c) e $\varepsilon = 0, 15$ em (d); todos os ângulos de aplicação de strain são $\theta = \pi/2$.

Capítulo 7

Transição de fase topológica na nanofita

Nos capítulos anteriores foram mostrados como cada tipo de interação, spin-órbita intrínseco, Rashba e campo de exchange, altera isoladamente as propriedades eletrônicas do grafeno e das nanofitas, modificados ou não por strain. Neste capítulo se considerará mais de uma dessas interações em conjunto. O intuito é observar novos estados eletrônicos, como o efeito Hall quântico anômalo e o efeito Hall quântico de spin com quebra de simetria temporal [78, 80].

Os dois estados, Hall quântico de spin (QSH) e Hall quântico anômalo (QAH), possuem estados de borda topologicamente protegidos, em que o retro-espalhamento do elétron é proibido, fazendo com que esses sistemas sejam propícios para aplicação em dispositivos eletrônicos que possuam transporte eletrônico sem dissipação [5, 9, 15, 94]. No entanto, o estado QSH e o QAH são estados muito diferentes da matéria. O QSH é caracterizado por um *gap* completamente isolante no *bulk* e estados de borda *helical* sem *gap*, em que spins opostos se propagam em direções opostas em cada borda e são protegidos pela simetria de inversão temporal (TRS) [8, 9, 14, 74, 94, 95, 96, 97]. Já no caso do QAH, os estados de borda helicais sem *gap* são substituídos por estados de borda quirais, também sem *gap*, em que um dos canais de spin é suprimido por causa da quebra da TRS [5, 98, 99]. Portanto, para se observar transições de fase topológicas (QPT) entre estados QSH e QAH, é necessário se aplicar uma perturbação que possa quebrar a TRS [100]. Um campo magnético externo é uma solução em potencial mas do ponto de vista de aplicabilidade, um campo de exchange interno (EX), que leva a banda de spin principal a estar completamente preenchida enquanto a banda

de spin minoritária fica vazia, se torna uma alternativa mais atraente [5, 17, 101, 102]. Como já é conhecido, um campo pseudo-magnético induzido por strain B_S leva a quantização de Landau e a estados de borda que circulam em direções opostas [103, 104], e o strain cria no grafeno campos pseudo-magnéticos. Então, sem quebrar a TRS, o strain pode induzir um *gap* no *bulk* e bordas sem *gap* helicais. Assim, strain, EX e SOC podem ser usadas como ferramentas versáteis para se controlar transições de fase topológicas [17, 105]. Estes fatos foram os motivadores para que se propusesse uma maneira em que o acoplamento spin-órbita, strain uniaxial mecânico strain e exchange, ao invés de um campo magnético externo, fossem utilizados para se realizar transições de fase nas nanofitas de grafeno.

7.1 Transições de fase nas nanofitas zigzag

Na figura 7.1(a) mostra-se a dispersão eletrônica de uma nanofita em que foi considerado um parâmetro de exchange de $\lambda_{ex} = 0,20t$ e acoplamento de spin-órbita intrínseco $\lambda_{so} = 0,06t$. As bandas apresentam degenerescência de spin e as simetrias partícula-buraco e de inversão temporal ainda estão presentes. As bandas do *bulk* são isolantes, apresentando um grande *gap* e os *edge-states* não possuem *gap*, o que caracteriza esse sistema como um isolante topológico. Os *edge-states* estão destacados e foram nomeados de A a D seguindo o mesmo padrão dos capítulos anteriores; o ponto tracejado indica a energia de Fermi, que tem valor $E_F = 0,05t$. A distribuição eletrônica destas bandas, em 7.1(b), mostra que os *edge-states* A e B se encontram em bordas opostas e as bandas A e C junto à mesma borda da nanofita. Na figura 7.1(c) são mostradas as direções de propagação das correntes eletrônicas, a partir da análise da velocidade das mesmas. As bandas A e C possuem direção de propagação opostas, bem como os *edge-states* B e D que também se propagam em sentido contrário. Com essas características vê-se que a nanofita zigzag está no estado Hall quântico de spin. Esse resultado foi mostrado no artigo [80].

Apesar de ser muito parecido com o caso discutido na seção 5.4, há uma diferença fundamental: o campo de exchange quebra a simetria temporal. Por esse motivo, esse estado é chamado de efeito pseudo-Hall quântico de spin [80] ou efeito Hall quântico de spin com quebra de simetria temporal [85]. Mesmo esse estado não preservando a simetria temporal, o espalhamento entre os elétrons por impurezas é baixo, o que implica em um transporte de

spin de baixa dissipação.

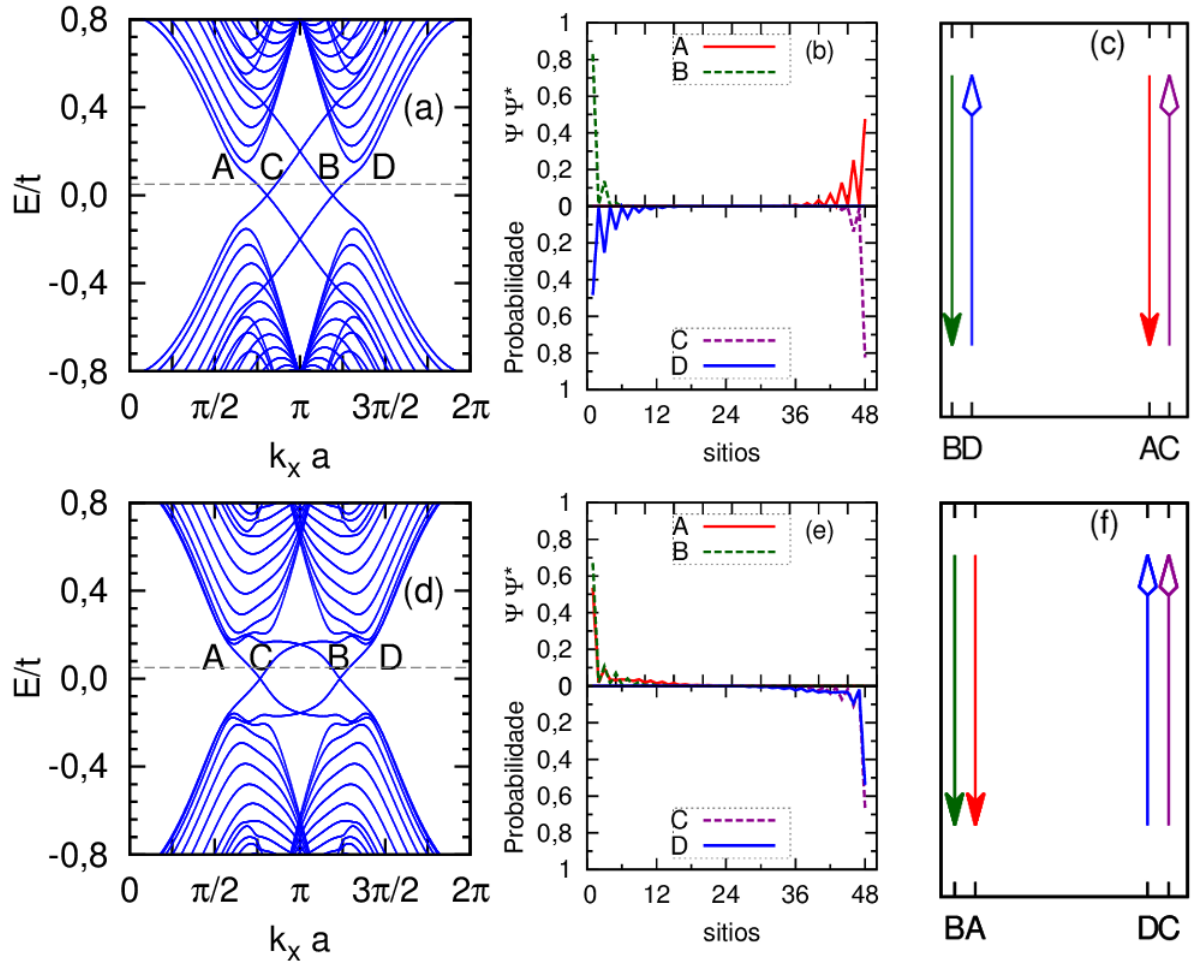


Figura 7.1: Nanofita zigzag com $N = 24$, $\lambda_{ex} = 0,20t$ e $\lambda_{so} = 0,06t$, com sua dispersão de energia (a), distribuição eletrônica de seus *edge-states* (b) e suas direções de propagação (c).

As propriedades eletrônicas das nanofitas zigzag podem ser controladas para se obter outro estado eletrônico com a aplicação do campo de exchange, agora juntamente com a interação Rashba de spin-órbita: o efeito Hall quântico anômalo. Considerando uma nanofita com largura $N = 24$, parâmetro de exchange $\lambda_{ex} = 0,20t$ e acoplamento Rashba de spin-órbita $\lambda_R = 0,20t$, pode-se fazer a figura de dispersão de energia mostrada em 7.1(d). Observando-se as figuras 7.1(e)-(f), percebe-se que as bandas de *edge-state* A e B se localizam na mesma lateral da nanofita enquanto as *edge-states* C e D estão do lado oposto. As direções de propagação individual das bandas se mantêm mas por causa da distribuição eletrônica as correntes de um mesmo lado se propagam na mesma direção. Essas caracte-

terísticas são associadas ao estado Hall quântico anômalo. O acoplamento Rashba de spin-órbita é o fator responsável por levar a nanofita zigzag a esse estado. Mesmo em uma nanofita em que predomine o efeito Hall quântico de spin, o aumento do parâmetro de Rashba λ_R destrói esse estado através da quebra de simetria de espelhamento [78]. Os *edge-states* irão se manter dessa maneira sempre que a condição $\lambda_R < 3\sqrt{3}\lambda_{so}$ se mantiver [9].

Experimentalmente, o efeito Hall quântico anômalo tem realização mais fácil do que o Hall quântico de spin [106, 107], pois o parâmetro de acoplamento de spin-órbita de Rashba é mais fácil de se controlar e possui valores mais altos, como quando o grafeno é crescido sobre um substrato de Ni, em que se observa valores de λ_R entre $13 - 225\text{meV}$ [77].

7.2 Efeito do strain sobre transição de fase topológica

Ajustando-se apropriadamente o módulo e ângulo do strain uniaxial, os parâmetros de exchange e spin-órbita intrínseco é possível controlar transições eletrônicas nas nanofitas zigzag. Se propõe, então, um dispositivo eletrônico baseado em uma nanofita de grafeno que possibilite esses ajustes de maneira que se obtenha o estado eletrônico desejado. Um esquema para esse dispositivo é mostrado na figura 7.2. Na seção seguinte, serão analisados os valores dos parâmetros necessários para que essas transições ocorram sob influência do strain.

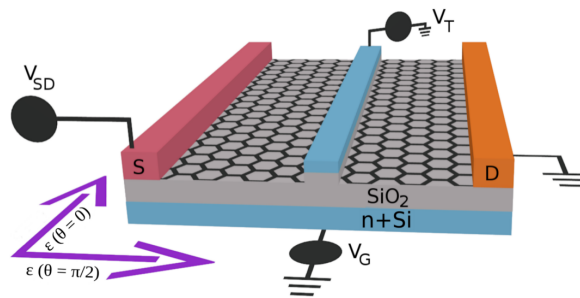


Figura 7.2: Representação esquemática de um dispositivo de nanofita zigzag, depositado sobre SiO_2 . A corrente elétrica é controlada entre S e D usando o potencial (V_{SD}). O strain uniaxial é aplicado ao longo das duas direções, como indicados pelas setas. O parâmetro de Rashba pode ser alterado pelas voltagens superior (V_T) e inferior (V_G).

Considerando-se somente a aplicação do campo de exchange e do acoplamento spin-órbita intrínseco, pode-se observar a transição entre o estado Hall quântico de spin e o estado Hall quântico anômalo, que também pode ocorrer sob influência do strain. A diferença básica entre os dois estados é o número de bandas de *edge-states*: no primeiro, duas correntes eletrônicas se acumulam em cada borda; no segundo, apenas uma. Mais detalhes sobre esses estados foram dados no capítulo 2.

Fixando um valor para o parâmetro λ_{ex} e variando-se o módulo de strain ε entre $-0,15$ a $0,15$, com ângulo de aplicação $\theta = 0$, o parâmetro λ_{so} é definido e as figuras de distribuição eletrônica 7.3 puderam ser feitas. Elas mostram a transição de estados da seguinte maneira: na figura 7.3(a) foi considerado um parâmetro $\lambda_{so} = 0,03t$; as bandas B e C se localizam muito próximas às bordas e quase não são influenciadas por aplicação de strain. Além disso,

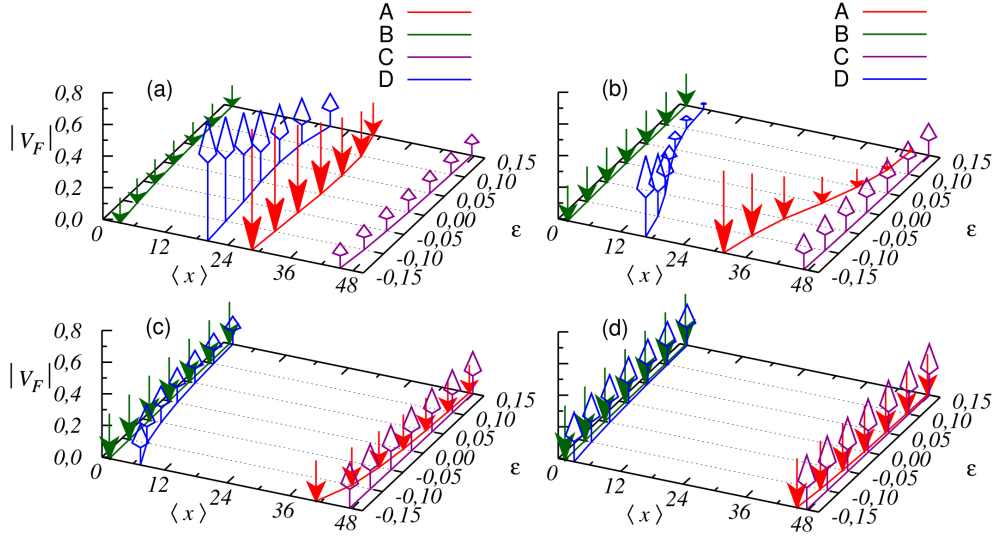


Figura 7.3: Posições médias $\langle x \rangle$ dos *edge-states* sob influência de strain ε , sendo $\lambda_{ex} = 0,15t$ e $\lambda_{so} = 0,03t$ em (a), $\lambda_{so} = 0,04t$ em (b), $\lambda_{so} = 0,05t$ em (c) e $\lambda_{so} = 0,06t$ em (d).

as bandas A e D têm sua localização média $\langle x \rangle$ muito próxima ao centro da nanofita, não participando dos *edge-states*. A diferença entre o módulo das velocidades das bandas é bastante notável: as bandas B e C possuem velocidade notavelmente inferior à velocidade das bandas A e D. As direções da velocidade e a partir da análise dessas bandas pode-se dizer que a nanofita se encontra no estado Hall quântico anômalo. O aumento para $\lambda_{so} = 0,04t$ produz uma mudança no comportamento das bandas. Neste caso, o strain influencia fortemente o estado eletrônico em que a nanofita irá se encontrar, como pode ser visto na figura 7.3(b). Assim, quando o módulo de strain é $\varepsilon = -0,15$, equivalente a uma compressão de 15% nas distâncias interatômicas, a nanofita se encontra no estado Hall quântico anômalo e seu acréscimo, até $\varepsilon = 0,15$ leva a uma transição de estados fazendo com que a nanofita tenha duas correntes eletrônicas distintas acumuladas em suas bordas. A análise da direção de velocidades nos permite dizer que o sistema se encontra agora no estado Hall quântico de spin. Um detalhe na velocidade é a forte diminuição em seu módulo nas bandas A e D com o aumento do strain. A velocidade dessas bandas se aproxima de zero quando o strain é muito forte. Se for feito um último aumento no parâmetro de spin-órbita para $\lambda_{so} = 0,05t$, a forte dependência da posição e velocidade das bandas com relação ao strain deixa de ser observada e a nanofita será encontrada sempre no estado Hall quântico de spin.

A partir de quatro casos retirados da figura acima, 7.3, a dispersão de energia da nanofita com $N = 24$ foi feita, figura 7.4. Sempre com $\lambda_{ex} = 0,15t$ tomou-se valores para os outros parâmetros de forma que $\lambda_{so} = 0,03t$ em (a); $\lambda_{so} = 0,04t$, $\varepsilon = -0,10$ e $\theta = 0$ em (b), $\lambda_{so} = 0,04t$, $\varepsilon = 0,10$ e $\theta = 0$ em (c) e $\lambda_{so} = 0,06t$ em (d).

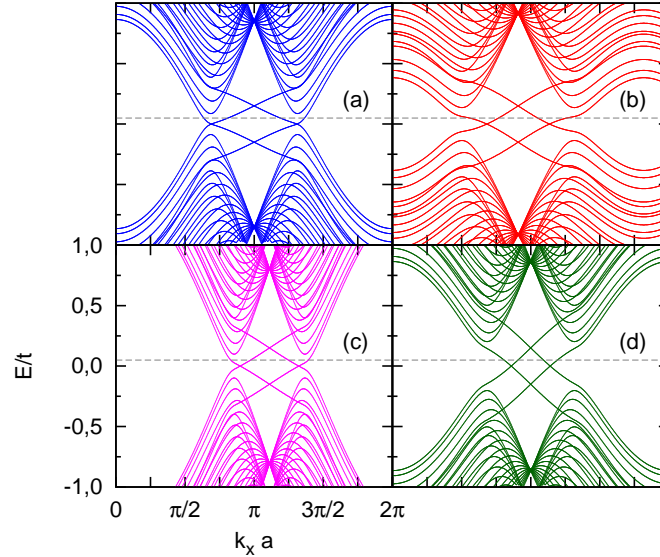


Figura 7.4: Dispersão de energia de nanofitas zigzag de $N = 24$, com $\lambda_{ex} = 0,15t$ em todos os casos e $\lambda_{so} = 0,03t$ em (a); $\lambda_{so} = 0,04t$, $\varepsilon = -0,10$ e $\theta = 0$ em (b), $\lambda_{so} = 0,04t$, $\varepsilon = 0,10$ e $\theta = 0$ em (c) e $\lambda_{so} = 0,06t$ em (d).

Se o parâmetro de exchange for aumentado para $\lambda_{ex} = 0,20t$, o valor de λ_{so} necessário para que a fita possua forte dependência de spin é aumentado. Nesse sistema, vê-se que é necessário que $\lambda_{so} < 0,05t$ para que a nanofita se encontre no estado Hall quântico anômalo (que pode ser visto na figura 7.5(a)); com $\lambda_{so} = 0,05t$, o módulo de strain controla o estado em que se encontra a nanofita, figura 7.5(b); e se $\lambda_{so} > 0,05t$, o sistema será encontrado no estado Hall quântico de spin, como na figura 7.5(c). Pode-se concluir que um aumento no parâmetro λ_{ex} eleva o valor de λ_{so} necessário para que o sistema mude para o estado Hall quântico de spin.

Se a simetria especular com relação ao plano do grafeno é preservada, o acoplamento de spin-órbita intrínseco que abre um *gap* próximo ao ponto de Dirac é o único termo dependente de spin permitido no hamiltoniano. Se essa simetria fosse quebrada, o termo de Rashba seria permitido, misturando estados de spin up e spin down perto dos cruzamentos das bandas. Por

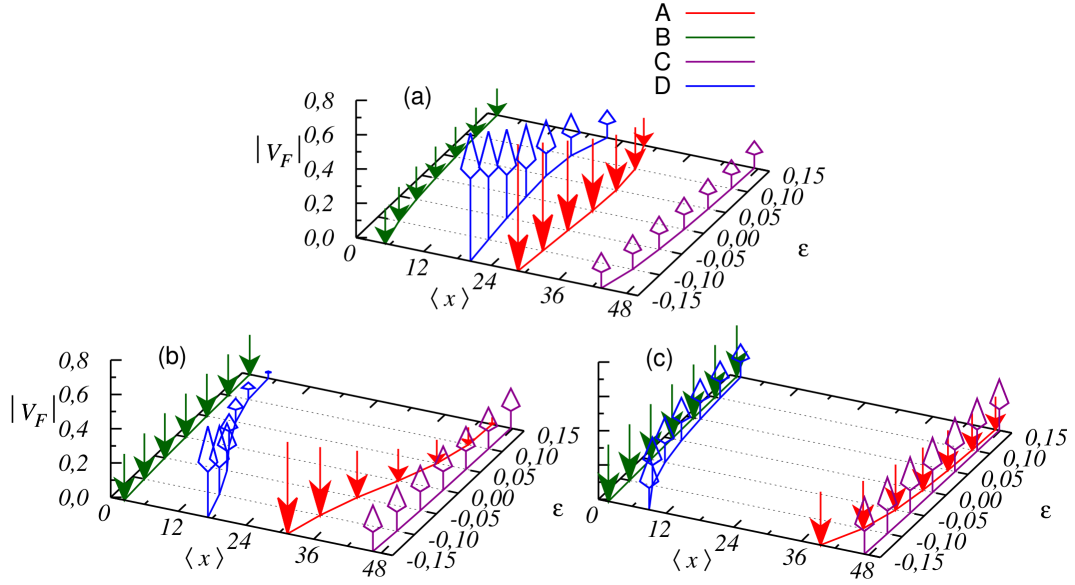


Figura 7.5: Posições médias $\langle x \rangle$ dos *edge-states* sob influência de strain ϵ , sendo $\lambda_{ex} = 0, 20t$ e $\lambda_{so} = 0, 04t$ em (a), $\lambda_{so} = 0, 05t$ em (b), $\lambda_{so} = 0, 06t$ em (c).

outro lado, o spin-órbita Rashba faz o valor da banda de valência aumentar e da banda de condução diminuir, reduzindo o *gap* do *bulk*. A figura 7.6 mostra o efeito dos acoplamentos intrínseco e Rashba e o exchange sobre a estrutura de bandas da nanofita zigzag. Repare na figura 7.6(a) que o balanço entre o spin-órbita intrínseco e o Rashba levantam parcialmente as degenerescências do *bulk* e dos *edge-states*, quebra a simetria partícula-buraco e aumenta o valor das bandas de valência. Por sua vez, a presença do exchange quebra a TRS e aumenta a degenerescência de Kramer do spin do elétron, aumentando as bandas de spin up e abaixando as de spin down, como mostrado na figura 7.6 (b). Em forte contraste com a figura 7.6 (b), a presença dos termos de Rashba e exchange induz o acoplamento entre estados do *bulk* e da borda o que significativamente modifica a velocidade de grupo dos *edge states*, como pode se notar na figura 7.6 (c). A combinação dos efeitos de spin-órbita intrínseco, Rashba e exchange são mostrados na figura 7.6 (d). Neste caso, o nível de Fermi entra nas bandas de valência e as energias de alguns modos da borda são menores do que o máximo da banda de valência.

O acoplamento de spin-órbita intrínseco pode ter sua influência aumentada com impurezas (adátomo) depositado sobre a superfície do grafeno [108]. Assim, é possível se perguntar

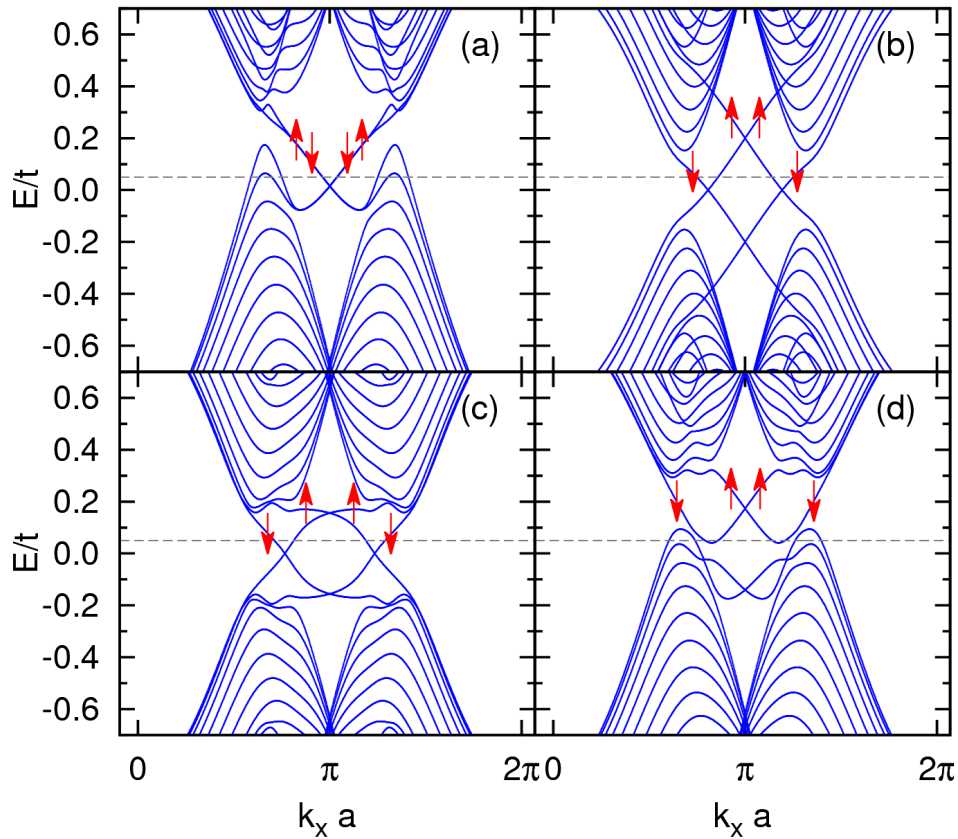


Figura 7.6: Estrutura de banda de uma nanofita zigzag com termos de spin-órbita intrínseco e Rashba (a), spin-órbita intrínseco e campo de exchange (b), spin-órbita Rashba e campo de exchange (c), spin-órbita intrínseco e Rashba e campo de exchange (d). O nível de Fermi é tomado como acima de zero, como indicado pela linha horizontal segmentada e, portanto, possui quatro interseções com as bandas de condução. Isso dá origem a quatro correntes nas bordas das nanofitas. Os parâmetros a seguir foram usados: (a) $\lambda_{so} = 0,06t$, $\lambda_R = 0,20t$; (b) $\lambda_{so} = 0,06t$, $M = 0,20t$; (c) $\lambda_R = 0,20t$, $\lambda_{ex} = 0,20t$; (d) $\lambda_{so} = 0,06t$, $\lambda_R = 0,20t$ e $M = 0,20t$ para a nanofita com largura $W = 48$. As setas indicam as componentes principais de spin.

como a fase em uma nanofita de grafeno muda conforme o acoplamento intrínseco é alterado. A figura 7.7 (painel esquerdo) mostra os efeitos do parâmetro λ_{so} no espectro de energia de uma nanofita zigzag com $W=48$, $\lambda_R = 0,20t$, $M = 0,20t$ e strain uniaxial $\varepsilon = 0,10$ ao longo de $\theta = 0$. O nível de Fermi está em $E_F = 0,05t$. A distribuição de probabilidade de cada um

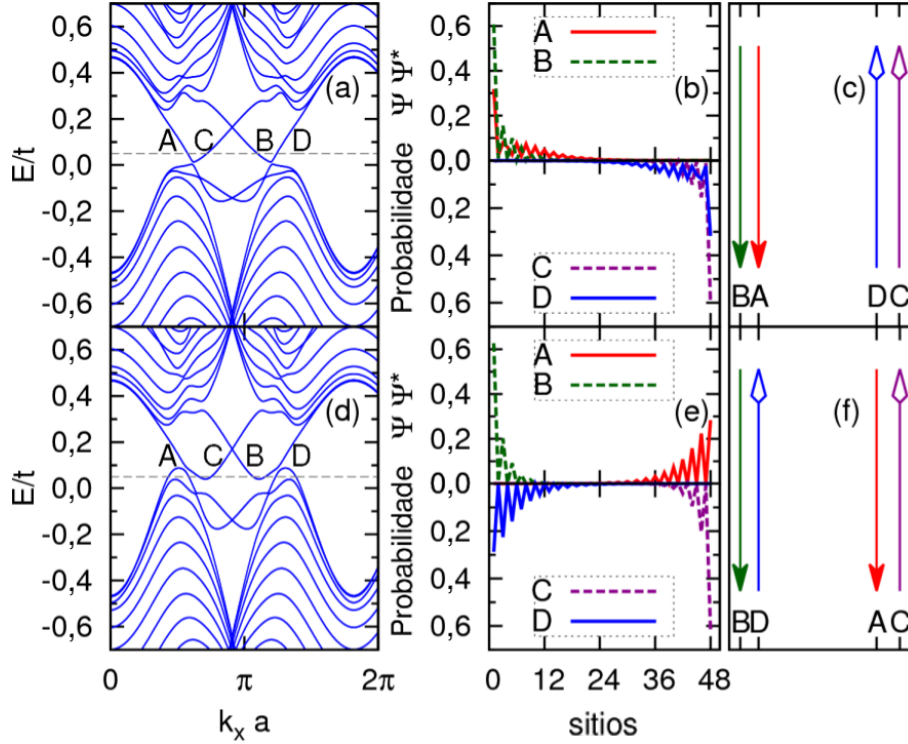


Figura 7.7: Espectro de energia de uma nanofita zigzag com $W = 48$, $\lambda_R = 0, 20t$, $\lambda_{ex} = 0, 20t$, $\varepsilon = 0, 10$ e $\theta = 0$, para (a) $\lambda_{so} = 0.035t$ e (d) $\lambda_{so} = 0.055t$, respectivamente. O nível de Fermi $E = 0.05t$ corresponde às quatro diferentes edge states, como indicado por A, B, C e D. A distribuição de probabilidade correspondentes $|\psi|^2$ através da largura da nanofita, e diagramas da distribuição das correntes são mostrados no painel do meio e da direita, respectivamente. A direção da seta indica o fluxo de corrente.

dos edge states através da largura da nanofita é mostrada no painel central. O painel da direita ilustra diagramas das correntes de carga nas bordas da nanofita. Uma corrente na borda que tem sua direção indicada pela seta é determinada através da velocidade de grupo eletrônica $v_x = \partial E(k)/\partial k_x$, por $I = -|e|v_x$. Note que os estados A e B possuem a mesma direção de velocidade, opostas às de C e D. Nas bordas da nanofita, as bandas A e D devem formar um *loop* fechado, com o ponto de retorno no infinito na direção x . Enquanto isso, o par B e C formam o outro *loop* com direção oposta ao primeiro, como mostrado no painel direito da figura 7.7. Para uma nanofita com λ_{so} muito grande, os edge states A e C se encontram na mesma borda, assim como B e D, como mostrado na figura 7.7 (f). A orientação do *loop* de

corrente devido a A e D deve produzir um Chern number de ($\nu_1 = -1$) [16] enquanto o par B e C deve dar um Chern number de ($\nu_2 = +1$). Como a nanofita é composta desses dois subsistemas Hall quântico inteiro, seu Chern number (ν) é obtido por ($\nu_1 = +1$) \oplus ($\nu_2 = -1$), isto é, $\nu = (+1) + (-1) = 0$. Então, a nanofita de grafeno está no estado Hall quântico de spin com quebra de simetria temporal. No caso em que o acoplamento spin-órbita é fraco, no entanto, os edge states A e B, e conseqüentemente I_A e I_B , se encontrarão localizados na mesma borda, como indicado na figura 7.7 (c). Então, a quiralidade do *loop* da corrente devido aos edge states A e D produzirão um Chern number de ($\nu_1 = \pm 1$) que é o mesmo do *loop* da corrente devido a B e C. Como o sistema é semelhante a dois sistemas no estado de Hall quântico inteiro, seu Chern number ν é igual a ($\nu_1 = +1$) \oplus ($\nu_2 = +1$), isto é, $\nu = (+1) + (+1) = 2$ ou ($\nu_1 = -1$) \oplus ($\nu_2 = -1$), com $\nu = (-1) + (-1) = -2$. Portanto, a nanofita zigzag com acoplamento spin-órbita fraco se encontra na fase QAH.

Para entender a transição de fase e mostrar intuitivamente como ela acontece, é introduzido o valor esperado da posição x como um parâmetro que especifica o momento angular da corrente no sistema, e define-se $\langle x \rangle_n = \sum_i x_i |\varphi_n(x_i)|^2$, em que n representa os edge states no nível de Fermi e i é o índice do sítio ao longo da largura da nanofita. É escolhida a origem do eixo x na borda esquerda da nanofita. A figura 7.8 (a) mostra os valores esperados $\langle x \rangle_n$ dos edge states como uma função de λ_{so} na nanofita com largura $W = 48$, $\lambda_R = 0, 20t$, $M = 0, 20t$, $\varepsilon = 0, 10$ e $\theta = 0$, sendo $n = A, B, C$ e D , respectivamente. A direção e a magnitude da velocidade de grupo são indicadas pela direção e tamanho das setas, respectivamente. Quando o valor de λ_{so} é muito pequeno, o termo de Rashba e de exchange são dominantes, A e B estão na mesma borda da nanofita e, portanto, $\langle x \rangle_A$ e $\langle x \rangle_B \rightarrow 0$. Da mesma maneira ocorre com C e D, mas localizados na outra borda, assim $\langle x \rangle_C$ e $\langle x \rangle_D \rightarrow W$. O sistema se encontra na fase QAH. Quando λ_{so} aumenta, entretanto, fases topológicas diferentes são encontradas. Quando λ_{so} é pequeno ($0.03t < \lambda_{so} < 0.04t$), as posições dos edge states sofrem muito pouca alteração. Conforme λ_{so} é aumentado, os estados A e D se tornam não localizados, movendo-se em direção do centro da nanofita a partir de bordas diferentes devido ao acoplamento entre os estados de *bulk* e estados da borda. Quando λ_{so} é grande ($\lambda_{so} > 0.05$), as posições das bandas A e D trocam de posição. Como a velocidade de grupo da banda A é oposta a da banda D, a troca em suas posições implica na troca da chiralidade.

Portanto, o sistema se encontra na fase QSH. É importante ressaltar que, devido ao efeito de tamanho finito (de largura finita), os edge states não estão exatamente localizados nas duas bordas. Notavelmente um comportamento similar é apresentado na figura 7.8 (b) na qual $\langle x \rangle$ versus strain é mostrado. À primeira vista, parece difícil entender esse comportamento exótico. Mas voltando à discussão da transição de fase no grafeno, é possível se especular que isto é uma manifestação da troca de fase devida ao strain entre estados QSH e QAH na nanofita de grafeno [16]. Esta fase Hall quântica de spin induzida por strain possui muitas propriedades similares ao efeito QSH usual sem strain. No entanto, esse sistema não requer um valor de λ_{so} , o qual seria difícil de se conseguir em aplicações de grafeno.

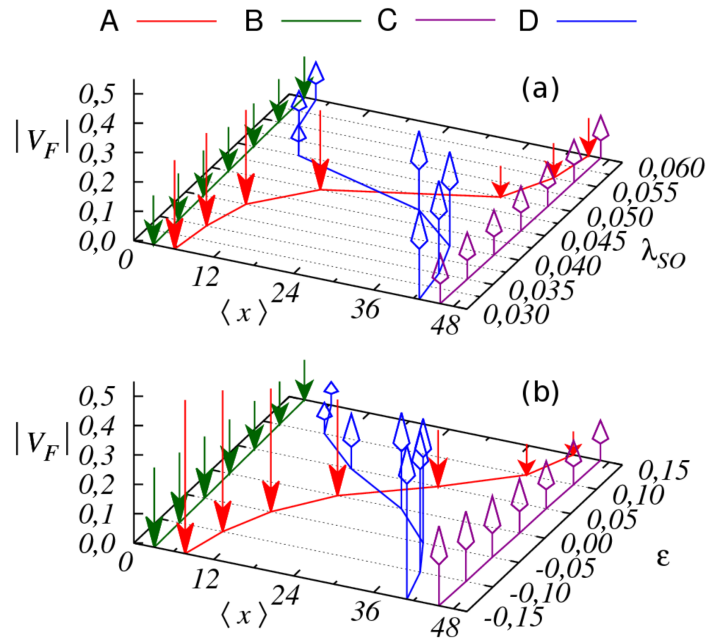


Figura 7.8: (a) Posições médias $\langle x \rangle$ das edge states versus λ_{so} numa nanofita zigzag sujeita a strain com $\epsilon = 0, 10$ e $\theta = 0$. (b) $\langle x \rangle$ como função do strain com $\theta = 0$ para $\lambda_{so} = 0.05t$. $W = 48$, $\lambda_R = 0, 20t$ e $\lambda_{ex} = 0, 20t$ foram usados nos cálculos. O eixo vertical é o módulo da velocidade de Fermi V_F . As setas apontam na direção da velocidade das bandas e seus comprimentos indicam as magnitudes de V_F .

Para se encontrar transições de fase topológicas induzidas por strain, por exchange, pelo acoplamento de spin-órbita intrínseco ou por uma combinação dos três, diagramas de fase nos quais a fase é caracterizada pela diferença no valor esperado das posições $\langle x \rangle_C$ e $\langle x \rangle_A$,

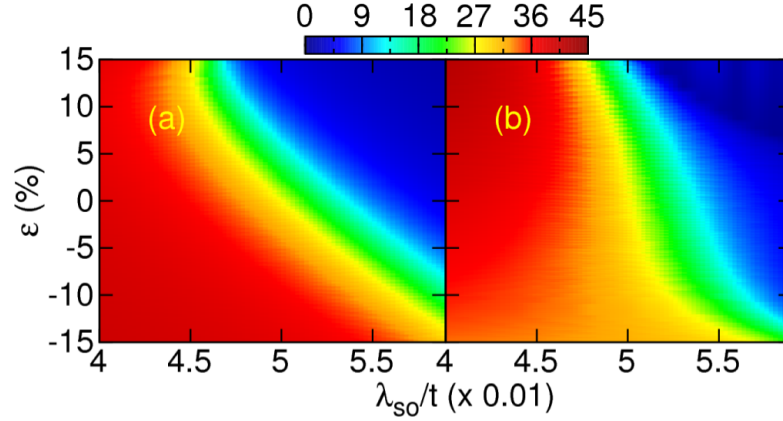


Figura 7.9: Diagramas de fase (strain vs spin-órbita intrínseco) de uma nanofita com $W = 48$, $\lambda_R = 0, 20t$, $\lambda_{ex} = 0, 20t$, caracterizada pela diferença no valor da posição esperado entre A e C, definido como $\langle x \rangle_{AC} = \langle x \rangle_C - \langle x \rangle_A$, para $\theta = 0$ (a) e $\theta = \pi/2$ (b), respectivamente.

definido como $\langle x \rangle_{AC} = \langle x \rangle_C - \langle x \rangle_A$, foram construídos, como mostra a figura 7.9. A figura 7.9 (a) e (b) mostram diagramas de fase de ε versus λ_{so} para $\theta = 0$ e $\theta = \pi/2$, respectivamente. É fácil notar que se $\langle x \rangle_{AC} \cong 0$, os estados A e C dos estados de borda estão localizados na mesma fronteira, correspondendo à fase QSH, indicado por azul. Se $\langle x \rangle_{AC} \cong W$, o sistema se encontra na fase QAH, denotado por vermelho. Outros valores de $\langle x \rangle_{AC}$ correspondem a estados da banda A que não estão localizados. É perceptível que o valor e direção do strain mudam consideravelmente o diagrama de fase. Para valores baixos de acoplamento intrínseco de spin-órbita, a nanofita se encontra no estado QAH. O valor crítico λ_{so}^c no qual a transição de fase topológica ocorre depende fortemente do módulo e direção do strain. Quando o strain é alto, um valor menor de λ_{so}^c é necessário para se alcançar o estado QSH. Além disso, o strain induz a nanofita do estado QAH pra o estado QSH dado um valor de λ_{so}^c . Também se pode notar que no caso em que $\theta = \pi/2$, quando λ_{so}^c muda na borda entre os estados QSH e QAH, o valor crítico correspondente de ε varia mais rápido do que no caso em que $\theta = 0$.

É bem conhecido que o strain uniaxial mecânico não quebra a simetria da rede, mas deforma a zona de Brillouin, como as posições dos cones de Dirac no grafeno, nos pontos K (K') sendo deslocados em direções opostas [72, 109]. Isto se deve ao efeito do campo pseudo magnético B_S induzido por strain nos portadores de carga, isto é, acumulando carga nos lugares onde B_S é mínimo. Como B_S não quebra a TRS, o strain não vai ter nenhum

efeito direto nos graus de liberdade dos spins dos elétrons, mesmo que ele se acople com o pseudo spin da rede. Portanto, a primeira vista, parece que o strain apenas induz uma renormalização das escalas de energia. Na realidade, isso não é verdade no grafeno com spin-órbita. Como o spin-órbita se acopla com o spin e com os graus de liberdade dos portadores, B_S pode afetar os spins reais de um elétron através do spin-órbita. Então um campo pseudo magnético forte pode levar à quantização de Landau e o estado QSH devido aos sinais opostos de B_S para os elétrons nos vales K e K' . Nesse contexto, o strain aumenta a localização dos portadores e leva os edge states para muito mais próximo das bordas da nanofita. Por isso, o estado QSH pôde ser estabilizado pelo strain. Finalmente, é importante lembrar que como o espalhamento entre vales necessita de uma grande transferência de momento [110], ele é fortemente suprimido nas nanofitas com a largura em que estamos interessados.

Capítulo 8

Transporte eletrônico em grafeno com strain

Os estudos sobre transporte eletrônico começaram a partir da descoberta do efeito Hall e hoje é dos principais objetos de estudo na física dos dispositivos eletrônicos, devido a sua importância no desenho desses dispositivos. A aplicação desses estudos aparece no desenho de microchips, cartões de memória, entre outros. Conforme esses dispositivos têm seu tamanho reduzido, novos fenômenos físicos surgem de modo que a teoria clássica de transporte não fornece mais uma explicação adequada e a teoria quântica se faz necessária. Para se estudar as propriedades de transporte eletrônico o método das funções de Green no formalismo de Landauer-Büttiker é adequada no regime linear e do ponto de vista computacional por ter boa precisão numérica e tempo de execução baixo e também por possibilitar o cálculo da condutância do sistema. Nas próximas seções, serão dados os conceitos necessários para se efetuar o cálculo das propriedades de transporte eletrônico, começando pelo formalismo de Landauer-Büttiker e, depois, o formalismo das funções de Green.

8.1 O formalismo de Landauer-Büttiker

Rolf Landauer propôs que o problema de condução em um sistema unidimensional poderia ser visto como um problema de transmissão, ao invés do tratamento balístico fornecido pela mecânica clássica. Esse formalismo se tornou o método mais usado quando se fala em

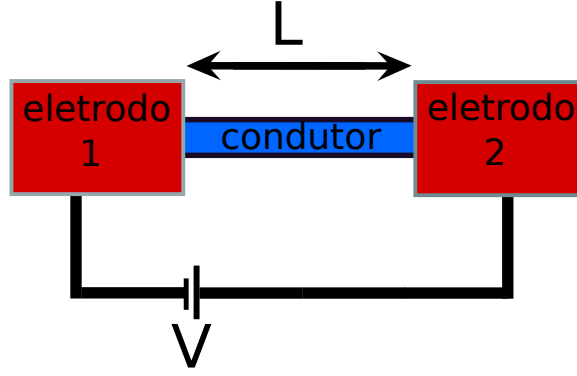


Figura 8.1: Esquema de um dispositivo eletrônico conectado a dois contatos e submetidos a um potencial V .

transporte em nanoestruturas.

Para se entender esse formalismo, considere-se uma barreira colocada em um condutor no qual flui uma corrente unidimensional por condutores ideais conectados a reservatórios μ_1 e μ_2 , como na figura 8.1. Como os reservatórios e os contatos não possibilitam aos elétrons terem fases bem definidas, por causa de processos inelásticos, também não há relação de fase entre as partículas [111]. A corrente injetada do reservatório da esquerda e que flui para a direita pode ser escrita como uma integral do fluxo, de modo que

$$I = \frac{2e}{2\pi} \left\{ \int_0^\infty dk v(k) f_1(k) T(E) - \int_0^\infty dk' v(k') f_1(k') T(E') \right\} \quad (8.1)$$

em que a constante é a densidade de estados unidimensional no espaço k , $v(k)$ é a velocidade, $T(E)$ é o coeficiente de transmissão, f_1 e f_2 são as funções de distribuição de Fermi-Dirac dos respectivos reservatórios e as integrais são feitas sobre k e k' positivos, relativos à direção da corrente. Em baixas temperaturas, os elétrons injetados pelo reservatório esquerdo possuem energia até μ_1 e os injetados pelo reservatório a esquerda, μ_2 . Assim as integrais podem ser feitas sobre as energias,

$$I = \frac{e}{\pi} \left\{ \int_0^{\mu_1} dE \frac{dk}{dE} v(k) f_1(k) T(E) - \int_0^{\mu_2} dE \frac{dk'}{dE} v(k') f_1(k') T(E') \right\} \quad (8.2)$$

$$= \frac{e}{\pi \hbar} \int_{\mu_1}^{\mu_2} dE T(E) \quad (8.3)$$

sendo que a velocidade e a densidade de estados que dependem da energia serão apenas uma constante. No regime de resposta linear do sistema, para valores baixos de voltagem, o

coeficiente de transmissão é praticamente constante, de modo que

$$I = \frac{2e}{h} T (\mu_1 - \mu_2). \quad (8.4)$$

Devido à transmissão e também à reflexão dessa corrente na barreira, há uma redução de cargas do seu lado esquerdo, mudando assim a energia de Fermi de μ_1 para μ_A . No lado direito, o acúmulo de cargas muda a energia de Fermi de μ_2 para μ_B . A queda de potencial através da barreira, então, é

$$eV = \mu_A - \mu_B. \quad (8.5)$$

No entanto, essa diferença entre as energias de Fermi dão origem a uma reflexão dos elétrons na barreira [111]. O problema a se resolver era como se aplicar a voltagem no sistema de modo que a condutância na estrutura não fosse afetada. Se a corrente e a voltagem forem medidas nos mesmos terminais, a voltagem medida será

$$eV = \mu_1 - \mu_2. \quad (8.6)$$

Assim, a condutância de Landauer, será

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} \frac{T}{1-T} = \frac{2e^2}{h} T \quad (8.7)$$

O motivo disso é que além da queda de potencial na barreira, se está medindo uma queda de potencial através dos contatos devido ao acúmulo auto-consistente de carga caracterizada por uma resistência de contato

$$R_c = \frac{h}{2e^2}. \quad (8.8)$$

A equação 8.7 descreve as propriedades de transporte quântico de um sistema de um canal. A generalização para vários canais é feita considerando-se que T é a soma de probabilidades de transmissão dos contatos nos diferentes canais, isto é

$$T_{pq} = \sum_{m,n} |t_{mn}^{pq}|^2 \quad (8.9)$$

sendo $|t_{mn}^{pq}|^2$ a probabilidade de que um elétron que entrou no dispositivo pelo contato q no canal n saia do dispositivo pelo contato p no canal m .

8.2 Formalismo das funções de Green

A função de Green pode ser amplamente usada em física seja na teoria, clássica eletromagnetismo ou mecânica quântica, e se tornou uma ferramenta muito importante. Ela surge da solução de uma equação diferencial e é utilizada no cálculo de equações diferenciais não homogêneas sujeitas a certas condições de contorno determinadas. Nessa seção será desenvolvido o método baseado nas funções de Green para calcular os coeficientes de transmissão, necessários para obter as propriedades de transporte de um sistema nanoestruturado.

Primeiramente, se dará a definição básica da função de Green, depois se encontrará a expressão para os coeficientes de transmissão em termos das funções de Green, e com isso pode-se desenvolver o método das funções de Green na rede.

A função de Green é definida como a solução da equação diferencial não-homogênea [112]

$$[E - H]\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', E) = \delta(\vec{r}, \vec{r}') \quad (8.10)$$

em que H é o hamiltoniano do sistema, $\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', E)$ é a função de Green e o operador do lado direito é a delta de Dirac. A equação anterior também pode ser expressa na forma

$$[E - H]\mathcal{G}(E) = 1 \quad (8.11)$$

Assim, a função de Green é relacionada a $\mathcal{G}(E)$, de acordo com

$$\mathcal{G}(\vec{r}, \vec{r}', E) = \langle \vec{r} | \mathcal{G}(E) | \vec{r}' \rangle. \quad (8.12)$$

A solução da equação anterior é dada por $\mathcal{G}(E) = [E - H]^{-1}$, que é definida para todos os valores de energia exceto para as auto-energias do hamiltoniano H . Para se contornar esse problema, a função de Green é definida como

$$\mathcal{G}^{\pm} = \lim_{\eta \rightarrow 0} [E \pm i\eta - H]^{-1}, \quad (8.13)$$

em que a parte imaginária $\pm i\eta$ define duas condições de contorno necessárias para que a inversa da equação diferencial seja definida unicamente. Estas duas condições são conhecidas como função de Green avançada (\mathcal{G}^a), que fisicamente representa ondas que decaem no ponto de excitação e a função de Green retardada (\mathcal{G}^r), descrevendo ondas que saem do ponto de

excitação [113]. Como a condutância foi expressa em termos dos coeficientes de transmissão do condutor, e esses coeficientes podem ser expressos em termos da função de Green através da relação de Fisher-Lee [114]

$$\mathcal{G}_{pq} = G_0 \text{Tr}[\Gamma_p \mathcal{G}_{pq}^r \Gamma_q \mathcal{G}_{qp}^a] \quad (8.14)$$

sendo $G_0 = 2e^2/\hbar$ o quantum de condutância, $\mathcal{G}_{pq}^{r(a)}$ a função de Green retardada (avançada) entre os contatos $p(q)$ e $q(p)$, \sum_{pq} a auto-energia do contato $p(q)$, a qual pode-se ver com uma interação efetiva entre o contato e o condutor e

$$\Gamma_p = i \left[\sum_{p(q)} - \sum_{q(p)}^\dagger \right]. \quad (8.15)$$

As funções de Green retardada e avançada podem se relacionar são tais que $\mathcal{G}^a = [\mathcal{G}^r]^\dagger$.

Agora o problema se resume a calcular as funções de Green no condutor. Quando se faz o cálculo numérico, o sistema sempre tem que ser discretizado. Essa discretização pode ser feita usando o método de *tight-binding* apresentado no capítulo 3 e a função de Green do dispositivo é calculada usando-se a equação 8.13. Este enfoque é chamado de método de funções de Green da rede e é uma técnica numérica que permite incluir interações spin-órbita e interações com campos externos. No entanto, por ser computacionalmente custosa, se recorre a métodos recursivos, tratados nas seções seguintes.

8.3 Descrição das auto-energias dos eletrodos

Uma vez conhecida a descrição do hamiltoniano de *tight-binding* entre o condutor e os contactos no espaço real, pode-se escrever o sistema completo como

$$H = H_C + H_L + V_{RC} + V_{CR} + H_R + V_{CL} + V_{LC} \quad (8.16)$$

em que H_C é a parte do hamiltoniano devido ao condutor, H_L é a parte que representa o contato da esquerda, H_R o da direita, V_{RC} é o acoplamento entre o contato da direita e o condutor e V_{CR} o seu conjugado hermitiano, V_{CL} é o acoplamento entre o condutor e o contato da esquerda e V_{LD} o seu conjugado hermitiano. Com isso, pode-se substituir o hamiltoniano na equação 8.13 por essa expressão 8.16 para obter [115]

$$\begin{pmatrix} \epsilon - H_L & -V_{LC} & 0 \\ -V_{CL} & \epsilon - H_C & -V_{CR} \\ 0 & -V_{RC} & \epsilon - H_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{G}_L & \mathcal{G}_{LC} & \mathcal{G}_{LR} \\ \mathcal{G}_{CL} & \mathcal{G}_C & \mathcal{G}_{CR} \\ \mathcal{G}_{RL} & \mathcal{G}_{RC} & \mathcal{G}_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix} \quad (8.17)$$

sendo $\epsilon = E + i\eta$. Para se obter a função de Green que descreve o dispositivo, pode-se solucionar o sistema acima de maneira que

$$(\epsilon - H_L)\mathcal{G}_{LC} - V_{LC}\mathcal{G}_D = 0; \quad (8.18)$$

$$-V_{DL}\mathcal{G}_{LD} - (\epsilon - H_C)\mathcal{G}_C - V_{CR}\mathcal{G}_{RC} = I; \quad (8.19)$$

$$-V_{RC}\mathcal{G}_C + (\epsilon - H_R)\mathcal{G}_{RC} = 0. \quad (8.20)$$

A partir disso, obtém-se a função de Green do dispositivo:

$$\mathcal{G}_C = (\epsilon - H_C - V_{CL}\mathcal{G}_L V_{LC} - V_{CR}\mathcal{G}_R V_{RC})^{-1}. \quad (8.21)$$

Que pode ser simplificada como:

$$\mathcal{G}_C = (\epsilon - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1}, \quad (8.22)$$

se for considerado que

$$\Sigma_L = V_{CL}\mathcal{G}_L V_{LC} \quad (8.23)$$

$$\Sigma_R = V_{CR}\mathcal{G}_R V_{RC}; \quad (8.24)$$

em que Σ_L é a auto-energia do contato da esquerda e Σ_R é a auto-energia do contato da direita.

Na 8.2 é mostrada uma representação das auto-energias acopladas ao dispositivo para o caso de uma rede quadrada. Se \mathcal{G}_L e \mathcal{G}_R for dado, é possível se calcular as auto-energias e a função de Green do condutor e poderia ser encontrada, usando 8.22, para se obter a condutância da equação 8.14. Por outro lado inverter uma matriz requer um cálculo numérico longo.

8.4 Método Recursivo das Funções de Green

Este método foi desenvolvido inicialmente com a intenção de se calcular a condutância em cadeias atômicas lineais [116]. Posteriormente foi implementado a um sistema bidimensional

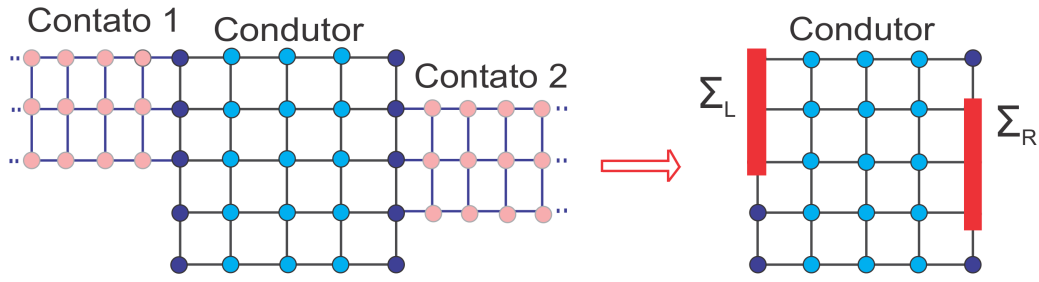


Figura 8.2: O acoplamento de dois eletrodos semi-infinitos com o condutor pode ser escrito como um hamiltoniano efetivo, dado por suas auto-energias $\Sigma_{L,R}$. [6]

na formulação de fatias, sendo sua aplicação principal nos dias de hoje [44, 117]. A ideia básica deste método é quebrar o sistema em partes independentes, em que se assume que a função g das fatias independentes é conhecida. Dessa forma, a função de Green total pode ser obtida recursivamente mediante a equação de Dyson [118]:

$$\mathcal{G} = g + gV\mathcal{G} \quad (8.25)$$

sendo \mathcal{G} a função de Green exata, g a função de Green não perturbada que corresponde a só uma fatia e V a matriz de acoplamento entre fatias vizinhas. De acordo com a figura 8.3, o sistema é quebrado em N fatias. As fatias com números menores a 1 representam o contato com o eletrodo da esquerda e as fatias com números maiores a N representam o contato com o eletrodo da direita. Nos cálculos seguintes, serão usadas as funções de Green retardadas, assim pode-se definir

$$g_n(E) = (E + i\eta - h_n)^{-1} \quad (8.26)$$

como a função de Green da n -ésima fatia no sistema. O termo h_n denota o Hamiltoniano da n -ésima fatia isolada. Com isto, pode-se aplicar a equação de Dyson para construir uma família de funções de Green que acopla o condutor ao contato esquerdo L e da mesma forma construir uma família de funções de Green que acopla o condutor ao contato direito R . Para finalizar, junta-se essas duas famílias para se obter a função de Green total $\mathcal{G}_{0,N+1}^r$.

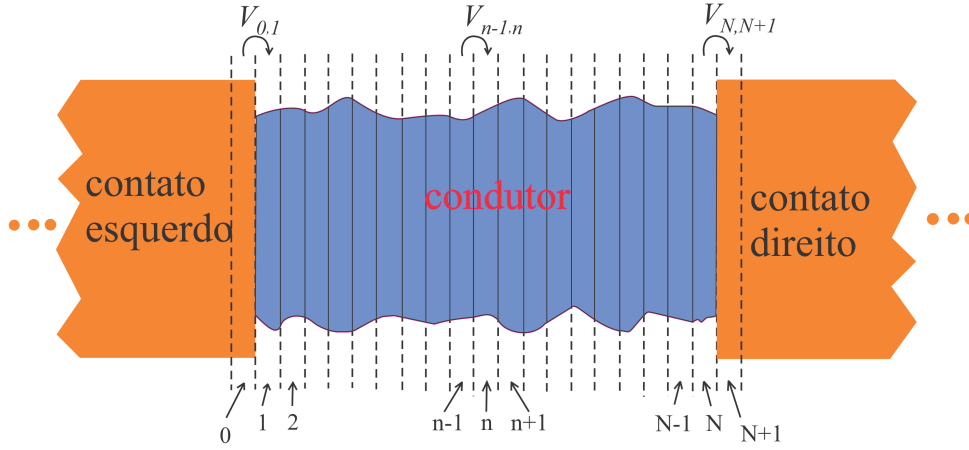


Figura 8.3: Esquema de um condutor conectado a dois eletrodos, na esquerda e direita, dividido em N fatias e numeradas $n = 1, \dots, N$. As fatias com números menores a $n = 1$ representam o eletrodo da esquerda e as fatias com números maiores a $n = N$ representam o eletrodo da direita. [6]

8.4.1 Funções de Green da esquerda

Para percorrer o condutor pela esquerda, é necessário encontrar a função de Green \mathcal{G}^L . Para isso, o primeiro passo é incorporar a fatia $n = 1$ à função de Green do contato esquerdo g_L . Este tipo de operação é repetido durante todo o método. Para nosso objetivo, introduz-se os termos $|0\rangle$ e $|1\rangle$ que representam os estados onde os elétrons são encontrados em fatias $n = 0$ e $n = 1$, respectivamente. Então,

$$\mathcal{G}_{1,1}^L = \langle 1 | \mathcal{G}^L | 1 \rangle \quad (8.27)$$

$$= \langle 1 | g | 1 \rangle + \sum_{m,m'} \langle 1 | g | m \rangle \langle m | V | m' \rangle \langle m' | \mathcal{G}^L | 1 \rangle \quad (8.28)$$

$$= \langle 1 | g | 1 \rangle + \langle 1 | g | 1 \rangle \langle 1 | V | 0 \rangle \langle 0 | \mathcal{G}^L | 1 \rangle \quad (8.29)$$

$$= g_1 + g_1 V_{1,0} \mathcal{G}_{0,1}^L \quad (8.30)$$

Na equação 8.28 foi usada a relação de fechamento. Vê-se, portanto, que para se encontrar a

função de Green $\mathcal{G}_{1,1}^L$, a função $\mathcal{G}_{0,1}^L$ é necessária. Esta pode ser encontrada da mesma maneira:

$$\mathcal{G}_{0,1}^L = \langle 0|\mathcal{G}^L|1\rangle \quad (8.31)$$

$$= \langle 0|g|1\rangle + \sum_{m,m'} \langle 0|g|m\rangle \langle m|V|m'\rangle \langle m'|\mathcal{G}^L|1\rangle \quad (8.32)$$

$$= \langle 0|g|0\rangle \langle 0|V|1\rangle \langle 1|\mathcal{G}^L|1\rangle \quad (8.33)$$

$$= g_L V_{0,1} \mathcal{G}_{1,1}^L \quad (8.34)$$

em que se usou a igualdade $\langle 0|g|1\rangle = 0$, uma vez que as funções g são definidas para fatias isoladas e não incluem acoplamento entre as mesmas. Já o termo $g_L = \langle 0|g|0\rangle$ pode ser definido sem problemas. Substituindo-se a expressão 8.34 na equação 8.30, obtém-se

$$\mathcal{G}_{1,1}^L = (E + i\eta - h_1 - V_{1,0} g_L V_{0,1})^{-1} \quad (8.35)$$

Portanto, $\mathcal{G}_{1,1}^L$ é a função de Green que dá o acoplamento da primeira fatia com o contato da esquerda. A partir do resultado do termo $\mathcal{G}_{1,1}^L$, pode-se calcular a função de Green sucessiva, para a fatia $n = 2$. Então, a função $\mathcal{G}_{2,2}^L$ será

$$\mathcal{G}_{2,2}^L = \langle 2|\mathcal{G}^L|2\rangle \quad (8.36)$$

$$= \langle 2|g|2\rangle + \sum_{m,m'} \langle 1|g|m\rangle \langle m|V|m'\rangle \langle m'|\mathcal{G}^L|2\rangle \quad (8.37)$$

$$= \langle 2|g|2\rangle + \langle 2|g|2\rangle \langle 2|V|1\rangle \langle 1|\mathcal{G}^L|2\rangle \quad (8.38)$$

$$= g_2 + g_2 V_{2,1} \mathcal{G}_{1,2}^L. \quad (8.39)$$

E a função de Green $\mathcal{G}_{1,2}^L$ pode ser facilmente encontrada mediante a equação de Dyson, que fornece o resultado

$$\mathcal{G}_{1,2}^L = \mathcal{G}_{1,1}^L V_{1,2} \mathcal{G}_{2,2}^L. \quad (8.40)$$

A substituição da equação 8.40 na expressão 8.39 dará

$$\mathcal{G}_{2,2}^L = (E + i\eta - h_2 - V_{2,1} \mathcal{G}_{1,1}^L V_{1,2})^{-1}. \quad (8.41)$$

A partir desses resultados, pode-se generalizar os resultados para

$$\mathcal{G}_{n,n}^L = (E + i\eta - h_n - V_{n,n-1} \mathcal{G}_{n-1,n-1}^L V_{n-1,n})^{-1} \quad (8.42)$$

com $n = 2, \dots, N$. Para as fatias dentro do condutor usa-se a função não perturbada $g = \mathcal{G}_{n-1,n-1}^L$, de forma que a relação de recorrência geral 8.34 fica expressa como

$$\mathcal{G}_{0,n}^L = \mathcal{G}_{0,n-1}^L V_{n-1,n} \mathcal{G}_{n,n}^L. \quad (8.43)$$

8.4.2 Funções de Green da direita

O cálculo das funções de Green da direita, em que o condutor é percorrido da direita para esquerda, é feito de maneira semelhante ao das funções de Green da esquerda. Assim,

$$\mathcal{G}_{N,N}^R = g_N + g_N V_{N,N+1} \mathcal{G}_{N+1,N}^R. \quad (8.44)$$

A função de Green $\mathcal{G}_{N+1,N}^R$, com na equação 8.34 é dada por

$$\mathcal{G}_{N+1,N}^R = g_R V_{N+1,N} \mathcal{G}_{N,N}^R. \quad (8.45)$$

E, substituindo-se a equação 8.45 na 8.44, a função de Green da última fatia conectada ao contato da direita será

$$\mathcal{G}_{N,N}^R = (E + i\eta - h_N - V_{N,N+1} g_R V_{N+1,N})^{-1}. \quad (8.46)$$

A relação de recorrência para as funções de Green da direita terão a forma

$$\mathcal{G}_{n,n}^R = (I - g_n V_{n,n+1} \mathcal{G}_{n+1,n+1}^R V_{n+1,n})^{-1} g_n, \quad (8.47)$$

sendo $n = N - 1, \dots, 1$. Substituindo-se a função $g_n = (E + i\eta - h_n)^{-1}$ na equação acima,

$$\mathcal{G}_{n,n}^R = (E + i\eta - h_n - V_{n,n+1} \mathcal{G}_{n+1,n+1}^R V_{n+1,n})^{-1}. \quad (8.48)$$

A expressão geral para $\mathcal{G}_{N+1,n}^R$, de forma semelhante a da equação 8.43 será

$$\mathcal{G}_{N+1,n}^R = \mathcal{G}_{N+1,n+1}^R V_{n+1,n} \mathcal{G}_{n,n}^R. \quad (8.49)$$

8.4.3 Função de Green Total

As funções de Green total do sistema é encontrada a partir da equação de Dyson 8.25, de modo que

$$\mathcal{G}_{n,n} = g_n + g_n (V_{n,n+1} \mathcal{G}_{n-1,n} + V_{n,n+1} \mathcal{G}_{n+1,n}); \quad (8.50)$$

$$\mathcal{G}_{n-1,n} = \mathcal{G}_{n-1,n-1}^L V_{n-1,n} \mathcal{G}_{n,n}; \quad (8.51)$$

$$\mathcal{G}_{n+1,n} = \mathcal{G}_{n+1,n+1}^R V_{n+1,n} \mathcal{G}_{n,n}. \quad (8.52)$$

E, portanto,

$$\mathcal{G}_{n,n} = (E + i\eta - h_n - V_{n,n-1} \mathcal{G}_{n-1,n-1}^L V_{n-1,n} - V_{n,n+1} \mathcal{G}_{n+1,n+1}^R V_{n+1,n})^{-1}. \quad (8.53)$$

Assim como nas equações 8.43 e 8.49, as relações de recorrência serão dadas por

$$\mathcal{G}_{0,n} = \mathcal{G}_{0,n-1}^L V_{n-1,n} \mathcal{G}_{n,n}; \quad (8.54)$$

$$\mathcal{G}_{N+1,n} = \mathcal{G}_{N+1,n+1}^R V_{n+1,n} \mathcal{G}_{n,n}. \quad (8.55)$$

E com essas equações e a equação 8.54, a função de Green de condutor, $\mathcal{G}_{0,N+1}$, que percorre o condutor a partir da esquerda é dada por

$$\mathcal{G}_{0,N+1} = \mathcal{G}_{0,N}^L V_{N,N+1} \mathcal{G}_{N+1,N+1}, \quad (8.56)$$

em que $\mathcal{G}_{N+1,N+1}$ foi encontrada a partir da equação 8.53:

$$\mathcal{G}_{N+1,N+1} = (E + i\eta - h_R - V_{N+1,N} \mathcal{G}_{N,N}^L V_{N+1,N+1})^{-1}. \quad (8.57)$$

Com essas expressões, é possível se encontrar o valor da condutância. A densidade de estados também pode ser encontrada a partir da função de Green total:

$$DOS = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\text{Tr}[\mathcal{G}_C(E)]] \quad (8.58)$$

8.5 Resultados

Serão consideradas nanofitas zigzag com $N = 26$, que possuem largura específica de 5.4nm e comprimento de 10.93nm sem a aplicação de strain e, de maneira similar, uma nanofita armchair metálica, ou seja, tal que $N = 3n + 2$, como mencionado na seção com aproximadamente a mesma largura e comprimento. É importante mencionar que quanto mais larga a nanofita, mais canais de condução estarão disponíveis para o transporte, portanto, o problema se torna mais complexo, seja para as nanofitas armchair, seja para as zigzag. Entretanto, próximo ao nível de Fermi haverá a mesma quantidade de canais de condução para nanofitas metálicas. Também foi checada que a dependência com a largura é relevante para um protótipo de dispositivo, assim como a região de espalhamento, ou seja, a região do dispositivo que sofre efeitos do acoplamento spin-órbita e campo de exchange mais fortes, de modo que os elétrons injetados possam *sentir* esses campos. Apesar dos resultados desta seção estar sendo apresentados para uma largura específica, ela é válida de uma maneira geral nos dispositivos.

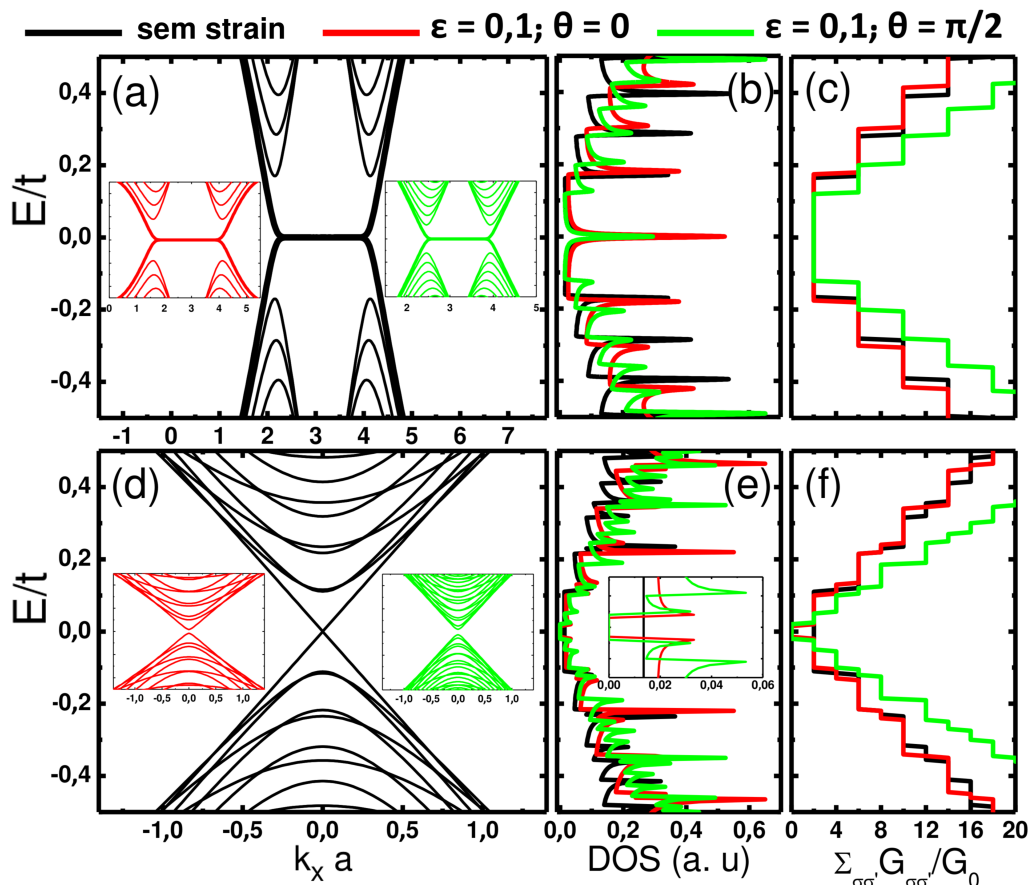


Figura 8.4: Estrutura eletrônica de nanofitas zigzag sem strain com $N = 26$ (a) e armchair com $N = 47$ (d). Os painéis menores em (a) e (d) mostram as nanofitas correspondentes com strain aplicado com módulo de strain $\varepsilon = 0,1$, nas direções $\theta = 0$ (vermelho) e $\theta = \pi/2$ (verde). (b)-(c) e (e)-(f) correspondem à densidade de estados e à condutância total associada com os painéis (a) e (d), respectivamente. O painel menor em (e) mostra que a densidade de estados próximo ao nível de Fermi para um dispositivo de nanofita armchair com strain é igual a zero.

A figura 8.4 (a) e (d) mostra a dispersão de energia das bandas do grafeno sem strain (com strain nas figuras menores), para a nanofita zigzag e para a armchair, enquanto as figuras (b) e (e) mostram as densidades de estado correspondentes. Em (c) e (f) os perfis de condutância são mostrados. Pode-se notar que os *edge-states* no nível de Fermi da nanofita zigzag não se desfazem quando o strain é aplicado, o que é verificado nas figuras (b) e (c). A nanofita é metálica devido a essa banda na energia zero, e a condutância é um múltiplo inteiro do quantum de condutância G_0 , como os canais são completamente transparentes. Para dopagem

de altas energias, há sempre uma pequena mudança nos plateaus, e como a nanofita zigzag possui dois vales distintos, a condutância sempre cresce pelo fator $4G_0$.

De maneira diferente, as estruturas de banda das nanofitas armchair, semicondutoras ou metálicas, são muito sensíveis à aplicação do strain uniaxial. Quando o módulo de strain cresce, a condutividade elétrica pode mudar de isolantes para um condutor ou vice-versa. Mas um efeito interessante é observado próximo ao nível de Fermi: o strain pode induzir um *gap* na banda que era, sem strain, metálica ou alterar o valor de um *gap* já existente em nanofitas semicondutoras de uma maneira não monótona [119]. Esse *gap* pode ser explicado pela mudança no ponto de Dirac induzido pelo strain, de maneira similar a obtidas em nanotubos de carbono [120]. Por exemplo, o strain muda drasticamente o comportamento eletrônico da nanofita armchair com $N = 47$, mostrado em (d), responsável pela transição topológica eletrônica de metálica para semicondutora. Ela se manifesta pelo aparecimento de uma densidade de estados de próximo a zero perto do ponto de neutralidade de cargas (destacado no painel menor em (e)). Adicionalmente o *gap* de transporte (Δ_g) mostra uma dependência com relação à direção de strain, que já foi explorada em vários trabalhos [119, 121, 122, 123], em que foi mostrado que essa propriedade é robusta mesmo através de junções com strain ou defeitos intrínsecos [124, 125].

Para entender as características da condutância na presença do acoplamento de spin-órbita Rashba e exchange, escolhe-se os parâmetros $\lambda_R = 0,1t$, $\lambda_{ex} = 0,2t$, e $\lambda_{so}=0t$. Com esses parâmetros, o sistema se encontra na fase Hall quântica anômala [101]. Entretanto, se o parâmetro de acoplamento de spin-órbita intrínseco é diferente de zero, há um valor de limite superior de λ_{so} [17, 101] além do qual uma nova fase caracterizada por Chern Number $C=0$ pode aparecer; esta fase é chamada de fase Hall quântica de spin com quebra de simetria de inversão temporal [17, 85, 101]. A condutância de spin $G_{\sigma\sigma'}$ é mostrada na figura 8.5: em (a) sem strain, (b) com strain na direção $\theta = 0$, (c) com strain na direção $\theta = \pi/2$ e (d) a condutância total $\sum_{\sigma\sigma'} G_{\sigma\sigma'}$ da nanofita zigzag. Há supressão da conservação de spin e das componentes da condutância de inversão de spin nas nanofitas zigzag com e sem strain dentro do intervalo de energia considerados. No entanto, os retroespalhamentos em certos pontos de energia no primeiro plateau são diferentes dependendo da configuração de strain, e os canais de condução das condutâncias sem e com inversão de spin oscilam.

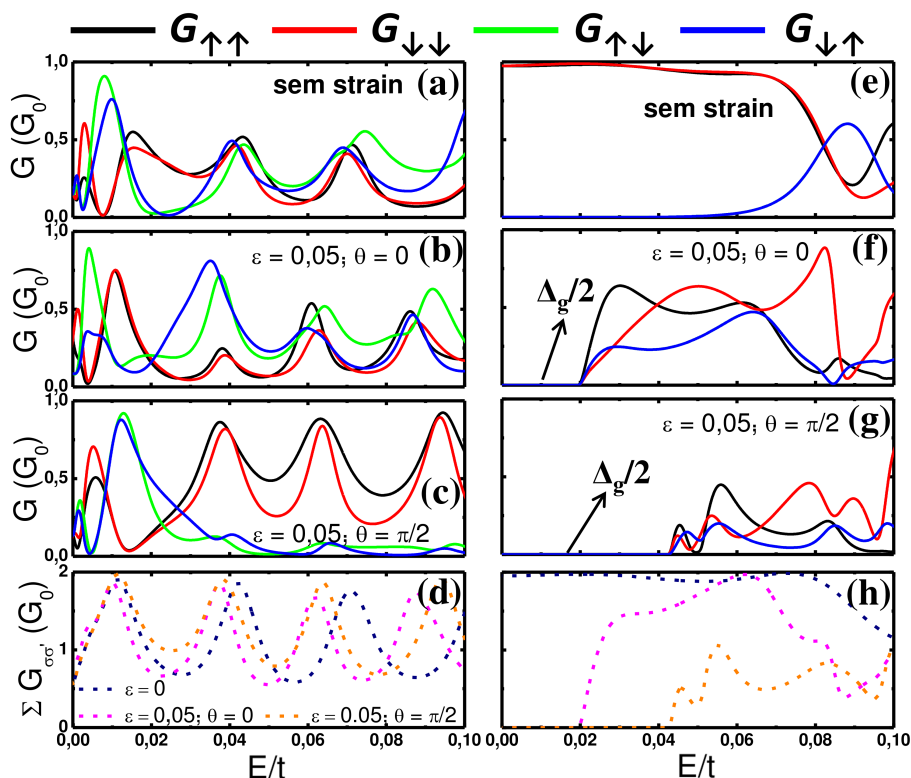


Figura 8.5: Efeitos de strain na condutância resolvida de spin $G_{\sigma\sigma'}$ de nanofitas zigzag com $N = 26$ (a)-(c) e armchair com $N = 47$ (e)-(g). Os painéis (d) e (h) mostram a condutância total. Os parâmetros usados em todos os painéis são $\lambda_R = 0, 1t$, $\lambda_{so} = 0$ e $\lambda_{ex} = 0, 2t$.

Dependendo da energia de Fermi e dos parâmetros adotados, certas componentes de spin podem ser completamente suprimidas. Esta supressão é atribuída ao aparecimento de estados quasi-localizados no dispositivo, que pode produzir ressonâncias de espalhamento nítidas, também conhecidas como retroespalhamento ressonante, que é um comportamento geral de sistemas quânticos de quasi-1D [126]. Para energias mais altas, no entanto, o maior número de canais de condução leva a uma transmissão não nula, já que os canais se misturam ao longo do dispositivo e isso resulta no aparecimento de um retroespalhamento entre canais chamados de efeitos de interferência. Portanto, na fase Hall quântica de spin protegida por simetria de inversão temporal, impurezas não-magnéticas não causam retroespalhamento nas bordas, e o transporte de spin nos edge states ocorre sem dissipação a temperaturas zero.

Na fase Hall quântica anômala, no entanto, há um pequeno espalhamento entre os carregadores nas duas direções, gerando um transporte de spin com baixa dissipação. Em baixas

energias, esse comportamento da supressão dos canais de condução controlável por strain pode ser eficiente para se filtrar correntes elétricas que possuam a orientação de spin desejáveis. Na figura 8.5 (d), a condutância total é mostrada e aproximadamente robusta com relação à modificação por strain, especialmente próximo ao ponto de neutralidade de carga, onde os desvios devido ao strain são muito pequenos. Já a condutância nas nanofitas armchair mostram uma modificação drástica como se pode reparar nos gráficos 8.5 (e)-(h), com o desenvolvimento do *gap* de transporte, que não varia conforme o spin do elétron que é injetado/coletado no dispositivo. Apesar disso, o *gap* de transporte induzido depende da direção do strain aplicado, com uma supressão de condução maior ao longo de $\theta = 0$ (linha vermelha tracejada) com $\Delta_g = 0,04t$, e $\Delta_g = 0,086t$ na direção $\theta = \pi/2$, mostrado na figura 8.5 (h). A condutância total também exibe diferentes plateaus: em torno do ponto $2G_0$ e próximo a G_0 nas nanofitas armchair sem e com strain, respectivamente, que é um quantum de condução a menos disponível para o elétron ser transmitido ao longo do dispositivo com strain para energias além do *gap* de transporte.

Outro fenômeno interessante é a dependência oscilatória das componentes de spin de $G_{\sigma\sigma'}$ com λ_R , mostrado na figura 8.6 (a)-(d), onde as curvas correspondem a diferentes configurações topológicas das nanofitas para $E = 0,05t$. Esses mesmos parâmetros são usados na figura 8.5, exceto para λ_{ex} , que foi tomado como $\lambda_{ex}=0$ para revelar os efeitos do acoplamento Rashba de spin-órbita. Assim, o sistema é invariante por inversão temporal e as componentes de condutância são $G_{\uparrow\uparrow} = G_{\downarrow\downarrow}$ e $G_{\uparrow\downarrow} = G_{\downarrow\uparrow}$. Este comportamento oscilatório é remanescente do transistor de efeito de campo de spin (FET) e tem uma origem similar [127], uma vez que o spin muda enquanto se propaga na presença do campo de Rashba, adquirindo uma fase proporcional a $\lambda_R L$, em que L é o comprimento do dispositivo.

Analisando o *gap* da banda induzido pelo strain na nanofita armchair com $N = 47$, interações de Rashba e exchange, pode-se ver que na figura 8.6(e) uma oscilação do *gap* da banda foi visto em outra pesquisa [119]. Enquanto o strain é pequeno, o *gap* da banda mostra uma resposta aproximadamente linear, quando o módulo de strain é aumentado o *gap* começa a oscilar. A amplitude e o período da oscilação do *gap* são controláveis pela direção de strain, como mostra a figura 8.6(e). A dependência do *gap* do transporte com o ângulo de strain é mostrado na figura 8.6(f). O *gap* de transporte é fortemente modificado pela direção de strain,

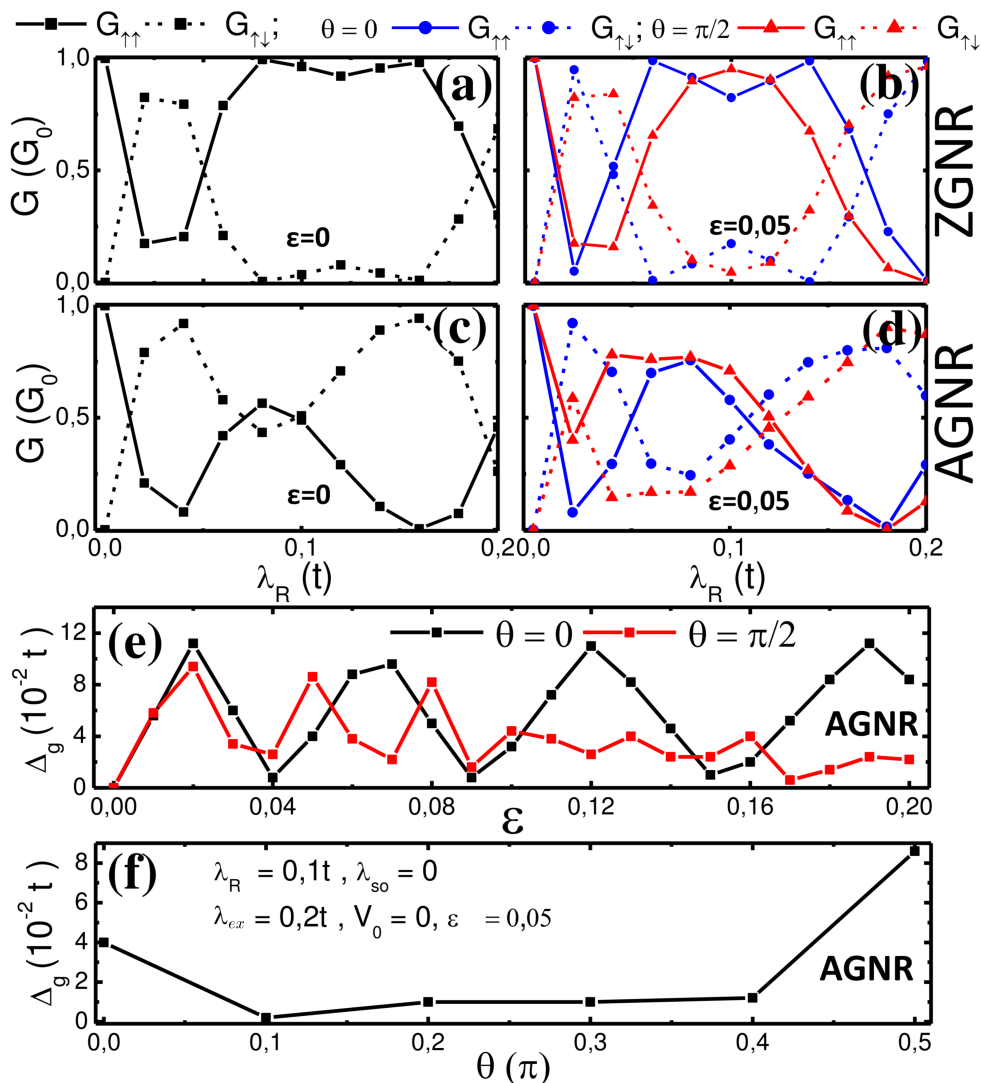


Figura 8.6: (a) Perfis de condutância $G_{\uparrow\uparrow}$ e $G_{\uparrow\downarrow}$ para nanofita zigzag com $N = 26$ (a)-(b) e armchair com $N = 47$ (c)-(d) em função de λ_R sujeito a diferentes configurações de strain. O painel (e) mostra o *gap* da banda Δ_g de uma nanofita armchair em função do parâmetro de strain ϵ para $\theta = 0$ e $\theta = \pi/2$, respectivamente. Em (f) mostra-se o Δ_g de uma nanofita armchair em função da direção de strain para o valor fixo de strain $\epsilon = 0,05$.

sendo quase igual a zero em $0,1\pi$ e chegando a $0,086 t$ em $0,5\pi$.

Conclusão

Recentemente novas classes de materiais, como Hall quântico de spin (QSH) e Hall quântico anômalo (QAH), foram teoricamente preditos e experimentalmente observados em isolantes topológicos, poços quânticos de HgTe-CdTe, grafeno e sistemas similares aos de grafeno: siliceno, germânio bidimensional e metais de transição dicalcogênicos (TMDCs). Tanto os estados QSH quanto os estados QAH possuem estados de borda protegidos topologicamente em duas fronteiras, onde o retroespalhamento de um elétron é proibido, oferecendo uma aplicação potencial para que dispositivos eletrônicos transportem corrente sem dissipação. No entanto, os estados QSH e QAH são essencialmente dois estados bem diferentes da matéria. O QSH é caracterizado por um *gap* isolante no *bulk* e estados de borda helicais sem *gap* em que spins opostos se contrapropagam em cada fronteira protegidos pela simetria de inversão temporal (TRS), enquanto no caso do QAH, os estados helicais sem *gap* nas fronteiras são substituídos por estados de borda quirais em que um dos canais de spin é suprimido, por causa da quebra da simetria de inversão temporal. Nesta tese, propusemos um dispositivo eletrônico quântico baseado em nanofitas de grafeno sob ação de strain. Foi previsto que uma transição de fase topológica quântica notável entre estados QSH com quebra de TRS e estados QAH, os quais se pensavam antes que só podiam ser obtida na presença de um campo magnético finito.

→ Nós mostramos como o acoplamento de spin-órbita (SOC) intrínseco é ajustado, como dois estados de borda com helicidades diferentes localizados em fronteiras opostas da nanofita trocam suas posições. Nossos resultados indicam que um campo pseudomagnético induzido por strain pode ser acoplado os graus de liberdade de spin através do SOC responsável pela estabilidade do estado QSH. A controlabilidade dessa transição de campo zero com relação à intensidade e direção do strain também foi demonstrada. Nossa previsão oferece

uma perspectiva promissora da manipulação elétrica, magnética e do strain do efeito QSH.

→ Produzimos um dispositivo quântico baseado em uma nanofita de grafeno sob ação de strain.

→ Foi descoberto que o strain mecânico, campo de exchange interno e acoplamento spin-órbita podem ser usados para se controlar a natureza (metálica ou isolante) e o estado da matéria (QSH ou QAH) da nanofita de grafeno

→ Demonstramos que a transição de estado topológica quântica entre os estados QSH e QAH depende fortemente da intensidade e direção do strain mecânico

Referência Bibliográfica

- [1] K. He, Y. Wang, and Q. Xue. Quantum anomalous hall effect. *National Science Review*, 1(1):38–48, 2014.
- [2] M. O. Goerbig. Quantum hall effects. *arXiv:0909.1998v2*, 2009.
- [3] A. W. Smith. The variation of the hall effect in metals with change of temperature. *Physical Review (Series I)*, 30(1):1, 1910.
- [4] E. M. Pugh and N. Rostoker. Hall effect in ferromagnetic materials. *Rev. Mod. Phys.*, 25:151–157, Jan 1953.
- [5] C. Chang, J. Zhang, X. Feng, and *et al.* Experimental observation of the quantum anomalous hall effect in a magnetic topological insulator. *Science*, 340:167, 2013.
- [6] J. L. H. Correa. *Estrutura Eletrônica e Propriedades de Transporte Quântico em Nanoestruturas de Grafeno e Siliceno*. PhD thesis, Universidade de Brasília, 2014.
- [7] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature materials*, 6(3):183–191, 2007.
- [8] F. C. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett*, 61:2015, 1988.
- [9] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95(22):226801, 2005.
- [10] B. A. Bernevig and T. L. Hughes S. C. Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, 314:1757–612, 2006.

- [11] M. König, S. Wiedmann, and C. Brüne *et al.* Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318:766–70, 2007.
- [12] G. S. Diniz, M. R. Guassi, and F. Qu. Controllable spin-charge transport in strained graphene nanoribbon devices. *J. of Appl. Phys.*, 116(11):113705, 2014.
- [13] R. E. Peierls. Quelques propriétés typiques des corps solides. *Ann. I. H. Poincaré*, 5:177, 1935.
- [14] C. Liu, W. Feng, and Y. Yao. Quantum spin hall effect in silicene and two-dimensional germanium. *Phys. Rev. Lett.*, 107:076802, Aug 2011.
- [15] X. Qian, J. Liu, L. Fu, and J. Li. Quantum spin hall effect in two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Science*, 346:1344, 2014.
- [16] M. R. Guassi, G. S. Diniz, N. Sandler, and F. Qu. Zero-field and time-reversal-symmetry-broken topological phase transitions in graphene. *Phys. Rev. B*, 92:075426, Aug 2015.
- [17] G. S. Diniz, M. R. Guassi, and F. Qu. Engineering the quantum anomalous hall effect in graphene with uniaxial strains. *J. of Appl. Phys.*, 114(24):243701, 2013.
- [18] L. D. Landau. Zur theorie der phasenumwandlungen ii. *Phys. Z. Sowjetunion*, 11:26, 1937.
- [19] J. A. Venables, G. D. T. Spiller, and M. Hanbucken. Nucleation and growth of thin films. *Rep. Prog. Phys.*, 47:399, 1984.
- [20] J. W. Evans, P. A. Thiel, and M.C. Bartelt. Morphological evolution during epitaxial thin film growth: Formation of 2d islands and 3d mounds. *Sur. Sci. Rep.*, 61:1, 2006.
- [21] J. L. Tedesco, B. L. VanMil, R. L. Myers-Ward, J. M. McCrate, S. A. Kitt, P. M. Campbell, G. G. Jernigan, J. C. Culbertson, C. R. Eddy Jr, and D. K. Gaskill. Hall effect mobility of epitaxial graphene grown on silicon carbide. *Appl. Phys. Lett.*, 95(12):122102, 2009.

- [22] T. Shen, J. J. Gu, M. Xu, Y. Q. Wu, M. L. Bolen, M. A. Capano, L. W. Engel, and P. D. Ye. Observation of quantum-hall effect in gated epitaxial graphene grown on sic (0001). *Appl. Phys. Lett.*, 95(17):172105, 2009.
- [23] J. Hass, F. Varchon, J. Millan-Otoya, M. Sprinkle, N. Sharma, W. A. de Heer, C. Berger, P. N. First, L. Magaud, and E. H. Conrad. Why multilayer graphene on 4 h-sic (000 1⁻) behaves like a single sheet of graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 100(12):125504, 2008.
- [24] G. M. Rutter, J. N. Crain, N. P. Guisinger, T. Li, P. N. First, and J. A. Stroscio. Scattering and interference in epitaxial graphene. *Science*, 317(5835):219–222, 2007.
- [25] M. Sprinkle, D. Siegel, Y. Hu, J. Hicks, A. Tejada, A. Taleb-Ibrahimi, P. Le Fevre, F. Bertran, S. Vizzini, H. Enriquez, et al. First direct observation of a nearly ideal graphene band structure. *Phys. Rev. Lett.*, 103(22):226803, 2009.
- [26] X. Li, W. Cai, J. An, S. Kim, J. Nah, D. Yang, R. Piner, A. Velamakanni, I. Jung, E. Tutuc, et al. Large-area synthesis of high-quality and uniform graphene films on copper foils. *Science*, 324(5932):1312–1314, 2009.
- [27] S. Nie, Joseph M. W., N. C. Bartelt, O. D. Dubon, and K. F. McCarty. Origin of the mosaicity in graphene grown on cu (111). *Phys. Rev. B*, 84(15):155425, 2011.
- [28] A. Varykhalov and O. Rader. Graphene grown on co (0001) films and islands: Electronic structure and its precise magnetization dependence. *Phys. Rev. B*, 80(3):035437, 2009.
- [29] T. Oznuluer, E. Pince, E. O. Polat, O. Balci, O. Salihoglu, and C. Kocabas. Synthesis of graphene on gold. *Appl. Phys. Lett.*, 98(18):183101, 2011.
- [30] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, 71:622, 1947.
- [31] J. W. McClure. Diamagnetism of graphite. *Phys. Rev.*, 104:666, 1956.
- [32] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss. Band structure of graphite. *Phys. Rev.*, 109:272, 1958.

- [33] R. E. Smalley. Discovering the fullerenes. *Rev. Mod. Phys.*, 69(3):723–730, 1997.
- [34] S. Iijima et al. Helical microtubules of graphitic carbon. *nature*, 354(6348):56–58, 1991.
- [35] L. Brey and H. A. Fertig. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the dirac equation. *Phys. Rev. B*, 73(23):235411, 2006.
- [36] W. Häusler and R. Egger. Artificial atoms in interacting graphene quantum dots. *Phys. Rev. B*, 80(16):161402, 2009.
- [37] Z. Z. Zhang, K. Chang, and F. M. Peeters. Tuning of energy levels and optical properties of graphene quantum dots. *Phys. Rev. B*, 77(23):235411, 2008.
- [38] A. Rycerz. Electron transport and quantum-dot energy levels in z-shaped graphene nanoconstriction with zigzag edges. *arXiv preprint arXiv:0911.1550*, 2009.
- [39] K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Yamamoto, and M. Sigrist. Electronic transport properties of graphene nanoribbons. *New J. Phys.*, 11(9):095016, 2009.
- [40] M. Ezawa. Peculiar width dependence of the electronic properties of carbon nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 73(4):045432, 2006.
- [41] K. Takeda and K. Shiraishi. Theoretical possibility of stage corrugation in si and ge analogs of graphite. *Phys. Rev. B*, 50:14916–14922, Nov 1994.
- [42] G. G. Guzmán-Verri and L. C. Lew Yan Voon. Electronic structure of silicon-based nanostructures. *Phys. Rev. B*, 76:075131, Aug 2007.
- [43] L. D. Landau and E.M. Lifshitz. *Quantum Mechanics (non-relativistic theory)*. Pergamon, Oxford, 1958.
- [44] P. Dietl. *Numerical Studies of Electronic Transport through Graphene Nanoribbons with Disorder*. PhD thesis, Karlsruhe Institute of Technology, 2009.
- [45] F. Liu, P. Ming, and J. Li. Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension. *Phys. Rev. B*, 76:064120, 2007.

- [46] K. S. Kim, Y. Zhao, H. Jang, S. Y. Lee, J. M. Kim, K. S. Kim, J. H. Ahn, P. Kim, J. Choi, and B. H. Hong. Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes. *Nature (London)*, 457:706, 2009.
- [47] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Harcourt College Publishers, 1976.
- [48] E. H. Hall. On a new action of the magnet on electric currents. *Am. J. Math*, 2:287–292, 1879.
- [49] K. V. Klitzing, Gerhard Dorda, and Michael Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45(6):494, 1980.
- [50] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48(22):1559, 1982.
- [51] E. Akkermans. *Mesoscopic physics of electrons and photons*. Cambridge University Press, 2007.
- [52] L. A. W. Shubnikov and W. J. de Haas. Leiden commun. 207a (1930). *Proc. Netherlands R. Acad. Sci*, 33:130, 1930.
- [53] W. Poirier and F. Schopfer. Resistance metrology based on the quantum hall effect. *The European Physical Journal-Special Topics*, 172(1):207–245, 2009.
- [54] W. Poirier and F. Schopfer. Quantum hall effect and ohm metrology. *International Journal of Modern Physics B*, 23(12n13):2779–2789, 2009.
- [55] J. K. Jain. Composite-fermion approach for the fractional quantum hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 63(2):199, 1989.
- [56] J. K. Jain. Theory of the fractional quantum hall effect. *Phys. Rev. B*, 41(11):7653, 1990.
- [57] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong. Anomalous hall effect. *Rev. Mod. Phys.*, 82(2):1539, 2010.

- [58] M. V. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 392, pages 45–57. The Royal Society, 1984.
- [59] A. Kundt. On the hall effect in ferromagnetic materials. *Wied. Ann.*, 49:257, 1893.
- [60] E. M. Pugh. Hall effect and the magnetic properties of some ferromagnetic materials. *Phys. Rev.*, 36:1503, 1930.
- [61] E. M. Pugh and T. W. Lippert. Hall emf and intensity of magnetization. *Physical Review*, 42(5):709, 1932.
- [62] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. C. Zhang. Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science*, 301:1348–51, 2003.
- [63] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald. Universal intrinsic spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 92:126603, 2004.
- [64] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. C. Zhang. Spin-hall insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 93:156804, 2004.
- [65] J. Maciejko, T. L. Hughes, and S. C. Zhang. The quantum spin hall effect. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 2:31–53, 2011.
- [66] B. A. Bernevig and S. C. Zhang. Quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 96:106802, 2006.
- [67] C. X. Liu, T. L. Hughes, and X. L. Qi *et al.* Quantum spin hall effect in inverted type-ii semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 100:236601, 2008.
- [68] I. Knez, R. R. Du, and G. Sullivan. Evidence for helical edge modes in inverted inas/gasb quantum wells. *Phys. Rev. Lett.*, 107:136603, 2011.
- [69] F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci. Strain effect on the optical conductivity of graphene. *Phys. Rev. B*, 81(3):035411, 2010.

- [70] P. O. Löwdin. On the non-orthogonality problem connected with the use of atomic wave functions in the theory of molecules and crystals. *J. of the Chem. Phys.*, 18:365, 1950.
- [71] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81(1):109, 2009.
- [72] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene. *Phys. Rev. B*, 80(4):045401, 2009.
- [73] M. Zarea and N. Sandler. Rashba spin-orbit interaction in graphene and zigzag nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 79(16):165442, 2009.
- [74] C. L. Kane and E. J. Mele. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95(14):146802, 2005.
- [75] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas. Spin-orbit coupling in curved graphene, fullerenes, nanotubes, and nanotube caps. *Phys. Rev. B*, 74(15):155426, 2006.
- [76] M. P. López-Sancho and M. C. Muñoz. Intrinsic spin-orbit interactions in flat and curved graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 83(7):075406, 2011.
- [77] Y. S. Dedkov, M. Fonin, U. Rüdiger, and C. Laubschat. Rashba effect in the graphene/n(111) system. *Phys. Rev. Lett.*, 100(10):107602, 2008.
- [78] Z. Qiao, S. A. Yang, W. Feng, W. Tse, J. Ding, Y. Yao, J. Wang, and Q. Niu. Quantum anomalous hall effect in graphene from rashba and exchange effects. *Phys. Rev. B*, 82(16):161414, 2010.
- [79] N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto. Coulomb interactions and ferromagnetism in pure and doped graphene. *Phys. Rev. B*, 72(17):174406, 2005.
- [80] T. Chen, Z. Xiao, D. Chiou, and G. Guo. High chern number quantum anomalous hall phases in single-layer graphene with haldane orbital coupling. *Phys. Rev. B*, 84(16):165453, 2011.

- [81] H. Zheng, Z. F. Wang, T. Luo, Q. W. Shi, and J. Chen. Analytical study of electronic structure in armchair graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 75:165414, 2007.
- [82] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. *Phys. Rev. B*, 54:17954, 1996.
- [83] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, 314(5806):1757–1761, 2006.
- [84] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X. Qi, and S. Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770, 2007.
- [85] Y. Yang, Z. Xu, L. Sheng, B. Wang, D. Y. Xing, and D. N. Sheng. Time-reversal-symmetry-broken quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 107(6):066602, 2011.
- [86] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley e Sons Inc., 1996.
- [87] A. P. Barboza *et al.* Deformation induced semiconductor-metal transition in single wall carbon nanotubes probed by electric force microscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 100:256804, 2008.
- [88] M. Y. Huang *et al.* Direct measurement of strain-induced changes in the band structure of carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 100:136803, 2008.
- [89] A. G. Souza *et al.* Strain-induced interference effects on the resonance raman cross section of carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 95:217403, 2005.
- [90] L. Yang and J. Han. Electronic structure of deformed carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 85:154, 2000.
- [91] J. Cao, Q. Wang, and H. J. Dai. Electromechanical properties of metallic, quasi-metallic, and semiconducting carbon nanotubes under stretching. *Phys. Rev. Lett.*, 90:157601, 2003.

- [92] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene. *Phys. Rev. B*, 80:045401, 2009.
- [93] L. Blakslee, D. G. Proctor, E. J. Seldin, G. B. Stence, and T. Wen. Elastic constants of compression-annealed pyrolytic graphite. *J. Appl. Phys*, 41:3373, 1970.
- [94] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, 316:1757, 2006.
- [95] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318:766, 2007.
- [96] X. Qi and S. Zhang. Topological insulators and superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 83:1057–1110, Oct 2011.
- [97] C. Liu, T. L. Hughes, X. Qi, K. Wang, and S. Zhang. Quantum spin hall effect in inverted type-ii semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 100:236601, Jun 2008.
- [98] R. Yu, W. Zhang, H. Zhang, S. Zhang, X. Dai, and Z. Fang. Quantized anomalous hall effect in magnetic topological insulators. *Science*, 329:61–4, 2010.
- [99] T. Chen, Z. Xiao, D. Chiou, and G. Guo. High chern number quantum anomalous hall phases in single-layer graphene with haldane orbital coupling. *Phys. Rev. B*, 84:165453, Oct 2011.
- [100] Y. Zhang et al. Experimental observation of the quantum hall effect and berry’s phase in graphene. *Nature*, 438:201, 2005.
- [101] Z. Qiao et al. Microscopic theory of quantum anomalous hall effect in graphene. *Phys. Rev. B*, 85:115439, Mar 2012.
- [102] S. Oh. The complete quantum hall trio. *Science*, 340(6129):153–154, 2013.
- [103] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim. Energy gaps and a zero-field quantum hall effect in graphene by strain engineering. *Nat. Phys.*, 6(1):30–33, 2009.

- [104] M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, A. Tünnermann, S. Nolte, M. Segev, and A. Szameit. Strain-induced pseudomagnetic field and photonic landau levels in dielectric structures. *Nature Photon.*, 3:91, 2009.
- [105] S. V. Iordanskii and A. E. Koshelev. Dislocations and localization effects in multivalley conductors. *JETP Lett.*, 41:574, 1985.
- [106] Yugui Yao, Fei Ye, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, and Zhong Fang. Spin-orbit gap of graphene: First-principles calculations. *Phys. Rev. B*, 75(4):041401, 2007.
- [107] H. Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, and A. H. MacDonald. Intrinsic and rashba spin-orbit interactions in graphene sheets. *Phys. Rev. B*, 74(16):165310, 2006.
- [108] A. H. Castro Neto and F. Guinea. Impurity-induced spin-orbit coupling in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 103(2):026804, 2009.
- [109] M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis. Understanding electron behavior in strained graphene as a reciprocal space distortion. *Phys. Rev. B*, 88:085430, Aug 2013.
- [110] J. Wurm, M. Wimmer, and K. Richter. Symmetries and the conductance of graphene nanoribbons with long-range disorder. *Phys. Rev. B*, 85:245418, Jun 2012.
- [111] D. K. Ferry, S. M. Goodnick, and J. Bird. *Transport in nanostructures*, volume 6. Cambridge University Press, 2009.
- [112] E. N. Economou. *Green's functions in quantum physics*, volume 3. Springer, 1984.
- [113] S. Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
- [114] D. S. Fisher and P. A. Lee. Relation between conductivity and transmission matrix. *Phys. Rev. B*, 23(12):6851, 1981.
- [115] M. B. Nardelli. Electronic transport in extended systems: Application to carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 60(11):7828, 1999.

- [116] D. J. Thouless and S. Kirkpatrick. Conductivity of the disordered linear chain. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 14(3):235, 1981.
- [117] G. Metalidis. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. PhD thesis, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2007.
- [118] J. J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern quantum mechanics*. Addison-Wesley, 2011.
- [119] Y. Lu and J. Guo. Band gap of strained graphene nanoribbons. *Nano Research*, 3(3):189–199, 2010.
- [120] L. Yang and J. Han. Electronic structure of deformed carbon nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 85:154, 2000.
- [121] M. Topsakal, V. M. K. Bagci, and S. Ciraci. Current-voltage characteristics of armchair graphene nanoribbons under uniaxial strain. *Phys. Rev. B*, 81:205437, May 2010.
- [122] R. Rasuli, H. Rafii-Tabar, and A. Irajizad. Strain effect on quantum conductance of graphene nanoribbons from maximally localized wannier functions. *Phys. Rev. B*, 81:125409, Mar 2010.
- [123] M. Poetschke, C. G. Rocha, L. E. F. Foa Torres, S. Roche, and G. Cuniberti. Modeling graphene-based nanoelectromechanical devices. *Phys. Rev. B*, 81:193404, May 2010.
- [124] D. A. Bahamon and Vitor M. Pereira. Conductance across strain junctions in graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 88:195416, Nov 2013.
- [125] T. Lehmann, D. A. Ryndyk, and G. Cuniberti. Combined effect of strain and defects on the conductance of graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 88:125420, Sep 2013.
- [126] R. Gómez-Medina, P. San José, A. García-Martín, and *et al.* Resonant radiation pressure on neutral particles in a waveguide. *Phys. Rev. Lett.*, 86:4275–4277, May 2001.
- [127] S. Datta and B. Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Appl. Phys. Lett.*, 56(7):665–667, 1990.

Apêndice A

Engineering the Quantum Anomalous Hall Effect in Graphene with Uniaxial Strains

G. S. Diniz,^{1, a)} M. R. Guassi,¹ and F. Qu^{1,2}

¹⁾*Institute of Physics, University of Brasília, 70919-970, Brasília-DF, Brazil*

²⁾*Department of Physics, The University of Texas at Austin, Austin, Texas 78712, USA*

(Dated: 9 December 2013)

We theoretically investigate the manipulation of the quantum anomalous Hall effect (QAHE) in graphene by means of the uniaxial strain. The values of Chern number and Hall conductance demonstrate that the strained graphene in presence of Rashba spin-orbit coupling and exchange field, for vanishing intrinsic spin-orbit coupling, possesses non-trivial topological phase which is robust against the direction and modulus of the strain. Besides, we also find that the interplay between Rashba and intrinsic spin-orbit couplings results in a topological phase transition in the strained graphene. Remarkably, as the strain strength is increased beyond approximately 7%, the critical parameters of the exchange field for triggering the quantum anomalous Hall phase transition show distinct behaviors - decrease (increase) for strains along zigzag (armchair) direction. Our findings open up a new platform for manipulation of the QAHE by an experimentally accessible strain deformation of the graphene structure, with promising application on novel quantum electronic devices with high energy efficiency performance.

PACS numbers: 73.22.Pr,73.43.Cd,75.50.Pp,61.48.Gh,77.65.Ly

I. INTRODUCTION

Graphene - a truly two-dimensional material, composed only by covalently bonded carbon atoms in a honeycomb lattice, has been attracting the attention of the scientific community since its first well succeeded realization¹. Most of its interests are due to the unusual electronic, thermal and nanomechanical properties with potential applications in wide variety of fields, for instance: spintronics², Majorana fermions proposals for quantum computation³, electron optics⁴, photonics⁵ and many others.

The prospect of using graphene in spintronic devices relies on the understanding of spin-orbit coupling (SOC). Two different SOC contributions are present in graphene: (i) *extrinsic* Rashba SOC, originated from interactions with the substrate, electric field or curvature⁶⁻⁸ and (ii) the *intrinsic* SOC (ISO) originated from the carbon intra-atomic SOC, which is proposed to give rise to an insulating bulk electronic state that supports the transport of charge and spin in conducting edge states along the sample boundaries. This emerging time reversal invariant electronic state is the so-called quantum spin-Hall phase (QSH)⁹⁻¹⁴.

Since SOC holds time reversal symmetry (TRS), the spin current in a given edge is robust against scattering induced by nonmagnetic impurities^{10,11}. Nevertheless, it might be suppressed by a magnetic field due to breaking down of TRS. A suppression of QSH is compensated by an emerge of another state of matter - *quantum Hall state* - characterized by a precisely quantized Hall conductance. One of the grand challenges of the quantum

Hall effect (QHE) is controlling spin-dependent properties without using external magnetic fields. To do so, one can resort to the SOC combined with an internal magnetization, which is responsible for breaking TRS. This kind of study has given rise to new physical insights in established phenomena, such as the quantum *anomalous* Hall effect, in which one of the spin channels in the QSH state is suppressed by the sample magnetization, that may be experimentally achieved through magnetic atom doping in the sample¹⁵⁻¹⁷.

It is known that strains can be introduced on graphene either intentionally by tensions at the sample-leads contacts on suspended graphene devices¹⁸, or naturally induced by the substrate deformation in which the graphene is deposited on top¹⁹⁻²³. Since the strain stretches the hexagonal lattice of the graphene out of equilibrium, with high degree of tunability in a diverse type of applied mechanical strain^{24,25}, it may directly alter one of the degrees of freedom: namely the pseudospin. Consequently, it induces changes of SOC as well as QAHE. Therefore, strains can offer an ideal opportunity to create new paradigms of QAHE intentional control in graphene²⁶.

Motivated by the prospects of external manipulation of the QAHE in graphene by strains²⁶⁻²⁹, we present in this paper results of the microscopic study of the QAHE in graphene under uniaxial strains. For this purpose, we have theoretically explored the dependence of electronic structure, topological and transport properties upon the orientation and modulus of uniaxial strain, in the presence of Rashba, ISO and an exchange field interaction.

^{a)}Electronic mail: ginetom@gmail.com

II. THEORETICAL MODEL

We consider a graphene honeycomb lattice in the x - y plane in presence of uniaxial strains with homogeneous Rashba SOC, ISO and exchange field interaction. The graphene is described by a π -orbital orthogonal tight-binding model with nearest-neighbor hopping. The Hamiltonian for this system in the real space is described by

$$H = H_{KM} + H_M, \quad (1)$$

where

$$\begin{aligned} H_{KM} &= \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{z} \cdot (\vec{s} \times \vec{\delta}_{ij}) c_i^\dagger c_j \\ &\quad + \frac{2i}{\sqrt{3}} \lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} c_i^\dagger \vec{s} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) c_j \\ H_M &= M \sum_{i;\sigma,\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger s_{\sigma\sigma'}^z c_{i\sigma'}. \end{aligned} \quad (2)$$

Here H_{KM} is the Kane-Mele model, in which the first term is kinetic energy, the second and third terms are the Rashba SOC and ISO¹⁰, respectively. The operators $c_{i\sigma}^\dagger/c_{i\sigma}$ creates/annihilates an electron at site i with spin σ ($=\uparrow, \downarrow$) and hopping amplitude $t_{ij} = t_i = t_0 e^{-3.37(\delta_i - 1)}$, where unstrained graphene hopping $t_0 \approx -2.9\text{eV}$ ³⁰ and the deformed lattice distances $\vec{\delta}_i$ are related to the relaxed ones $\vec{\delta}_i^0$ by $\vec{\delta}_i = (1 + \epsilon) \vec{\delta}_i^0$, with $\vec{\delta}_1^0 = (0, -1)$, $\vec{\delta}_2^0 = 1/2(\sqrt{3}, 1)$ and $\vec{\delta}_3^0 = 1/2(-\sqrt{3}, 1)$. The vectors \vec{d}_{ij} points from j to i , which for the ISO with coupling parameter λ_{so} connects the next nearest-neighbors through k , \vec{s} are the Pauli spin matrices. The Rashba SOC parameter λ_R is proportional to the electric field applied perpendicular to the x - y plane of the graphene^{31,32}. The term H_M corresponds to the uniform exchange field with strength M responsible for breaking TRS of the system³³. In the elastic regime, the uniaxial strain tensor ϵ that relates the relaxed lattice vector to the strained ones can be written as³⁴

$$\epsilon = \epsilon \begin{pmatrix} \cos^2 \theta - \nu \sin^2 \theta & (1 + \nu) \cos \theta \sin \theta \\ (1 + \nu) \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta - \nu \cos^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (4)$$

where $\nu = 0.165$ is the Poisson's ratio value known for graphite³⁴, θ denotes the angle along which the strain is applied with respect to the x -axis in the direct lattice coordinate system, with $\vec{a}_1^0 = a/2(2\sqrt{3}, 0)$ and $\vec{a}_2^0 = a/2(\sqrt{3}, 3)$ and ϵ is the strain modulus³⁴. We set the unstrained C-C distance a to be unity for simplicity.

By making Fourier transformation of Eq. 1 and taking into account the effect of strain presented in Eq. 4, we obtain a 4×4 matrix $H(\vec{k})$ in the momentum space, that can be numerically diagonalized for each crystal momentum to obtain the energy eigenvalues and eigenvectors.

To identify the topological properties of the Dirac gap and study the origin of QAHE, we have calculated the

Berry curvature of the n th bands $\Omega_{xy}^n(k_x, k_y)$ using the Kubo formula

$$\Omega_{xy}^n(k_x, k_y) = - \sum_{n' \neq n} \frac{2\text{Im} \langle \Psi_{nk} | v_x | \Psi_{n'k} \rangle \langle \Psi_{n'k} | v_y | \Psi_{nk} \rangle}{(\omega_{n'} - \omega_n)^2}, \quad (5)$$

where $\omega_n = E_n/\hbar$ with E_n the energy eigenvalue of the n th band and $v_{x(y)} = \hbar^{-1} \partial H / \partial k_{x(y)}$ is the Fermi velocity operator. When the Fermi level lies within the bulk gap, i.e. in the insulating regime, according to the Kubo formula, the corresponding Hall conductance is quantized as $\sigma_{xy} = \mathcal{C}e^2/h$. Where \mathcal{C} is defined as the Chern number and can be calculated by³⁵

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \sum_n \int_{BZ} d^2k \Omega_{xy}^n, \quad (6)$$

where the summation is taken over all the occupied states below the Fermi level and the integration is carried out over the whole first Brillouin zone.

Since the Berry curvatures are highly peaked around the Dirac points \mathbf{K} and \mathbf{K}' ³⁶, then a low energy approximation can be used in the calculation of the Chern number³⁷. This allows us to derive an effective tight-binding Hamiltonian of the strained graphene, by expanding $H(\vec{k})$ at the vicinity of the strain-shifted Dirac points, i.e., $\vec{k} = \eta\mathbf{K} + \vec{q}$, where $\eta = \pm 1$ labels the two valleys and $\vec{q} = (q_x, q_y)$ is a small crystal momentum around $\eta\mathbf{K}$ (see Appendix. A for further details). The validity of the low energy approximation requires the strain modulus to be upper limited, such that does not go beyond the threshold of an appearance of a band gap, thus the band is still linear and gapless at the strain-shifted Dirac points, in the absence of SOC and exchange field interactions³⁴. This condition is fulfilled by the relation on the strain-dependent hopping parameters $|t_1 - t_2| \leq t_3 \leq |t_1 + t_2|$, where $t_{i=1,2,3}$ are the hopping along each C-C bond³⁸. Under this condition, we calculate the Chern number using the following equation,

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \sum_{K, K'} \sum_{n=1,2} \int_{-\infty}^{\infty} dq_x dq_y \Omega_{xy}^n(q_x, q_y). \quad (7)$$

It is interesting to mention that in the above integral, a momentum cutoff is set around each valley for which the Chern number calculation is guaranteed to converge.

III. NUMERICAL RESULTS AND DISCUSSIONS

In Fig. 1 (a), we schematically show the sample which is used in our model calculation - the graphene subjected to an uniaxial strain whose directions are indicated by the arrows: $\theta=0$ (along zigzag direction) and $\theta=\pi/2$ (along armchair direction). Fig. 1 (b) shows the contour plot of the Berry curvature distribution of upper valence band, in the momentum space for the unstrained

graphene. One can note that sharp peaks of the Berry curvature are localized close to the Brillouin zone corners and share the same sign. Fig. 1 (c) plots the influence of magnitude and orientation of the strain on the energy dispersion along q_x for $q_y=0$, with $\lambda_R=0.1t$, $\lambda_{so}=0$ and exchange field $M=0.2t$. The spin expectation value $\langle S_z \rangle$ associated with the correspondent states illustrated in (c) is shown in (d). The $\langle S_z \rangle$ reaches its maximum value when the momentum approaches to $q_x=0$. This indicates a weak spin mixture for the lowest conduction and highest valence bands close to the Dirac points. In the case of $\theta = \pi/2$, and same strength $\varepsilon=0.1$ (dotted lines) the energy dispersion shows no effect in comparison with the unstrained case, in fact this behavior is due to the anisotropy character of the energy dispersion due to the strain; there is a symmetry breaking of the perfect circular section cuts in the conical spectrum to ellipses, with the bigger axis along the direction of strain³⁹.

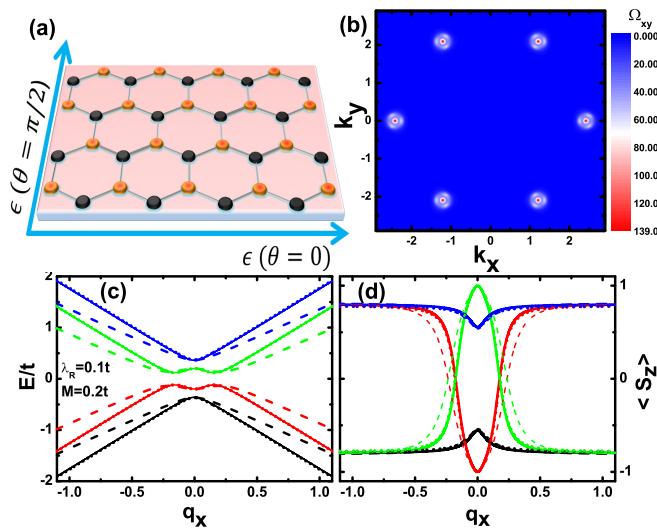


FIG. 1. (a) Schematic diagram showing the graphene above a substrate. The arrows indicate the strain direction: $\theta = 0$ (zigzag direction) and $\theta = \pi/2$ (armchair direction). (b) Berry curvature of upper valence band for the unstrained graphene. (c) Energy dispersion of the graphene in presence of Rashba SOC and exchange coupling along q_x for $q_y=0$. (d) Spin expectation $\langle S_z \rangle$ of an electron in correspondent states shown in (c). In the panels (c)-(d): solid, dashed and dotted lines are for $\varepsilon=0$ and $\varepsilon=0.1$ along $\theta = 0$, and $\theta = \pi/2$, respectively. $\lambda_R=0.1t$, $\lambda_{so}=0$ and $M=0.2t$ have been used in panels (b)-(d).

Fig. 2 (a)-(c) show the contour plots of the Berry curvature of unstrained (a) and strained (b), (c) graphene at the \mathbf{K} -point for the upper valence band in the low energy approximation, with $M=0.3t$, $\lambda_R=0.2t$ and $\varepsilon=0.1$. We notice that the Berry curvature of the unstrained graphene shows a perfect circular symmetry in the x - y plane. Nevertheless, it is elongated along q_y - and q_x - axis for the uniaxial strain being applied along $\theta=\pi/2$ (b) and $\theta=0$ (c), respectively. This behavior is attributed to the anisotropy of the energy bands induced by strains. In or-

der to study quantitatively the effects of uniaxial strain on the topological phases, Fig. 2 (d) plots Berry curvature as a function of q_x for $q_y=0$, as indicated by horizontal lines in Fig. 2 (a)-(c). We find that the uniaxial strain not only breaks down the spherical symmetry, but also reduces the maximum of Berry curvature. This behavior is strongly dependent upon the direction of strain. Besides, for a given strain size, the Berry curvature around Dirac point is less sensitive to the strain direction.

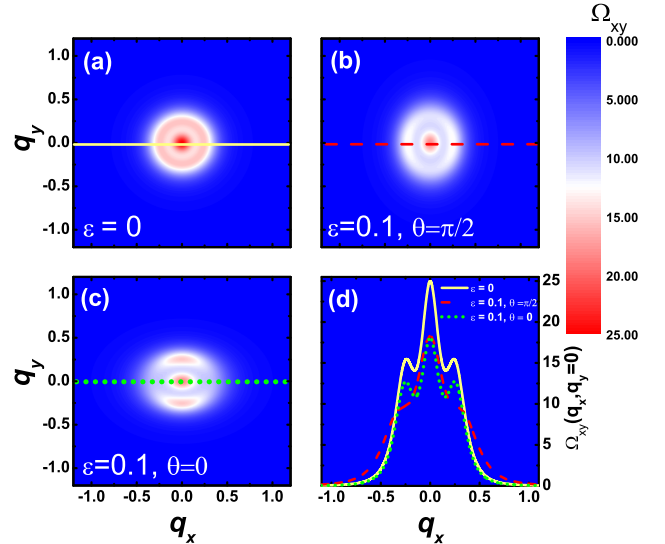


FIG. 2. Contour plots of the Berry curvature considering $\lambda_R=0.2t$ and $M=0.3t$: (a) unstrained graphene, (b) strained along $\pi/2$ with $\varepsilon=0.1$, (c) strained along 0 with $\varepsilon=0.1$. In (d) is shown the Berry curvature for $q_y=0$ profile, which is associated to the lines drawn in panels (a)-(c). Notice that here we have taken the Berry curvature of the upper valence band.

From previous calculations in unstrained graphene, it is known that graphene subjected to Rashba SOC and exchange field, both valleys contribute equally $\mathcal{C}_K = \mathcal{C}_{K'} = 1$ and hence a total Chern number of $\mathcal{C} = 2^{37}$. To profoundly understand the topological property of strained graphene, we have calculated the Chern number for each valence band at K -point for different strength of Rashba SOC, exchange field and strain parameters. Fig. 3 (a), shows the dependence of Chern number on the exchange field and strain parameters for a given $\lambda_R=0.3t$. We notice that for the limiting case $M \rightarrow 0$, the upper valence band is responsible for the Chern number $\mathcal{C}_2=1$, while for the lowest valence band $\mathcal{C}_1=0$.

Fig. 3 (b) plots the Chern number as a function of Rashba SOC strength for a given $M=0.3t$. It is noted that for Rashba SOC in the limiting case $\lambda_R \rightarrow 0$, the upper valence band contributes to one and half quantized Chern number, while the other band contributes to minus half quantized Chern number, thus $\mathcal{C}_K=1$. When λ_R increases, the absolute values of both \mathcal{C}_1 and \mathcal{C}_2 are reduced. It is also worthy to notice that although strain induces a slightly change in the slope of the Chern num-

ber of each band, the total Chern number at \mathbf{K} (\mathbf{K}'), still holds to $C_1 + C_2 = 1$. Therefore, the discussion in ref.¹⁵ of the two limiting cases is still fulfilled in the presence of uniaxial strains, and the QAHE phase is robust under uniform lattice deformation in graphene with Rashba SOC interaction and an exchange field.

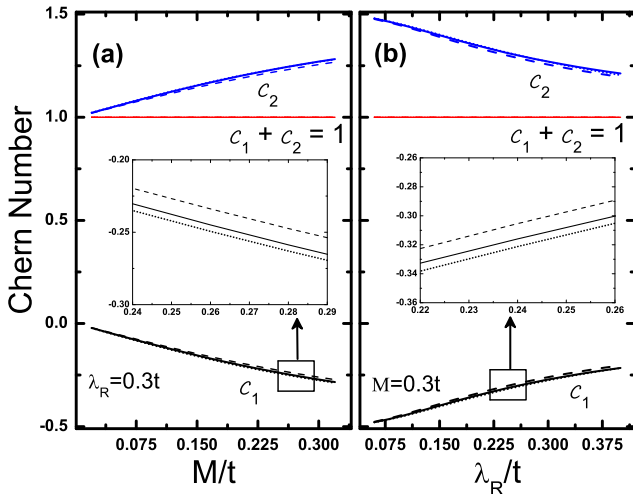


FIG. 3. (a) Calculated Chern number for the two valence bands as a function of M for $\lambda_R=0.3t$ and different strain configurations. (b) Calculated Chern number for the two valence bands as a function of λ_R for fixed $M=0.3t$ and different strain configurations. The inset in panels (a) and (b) shows the zoom of the squared region. Solid, dotted and dashed lines represent $\varepsilon = 0$ and $\varepsilon = 0.16$ for $\theta = 0$ and $\theta = \pi/2$, respectively. For this calculation we have set $\lambda_{so}=0$.

As known, ISO interaction respects the symmetries of the crystal and does not couple states of opposite spins. But it opens up a topologically non-trivial bulk band gap at zero magnetic field¹⁰. This bulk band gap hosts two counter-propagating edge modes per edge in the graphene nanoribbon, with opposite spins: this topological phase is known as the QSH phase, and may be regarded as two opposite QH phases (i.e., each spin performs the QH effect, with opposite chirality)⁹. Therefore, the Chern number must vanish in a system with TRS. In contrast, the Rashba term explicitly violates the $z \rightarrow -z$ mirror symmetry. Moreover, it mixes different spin components and depresses the ISO induced band gap⁴⁰. When the exchange field is applied and only ISO is turned on, the combination of the ISO coupling and exchange field leads to the breaking of the TRS which is preserved in the QSH phase. However, due to the absence of spin-flip terms in the Hamiltonian, the helical edge-state structure persists. Thus, both the Chern number and the conductance are equal to zero. Unlikely, when Rashba SOC is considered in addition to ISO and exchange field, the system can be in a regime, which depends on λ_R , λ_{so} and M parameters, that may result in a phase transition from zero-conductance to finite conductance.

Let us now calculate the Hall conductance of the

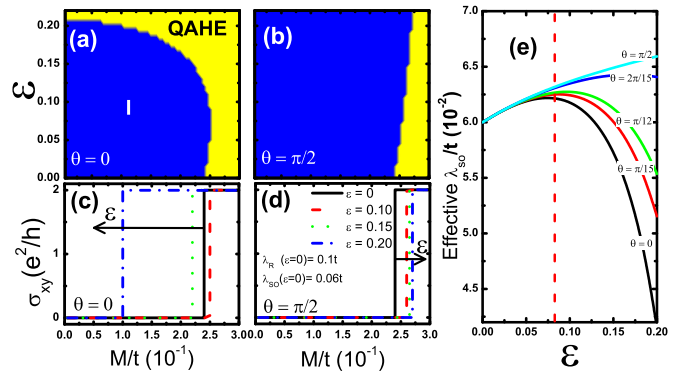


FIG. 4. Phase diagram of the QAHE for strained graphene along two distinct directions: (a) along $\theta = 0$ and (b) along $\theta = \pi/2$. The Hall conductance as a function of the exchange interaction M , for uniaxial strain direction along $\theta = 0$ and $\theta = \pi/2$ with four different strain strengths is shown in (c) and (d), respectively. The arrows in panels (c)-(d) indicate the direction for which the strength is increased from $\varepsilon=0$ to $\varepsilon=0.2$. The parameters $\lambda_R(\varepsilon=0) = 0.1t$ and $\lambda_{so}(\varepsilon=0) = 0.06t$ have been used in panels (a)-(d). (e) Effective λ_{so} as function of strain strength along different directions θ . The vertical dashed line in panel (e) indicates the limiting strain parameter, for which the effective ISO parameter changes its behavior according to the direction and modulus of strain.

strained graphene considering both Rashba SOC and ISO. Fig. 4 (a) and (b) show the Hall conductance for $\lambda_R(\varepsilon=0) = 0.1t$ and $\lambda_{so}(\varepsilon=0) = 0.06t$ along $\theta = 0$ and $\theta = \pi/2$, respectively. One can clearly note the two distinct phases: Insulating (I) characterized by $\mathcal{C}=0$ and the QAHE phase with $\mathcal{C}=2$, where $\mathcal{C} = \mathcal{C}_K + \mathcal{C}_{K'}$. The two different phases can be accessed by appropriately tuning the exchange field M and the strain modulus ε . Fig. 4 (d) shows the dependence of the Hall conductance $\sigma_{xy} = \mathcal{C}e^2/h$ on the exchange field and the strain parameters with $\theta = \pi/2$ for $\lambda_R(\varepsilon=0)=0.1t$ and $\lambda_{SO}(\varepsilon=0)=0.06t$. We find that in contrary to Fig. 3, in which only QAHE phase exists, a finite ISO drives a phase transition from QAHE to an insulator phase. We also notice that for M being smaller than $0.24t$, the conductance σ_{xy} of unstrained graphene is equal to zero, corresponding to an insulator phase in the graphene, also called a time-reversal-symmetry-broken quantum spin-Hall phase⁴¹. At $M_c = 0.24t$, an abrupt change from 0 to $2e^2/h$ takes place, which indicates a quantization of the Hall conductance and an occurring of a phase transition at $M = M_c$. After that, it remains $2e^2/h$, in which the unstrained graphene stays in the phase of QAHE. Furthermore, the applied strain drives Hall conductance curve forward to the right-hand side for strained graphene. Consequently, as the strain modulus increases from zero, the critical exchange field M_c becomes larger, such as for $\varepsilon=0.2$, $M_c=0.275t$ with a relative change of M_c being approximately +14.5%. Astonishingly, in the case of $\theta = 0$, as demonstrated in Fig. 4 (c), there is an increase in the exchange field with similar behavior

for the Hall conductance. However, beyond an specific value of strain modulus, indicated by the vertical dashed line in Fig. 4 (e), the system presents an opposite strain-strength dependence, i.e. an increase in the strain parameter shifts the Hall conductance curve to the left-hand side. For instance, in the case of $\varepsilon=0.2$, we have obtained $M_c=0.1t$ with a relative change of M_c being equal to -58.3%.

The distinct behaviors observed along different strain directions for the QAHE phase transition, can be explained by the competition of the Rashba SOC and ISO in the bulk band gap-closing phenomena, for a given critical exchange field M_c ^{15,42}. In the case of $\theta=\pi/2$, an increase in the strain modulus leads to an approximately linear enhancement in the ISO parameter as can be observed in Fig. 4 (e), which results in a smaller bulk band gap in presence of an exchange field. On the other hand, the Rashba SOC is not very sensitive to the variation of strain strength. Therefore, the variation of Hall conductance mainly reflects the dependence of ISO on the strain strength. In contrast, for values of strain modulus larger than $\varepsilon = 0.078$ in the case of $\theta=0$, there is drastic reduction in the effective ISO interaction, hence Rashba becomes dominant and the critical exchange field for the phase transition becomes smaller as one can note in Fig. 4 (c) with a critical $M_c = 0.1t$ for $\varepsilon=0.2$ for the QAHE phase transition.

IV. CONCLUSION

In summary, we have investigated the effects of uniaxial strains on the QAHE in graphene, by using an effective low energy approximation taking into account Rashba SOC, ISO and exchange field interaction. We show the evolution of the Berry curvature and the Chern numbers when the orientation and modulus of the uniaxial strain, as well as the exchange field interaction change. We demonstrate the tunability of Chern number and QAHE of the graphene by the strength and direction of applied uniaxial strain. In the absence of ISO, the QAHE phase is robust against the uniaxial strain. Furthermore, when ISO is considered in the system, an interesting be-

havior according to particular directions of strains were found: an increase of the critical exchange field M_c for the QAHE phase transition for $\theta=\pi/2$ as the strain modulus is enhanced, in contrast to the $\theta=0$, which shows a reduction (above a limiting strain modulus of approximately $\varepsilon = 0.078$) in the critical exchange field M_c for the QAHE phase. Our results suggest the possibility to efficiently manipulate the QAHE by a plausible strain engineering of the graphene structure. We envision that our study might be extended to other layered materials^{43,44} with potential application on novel quantum electronic devices with dissipationless charge current.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank fruitful discussions with F. M. D. Pellegrino and Z. Qiao. The authors also acknowledge financial support from CAPES and CNPq.

Appendix A: Effective Hamiltonian of a Graphene Subjected to an Uniaxial Strain

In this Appendix, we derive an effective Hamiltonian of the strained graphene in the low energy regime. After Fourier transforming Eq.1, the obtained 4×4 matrix $H(\vec{k})$ can be expanded around the strain-shifted Dirac points, $\vec{k} = \eta\mathbf{K} + \vec{q}$, where $\mathbf{K} = (K_x, K_y)$, with $\eta=\pm 1$ related to the two valleys³⁹. The low energy Hamiltonian, $H = H_{KM}(\vec{q}) + H_M(\vec{q})$, can then be written on the basis $\{\Psi_{A(\eta K)\uparrow}, \Psi_{A(\eta K)\downarrow}, \Psi_{B(\eta K)\uparrow}, \Psi_{B(\eta K)\downarrow}\}$ as

$$H_{KM}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} 0 & f \\ f^* & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & t_R \\ t_R^* & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_{so} & 0 \\ 0 & -t_{so} \end{pmatrix} \quad (\text{A1})$$

and

$$H_M(\vec{q}) = M \begin{pmatrix} S_z & 0 \\ 0 & S_z \end{pmatrix}, \quad (\text{A2})$$

with matrix elements,

$$f = -\{t_1[1 - i(1 + \epsilon_{22})q_y - i\epsilon_{12}q_x]e^{-i\eta\epsilon_{12}K_x}e^{-i\eta(1+\epsilon_{22})K_y} + t_2[1 + i/2(\epsilon_{12} + \sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}))q_x + i/2(\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}))q_y]e^{i\eta/2(\epsilon_{12} + \sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}))K_x}e^{i\eta/2(\sqrt{3}\epsilon_{21} + 1 + \epsilon_{22})K_y} + t_3[1 + i/2(\epsilon_{12} - \sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}))q_x - i/2(\sqrt{3}\epsilon_{21} - (1 + \epsilon_{22}))q_y]e^{i\eta/2(\epsilon_{12} - \sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}))K_x}e^{-i\eta/2(\sqrt{3}\epsilon_{21} - 1 - \epsilon_{22})K_y}\} \mathbf{1}_s, \quad (\text{A3})$$

$$t_R = \lambda_R\{-i(1 + \epsilon_{22})e^{-2i\theta_1} - (\sqrt{3}\epsilon_{21} \sin \theta_2 - i(1 + \epsilon_{22}) \cos \theta_2)e^{i\theta_1}\}S_x + [-i\epsilon_{12}e^{-2i\theta_1} + (\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}) \sin \theta_2 - i\epsilon_{12} \cos \theta_2)e^{i\theta_1}\}S_y\},$$

$$t_{so} = \eta \det(\epsilon) \lambda_{so} \{2[\sin(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11})K_x) \cos(\sqrt{3}\epsilon_{21}K_y) + \cos(\sqrt{3}(1 + \epsilon_{11})K_x) \sin(\sqrt{3}\epsilon_{21}K_y)] - 4[\sin(\sqrt{3}/2(1 + \epsilon_{11})K_x) \cos(3/2\epsilon_{12}K_x) \cos(\sqrt{3}/2\epsilon_{21}K_y) \cos(3/2(1 + \epsilon_{22})K_y) - \cos(\sqrt{3}/2(1 + \epsilon_{11})K_x) \sin(3/2\epsilon_{12}K_x) \sin(\sqrt{3}/2\epsilon_{21}K_y) \sin(3/2(1 + \epsilon_{22})K_y)] - \cos(\sqrt{3}/2(1 + \epsilon_{11})K_x) \cos(3/2\epsilon_{12}K_x) \sin(\sqrt{3}/2\epsilon_{21}K_y) \cos(3/2(1 + \epsilon_{22})K_y) - \sin(\sqrt{3}/2(1 + \epsilon_{11})K_x) \sin(3/2\epsilon_{12}K_x) \cos(\sqrt{3}/2\epsilon_{21}K_y) \sin(3/2(1 + \epsilon_{22})K_y)]\} S_z.$$

where f , t_R and t_{so} are the elements associated to the hopping, Rashba SOC and ISO, respectively. ϵ_{ij} are the matrix elements of the strain tensor ϵ , $\mathbf{1}_s$ is the identity matrix, S_z is the Pauli spin matrix in the real spin subspace, $\det(\epsilon) = (1 - \epsilon_{11})(1 - \epsilon_{22}) - \epsilon_{21}\epsilon_{12}$, $\theta_1 = \eta/2(\epsilon_{12}K_x + (1 + \epsilon_{22})K_y)$ and $\theta_2 = \sqrt{3}\eta/2((1 + \epsilon_{11})K_x + \epsilon_{21}K_y)$. In the unstrained limit, $\epsilon \rightarrow 0$ and $(K_x, K_y) = (\eta 4\pi/3\sqrt{3}, 0)$, it is possible to show that the low energy Hamiltonian is the same as that obtained in ref.¹⁵.

- ¹K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
²P. Seneor, B. Dlubak, M.-B. Martin, A. Anane, H. Jaffres, and A. Fert, *MRS Bulletin* **37**, 1245 (2012).
³C. Chamon, C.-Y. Hou, C. Mudry, S. Ryu, and L. Santos, *Physica Scripta* **2012**, 014013 (2012).
⁴M. M. Asmar and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **87**, 075420 (2013).
⁵Q. Bao and K. P. Loh, *ACS Nano* **6**, 3677 (2012).
⁶D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, *Phys. Rev. B* **74**, 155426 (2006).
⁷M. P. López-Sancho and M. C. Muñoz, *Phys. Rev. B* **83**, 075406 (2011).
⁸Y. S. Dedkov, M. Foinin, U. Rüdiger, and C. Laubschat, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 107602 (2008).
⁹F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
¹⁰C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
¹¹C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
¹²C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 146802 (2008).
¹³M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
¹⁴Z. F. Wang, N. Su, and F. Liu, *Nano Letters* **13**, 2842 (2013).
¹⁵Z. Qiao, H. Jiang, X. Li, Y. Yao, and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **85**, 115439 (2012).
¹⁶D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
¹⁷C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, *Science* **340**, 167 (2013).
¹⁸W. Bao, F. Miao, Z. Chen, H. Zhang, W. Jang, C. Dames, and C. N. Lau, *Nature Nanotechnology* **4**, 562 (2009).

- ¹⁹M. Bruna, A. Vaira, A. Battiato, E. Vittone, and S. Borini, *Applied Physics Letters* **97**, 021911 (2010).
²⁰T. M. G. Mohiuddin, A. Lombardo, R. R. Nair, A. Bonetti, G. Savini, R. Jalil, N. Bonini, D. M. Basko, C. Galiotis, N. Marzari, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and A. C. Ferrari, *Phys. Rev. B* **79**, 205433 (2009).
²¹Z. H. Ni, H. M. Wang, Y. Ma, J. Kasim, Y. H. Wu, and Z. X. Shen, *ACS Nano* **2**, 1033 (2008).
²²Z. H. Ni, T. Yu, Y. H. Lu, Y. Y. Wang, Y. P. Feng, and Z. X. Shen, *ACS Nano* **2**, 2301 (2008).
²³J. Baringhaus, F. Edler, C. Neumann, C. Stampfer, S. Forti, U. Starke, and C. Tegenkamp, *Applied Physics Letters* **103**, 111604 (2013).
²⁴C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
²⁵G. Gui, J. Li, and J. Zhong, *Phys. Rev. B* **78**, 075435 (2008).
²⁶B. Roy and I. F. Herbut, *Phys. Rev. B* **88**, 045425 (2013).
²⁷H. Zhao, K. Min, and N. R. Aluru, *Nano Letters* **9**, 3012 (2009).
²⁸I. F. Herbut, *Phys. Rev. B* **78**, 205433 (2008).
²⁹D. A. Abanin and D. A. Pesin, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 066802 (2012).
³⁰A. H. Castro Neto and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 026804 (2009).
³¹M. Zarea and N. Sandler, *Phys. Rev. B* **79**, 165442 (2009).
³²Due to lattice deformation induced by the uniaxial strain, there is a change in the Rashba SOC and ISO interactions. Therefore, these interactions can effectively depend on the modulus and direction of strain $\lambda_R(\epsilon)$ and $\lambda_{so}(\epsilon)$. In the following calculations, when we use $\lambda_R(\epsilon = 0)$ and $\lambda_{so}(\epsilon = 0)$, we mean the values of SOC parameters in the unstrained limit.
³³W.-K. Tse, Z. Qiao, Y. Yao, A. H. MacDonald, and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **83**, 155447 (2011).
³⁴V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
³⁵D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
³⁶J. Jung, Z. Qiao, Q. Niu, and A. H. MacDonald, *Nano Letters* **12**, 2936 (2012).
³⁷Z. Qiao, S. A. Yang, W. Feng, W.-K. Tse, J. Ding, Y. Yao, J. Wang, and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **82**, 161414 (2010).
³⁸Y. Hasegawa, R. Konno, H. Nakano, and M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **74**, 033413 (2006).
³⁹F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, *Phys. Rev. B* **81**, 035411 (2010).
⁴⁰D. Bercioux and A. De Martino, *Phys. Rev. B* **81**, 165410 (2010).

- ⁴¹Y. Yang, Z. Xu, L. Sheng, B. Wang, D. Y. Xing, and D. N. Sheng, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 066602 (2011).
- ⁴²T.-W. Chen, Z.-R. Xiao, D.-W. Chiou, and G.-Y. Guo, *Phys. Rev. B* **84**, 165453 (2011).
- ⁴³L. Kou, C. Tang, Y. Zhang, T. Heine, C. Chen, and T. Frauen-

- heim, *The Journal of Physical Chemistry Letters* **3**, 2934 (2012).
- ⁴⁴K. He, C. Poole, K. F. Mak, and J. Shan, *Nano Letters* **13**, 2931 (2013).

Apêndice B

Controllable Spin-Charge Transport in Strained Graphene Nanoribbon Devices

Ginetom S. Diniz,^{1, a)} Marcos R. Guassi,¹ and Fanyao Qu^{1,2}

¹⁾*Institute of Physics, University of Brasília, 70919-970, Brasília-DF, Brazil*

²⁾*Department of Physics, The University of Texas at Austin, Austin, Texas 78712, USA*

(Dated: 13 May 2014)

We theoretically investigate the spin-charge transport in two-terminal device of graphene nanoribbons in the presence of an uniform uniaxial strain, spin-orbit coupling, exchange field and smooth staggered potential. We show that the direction of applied strain can efficiently tune strain-strength induced oscillation of band-gap of armchair graphene nanoribbon (AGNR). It is also found that electronic conductance in both AGNR and zigzag graphene nanoribbons (ZGNRs) oscillates with Rashba spin-orbit coupling akin to the Datta-Das field effect transistor. Two distinct strain response regimes of electronic conductance as function of spin-orbit couplings (SOC) magnitude are found. In the regime of small strain, conductance of ZGNR presents stronger strain dependence along the longitudinal direction of strain. Whereas for high values of strain shows larger effect for the transversal direction. Furthermore, the local density of states (LDOS) shows that depending on the smoothness of the staggered potential, the edge state of AGNR can either emerge or be suppressed. These emerging states can be determined experimentally by performing spatially scanning tunneling microscope or by scanning tunneling spectroscopy. Our findings open up new paradigms of manipulation and control of strained graphene based nanostructure for application on novel topological quantum devices.

PACS numbers: 72.80.Vp, 72.25.-b, 73.43.-f, 77.65.Ly

I. INTRODUCTION

The atomically thick layer of carbon atoms with a honeycomb lattice structure - known as graphene - still keeps attracting considerable deal of attention due to its potential use in electronics. Graphene presents several exotic physical properties, such as the quantum spin Hall effect (QSHE)^{1,2}, associated with a nontrivial topological time-reversal invariant state that has a bulk energy gap; and a pair of gapless spin filtered edge states at the sample boundaries. Recently, another striking topological phenomenon has attracted a notable interest, i.e. the quantum *anomalous* Hall effect (QAHE)³. This topological phenomenon appears if one of the spin channels in the QSH state is suppressed by the own sample magnetization, with the emergence of an electronic topological phase transition, characterized by quantized Hall conductance in an insulating state. This interesting phenomena predicted to be host in graphene^{4,5}, has been experimentally observed in topologically magnetic thin films⁶, with a great promise in spintronic applications⁷.

A mechanism highly desirable in the development of spin-based devices is the effective control of the spin current flow⁸. To obtain polarized electronic current, one of the essential strategies is the creation of an effective potential barrier for a given spin specie, while the other can flow with no resistance. Also, the energy gap control, is an important issue related to the *on-off* electrical tuning⁹. One of the key elements to implement graphene

based nanostructure in spintronic devices, relies upon the role of spin-orbit coupling (SOC). In graphene, there are two different SOC contributions: (i) the *extrinsic* Rashba SOC, originated from the inversion symmetry breaking due to the substrate, which can also be manipulated by applied electric field¹⁰⁻¹² and (ii) the *intrinsic* SOC (ISO) arising from the carbon atomic SOC - which is known to give rise to the existence of spin-polarized edge states in the QSH phase^{1,2,7,13}.

Mechanical deformations have a significant effect on the electronic, quantum transport and optical properties of a material and is used in the silicon electronics industry to boost device performance. For graphene and graphene nanoribbons (GNR) both experiments¹⁴⁻¹⁸ and simulations¹⁹⁻²¹ have confirmed that the band structure can be dramatically altered by strain deformation. For instance, due to the breaking of sublattice symmetry, an uniaxial strain may induce a change of topology of the Fermi line, a merging of two inequivalent Dirac points and a tunable band gap at *K* point^{19,21}. Thus, it may be used to trigger a quantum phase transition from a semi-metal to a semiconductor.

A combination of basic elements of uniaxial strain, SOC, exchange field, and staggered potential leads to a very exotic physics²². For instance, intrinsic SOC is favorable for opening a bulk energy gap around Dirac points^{1,2,13}, while Rashba SOC depresses the gap^{12,23}. Then intrinsic and Rashba SOC make an opposite contribution to the topological phase of QSHE. Besides, Rashba SOC breaks down inversion symmetry and exchange term breaks down time-reversal symmetry (TRS). Thus changing RSO and exchange interaction may lead to a QSH to QAH phase transition^{4,5}, which can be fur-

^{a)}Electronic mail: ginetom@gmail.com

ther manipulated by the application of uniaxial uniform strains²². Although, the quantum conductance of GNRs under uniaxial strain has been previously reported^{24–26}, the spin related terms and staggered potential were not taken into account.

In this paper, we aim to analyse the electronic transport control and the LDOS in GNR with different terminations in the QAHE phase by means of uniform strain deformations and smoothness of staggered potential. The electronic transport can be performed by using a two-terminal device akin to a field electron transistor (FET). QAHE phase can be determined experimentally, by on-site spin-resolved density of states, that can be accessed by spatially scanning tunneling microscope (STM) or by scanning tunneling spectroscopy (STS)^{27–29}.

II. THEORETICAL MODEL

We consider GNR with homogeneous SOC_s, exchange field interaction and staggered potential. The uniaxial strain is included through the introduction of strain-dependent hopping parameters. The Hamiltonian for this system in the real space reads

$$H = H_0 + H_R + H_{ISO} + H_M + H_U, \quad (1)$$

where $H_0 = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$ is the nearest-neighbor π -band tight-binding Hamiltonian. The fermionic operators $c_{i\sigma}^\dagger/c_{i\sigma}$ creates/annihilates an electron at site i with spin σ ($=\uparrow, \downarrow$) and hopping amplitude $t_{ij} = t_i = t_0 e^{-3.37(\delta_i - 1)}$. The unstrained $t_0 \approx 2.7\text{eV}$ ¹⁹ and the deformed lattice distances $\vec{\delta}_i$ are related to the relaxed ones $\vec{\delta}_i^0$ by $\vec{\delta}_i = (1 + \epsilon)\vec{\delta}_i^0$, where the uniaxial strain tensor is given in ref.¹⁹. For simplicity, we set the unstrained C-C distance to be unity. $H_R = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{z} \cdot (\vec{s} \times \vec{\delta}_{ij}) c_{i\sigma}^\dagger c_j$ is the Rashba spin-orbit with interaction with parameter λ_R proportional to the electric field applied perpendicular to the x - y plane of the graphene^{2,10,12}, \vec{s} are the Pauli spin matrices. $H_{ISO} = (2i/\sqrt{3})\lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} c_i^\dagger \vec{s} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) c_j$ is the intrinsic SOC, and the vectors \vec{d}_{ij} points from site j to i , which for the intrinsic SOC with coupling parameter λ_{so} , which connects the next nearest-neighbors through $k^{1,2,13}$. $H_M = M \sum_{i,\sigma,\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger s_{\sigma\sigma'}^z c_{i\sigma'}$ corresponds to the uniform exchange field with strength M , responsible for breaking TRS of the system³⁰ and $H_U = \sum_{i,\sigma} V_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ refers to the staggered sublattice confining potential with $V_i = \pm V_0 [e^{-(y_i/\xi)} + e^{-(y_{N_A(z)} - y_i/\xi)}]$, \pm being for A/B sublattice with value $\pm V_0$ at the edges³¹. The V_i is strongly dependent across the transversal direction, and decays exponentially from the edges with a characteristic width ξ .

To calculate the spin-resolved conductance and the LDOS, we have implemented the standard surface Green's function approach^{32–34}. The GNR device is divided into three regions: left lead, central conductor and

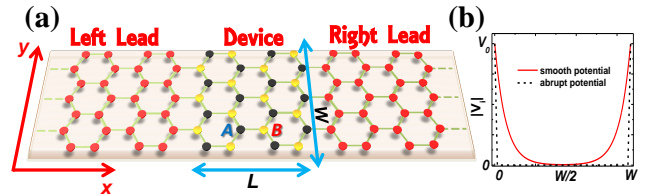


FIG. 1. (a) Schematic picture of a two terminal electronic AGNR device connected to semi-infinite left/right leads, with $L = (3/2N_Z - 1)$ and $W = \sqrt{3}/2(N_A - 1)$. (b) Potential profiles of $|V_i|$ along the transversal direction, for an abrupt confining potential (dashed line) and a smooth confining potential (solid line).

right lead, as schematically shown in Fig. 1 (a) for an AGNR. Notice that N_Z denotes the number of zigzag chains and N_A to the number of dimer lines. The uniaxial strain is applied to either the longitudinal ($\theta=0$) or the transversal ($\theta=\pi/2$), or at any arbitrary angle with respect to the x -axis. The central conductor is the only region under the influence of SOC effects, exchange field and staggered potential; it is also connected to semi-infinite leads by nearest-neighbor hopping. To avoid surface mismatch³⁵, we have considered that the leads are also strained. Therefore, a perfect atomic matching at the interface leads/central conductor is achieved. The Green's function of the device (omitting the spin indices) is then calculated by

$$\mathcal{G}_C^{a/r}(E) = (E \pm i\eta - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1}, \quad (2)$$

where a/r denotes the advanced/retarded Green's function, E is the energy ($\eta \rightarrow 0$) of the injected electron (the Fermi energy at a given doping). H_C stands for the Hamiltonian in the central region and $\Sigma_{L/R}$ are the self-energies that describe the influence of the left/right leads, $\Sigma_l = H_{lC}^\dagger g_l H_{lC}$, where g_l is the Green's function for the $l = L, R$ semi-infinite lead, obtained through an iterative procedure of the tight-binding Hamiltonian³², and H_{lC} couples each lead to the central region. The spin resolved conductance through the system is given by,

$$G_{\sigma\sigma'} = G_0 \text{Tr} [\Gamma_\sigma^L \mathcal{G}_{C,\sigma\sigma'}^r \Gamma_{\sigma'}^R \mathcal{G}_{C,\sigma'\sigma}^a], \quad (3)$$

where the trace runs through the lattice sites at the central conductor, $G_0 = e^2/h$ is the quantum of conductance per spin, and Γ_σ^l are the couplings for the leads, related to the spin-diagonal self-energies by $\Gamma^l = i[\Sigma_l^r - \Sigma_l^a]$ ³².

III. RESULTS

In what follows, we focus on a ZGNR ($N_Z = 26$) with a specific width of 5.4nm and length of 10.93nm (while in absence of strain). Similarly, we have chosen a metallic AGNR, i.e $N_A = 3N - 1$, with N being a positive integer, with approximately same width and length. It is important to mention that wider the ribbon, more conducting channels can be available for higher doping, therefore

the problem becomes more complex for both ZGNR and AGNR. Although, close to the Fermi level there will be the same amount of conducting channels for the pristine metallic nanoribbons. We have also checked the length dependence, and it is indeed *relevant* to the device prototype, as the scattering region, i.e. the region of the device has the effects of SOC, exchange field and staggered potential enhanced, as the injected electron can *feel* such fields in a longer length scale. Although we choose a specific length, the results presented here show a general behavior of such devices.

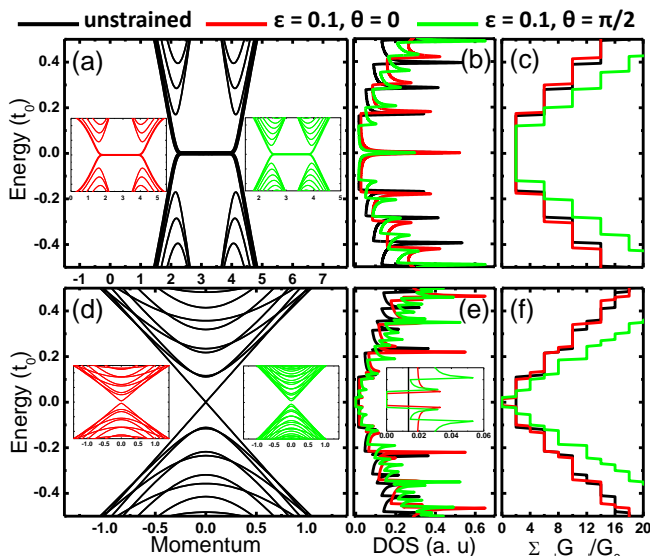


FIG. 2. Electronic structure of unstrained ZGNR with $N_Z = 26$ (a) and AGNR with $N_A = 47$ (d) with only π -band tight-binding Hamiltonian. The insets in panel (a) and (d) depict the correspondent strained GNR with $\varepsilon = 0.1$, and $\theta = 0$ (red) and $\theta = \pi/2$ (green) directions. (b)-(c) and (e)-(f) correspond to the density of states and the total conductance associated with panel (a) and (d), respectively. The inset in (e) shows clearly the vanishing of the density of states close to the Fermi level for the strained AGNR device.

To illustrate the band structure of pristine GNR under uniaxial strains, we assume that except for the first term all other terms in Eq. 1 are set to zero. Fig. 2 (a) and (d), show the electronic structure of unstrained and strained (insets) ZGNR and AGNR with nearest-neighbors hopping, while (b) and (e) plot their correspondent density of states. In contrast, (c) and (f) illustrate the conductance profiles. One can notice the edge states of ZGNR (thick solid line) at the Fermi level for 26-ZGNR, is robust against uniaxial strains, as demonstrated in panel (b) and (c). The ribbon is metallic due to the strain-robust zero-energy flat band, and the conductance turns out to be an integer multiple of the quantum conductance G_0 , as the channels are completely transparent. For high energy doping, there is only a slightly change in the plateaus, and as the ZGNR has two distinct valleys, the conductance increases always by $4G_0$.

In strong contrast, the band structures of the AGNR families (semiconducting or metallic) are highly sensitive to the tensile uniaxial strain. As strain increases, the electrical conductivity may change from an insulator to a conductor or vice-versa. But, the prominent effect is observed near the Fermi level, as strain can induce a band gap in an otherwise metallic AGNRs, or change an existent band gap in semiconducting ribbons in a non-monotonic way²⁵. This band gap can be explained by the strain-induced shifting of the Dirac point, similar to previous works on deformed carbon nanotubes³⁶. For instance, strains drastically change the electronic behavior of metallic 47-AGNR, shown in (d), responsible for an electronic topological transition (ETT) from metallic to semiconductor. It manifest itself for the appearance of a vanishing density of states close to the charge neutrality point (highlighted in the inset of panel (e)). In addition, the transport gap (Δ_g) shows a strain direction dependence, which has been intensively explored by other authors^{25,37-39}, which demonstrated that is robust even across strained junctions or intrinsic defects^{35,40}.

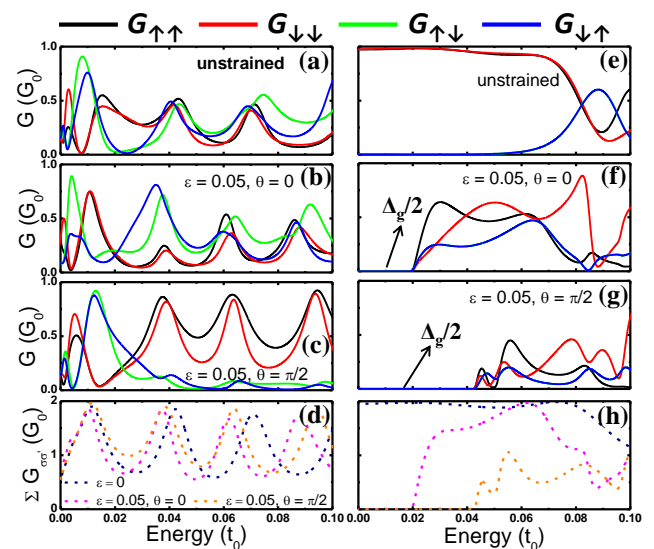


FIG. 3. Effects of strain on spin resolved conductance $G_{\sigma\sigma'}$ of ZGNR with $N_Z=26$ (a)-(c) and AGNR with $N_A=47$ (e)-(g), respectively. Panels (d) and (h) show the total conductance. The parameters used in all panels are $\lambda_R=0.1t_0$, $\lambda_{so}=0$ and $M=0.2t_0$.

To study the conductance characteristics in presence of both Rashba SOC and exchange field, we set the parameters $\lambda_R=0.1t_0$, $M=0.2t_0$, and $\lambda_{so}=0t_0$. Notice that with these parameters, the system is in the QAHE phase⁴. Nevertheless, if the ISO parameter is different from zero, there is an upper-limited value of λ_{so} ^{4,22}, beyond which a new phase characterized by a vanishing Chern Number $C=0$ can take place; this phase is the so-called TRS-broken QSH phase^{4,22,41}. The spin-resolved conductance $G_{\sigma\sigma'}$ is shown in Fig. 3: for (a) unstrained, (b) strained along $\theta = 0$, (c) strained along $\theta = \pi/2$ and (d) the total

conductance $\sum_{\sigma\sigma'} G_{\sigma\sigma'}$ of a ZGNR. Notice that there is a suppression for both the spin conserving and the spin-flip conductance components for either unstrained or strained ZGNR in the energy range considered. However, these backscattering (transmission dips) at certain precise energies at the first plateau are different depending on the strain configuration, and a close inspection shows that conducting channels for non-spin flip and spin-flip conductances oscillate. Depending on the Fermi energy and set parameters, certain conductance components can even be completely suppressed. This suppression is attributed to the appearance of quasi-localized states in the device, which may produce sharp scattering resonances, also known as resonant backscattering which is a general behavior of quasi-1D quantum systems⁴². For higher energies, however, the large number of conducting channels leads to a non-vanishing transmission, as the channels get mixed along the device, and results in the appearance of an interchannel backscattering dominated by interference effects. Therefore, in the QSH phase protected by the TRS, nonmagnetic impurities do not cause backscattering on each boundary, and the spin transport in the edge states is dissipationless at zero temperature. In the QAH phase, however, there is a weak scattering between forward and backward movers, leading to a low-dissipation spin transport. At low energy, this interesting strain-controllable behavior of conducting channel suppression might be efficiently used to filter electrical current of desired spins, in spin filtering devices. In Fig. 3 (d), we show the total conductance, which is nearly robust against strains, specially close to the charge neutrality point, where the deviations due to strain are quite small. In contrast, the conductance of AGNR shows a drastic modification, with the development of a transport gap, which is insensitive to the electron spin that is injected-collected in the device. However, this induced transport gap is dependent upon the direction of the applied strain, with a larger conduction suppression along $\theta = 0$ (red dashed line) with $\Delta_g = 0.04 t_0$, and $\Delta_g = 0.086 t_0$ while along $\theta = \pi/2$, that can be observed in panel (h). Also, the total conductance exhibits different plateaus: around $2G_0$ and approximately G_0 in AGNR without and with strain, respectively, which is one less quantum of conductance available for the electron to be transmitted along the device.

Another remarkable phenomenon is the oscillatory dependence of the spin components of $G_{\sigma\sigma'}$ on the value of λ_R , which is shown in Fig. 4 (a)-(d), where the curves correspond to different topological GNRs and strain setups for $E = 0.05t_0$. The same parameters are used as the Fig. 3, except for M . To reveal the effects of Rashba SOC, we set $M=0$ in the calculation. Then, the system is time-reversal invariant and the conductance components $G_{\uparrow\uparrow} = G_{\downarrow\downarrow}$ and $G_{\uparrow\downarrow} = G_{\downarrow\uparrow}$. This oscillatory behavior is reminiscent of the spin field effect transistor (FET) and has a similar source⁴³, as the spin *precesses* as it propagates in the presence of the Rashba field, acquiring a net phase that is proportional to $\lambda_R L$, where L is

the length of the device. Further inspecting the strain-induced band gap in 47-AGNR in presence of SOC and exchange field interactions, one notices that in Fig. 4 (e) a similar band gap oscillation characteristic as reported in a earlier work²⁵. In the regime of small strain, the band gap shows approximately linear response, with increasing values of strain, however, it starts to oscillate. Further investigation shows that the amplitude and period of the gap-oscillation are tuned by direction of the strain, as shown in Fig. 4 (e). A specific dependence of transport-gap on the angle of the strain is clearly depicted in Fig. 4 (f). Notice that the transport gap is indeed strongly tuned by strain-direction. It equals approximately zero at 0.1π , while it reaches $0.086 t_0$ at 0.5π .

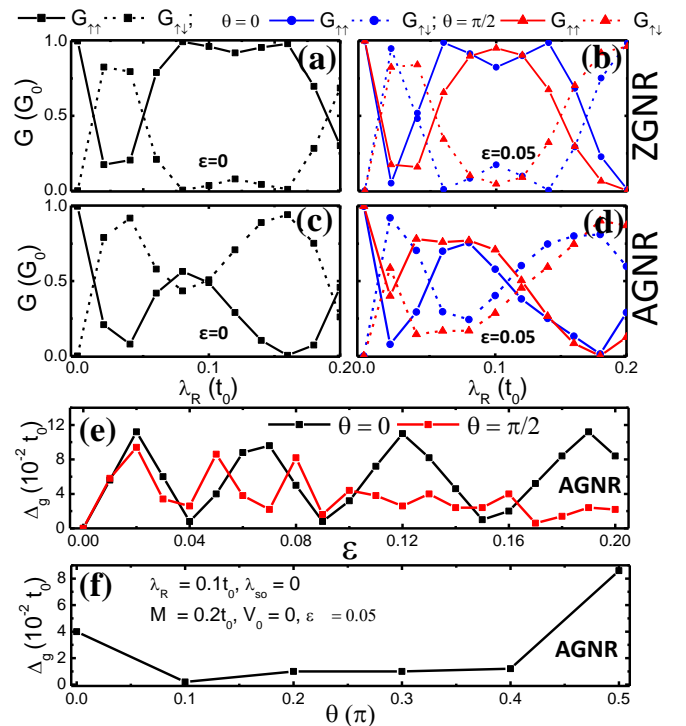


FIG. 4. (a) Conductance $G_{\uparrow\uparrow}$ and $G_{\downarrow\downarrow}$ for 26-ZGNR (a)-(b) and 47-AGNR (c)-(d) as function of λ_R subjected to different configurations of strain. Panels (e) shows the band gap Δ_g of an AGNR as function of strain parameter ϵ for $\theta = 0$ and $\theta = \pi/2$, respectively. (f) Δ_g of an AGNR as function of the direction of strain for fixed $\epsilon=0.05$.

Fig. 5 (a)-(d) show the theoretical STM maps for an incoming electron with Fermi energy of $E=0.05t_0$ for $\lambda_R=0.1t_0$, $\lambda_{so}=0.05t_0$ and $M=0.2t_0$. The panels on the right show the LDOS across the transversal direction. These STM maps can be experimentally accessible by performing a STM or through a STS measurements. The calculation has been performed by using the LDOS, $\rho_{ii} = -\pi^{-1} \text{Im}(\mathcal{G}_C^r(E)_{ii})$, and with the aid of a π -atomic orbital to smooth out the STM maps. It is important to mention that the system is in the QAHE, with a non-zero Chern number⁴. Fig. 5 (a)-(b), show the highly localized edge states present in ZGNR in the QAHE phase.

Breaking of the TRS due to the exchange field, leads to a suppression for the spin down states in (a). Nevertheless, for the spin up there is an emerging edge localization as shown in (b). In contrast, no edge localization is found in AGNR as shown in Fig. 5 (c)-(d). Therefore, the conductance in AGNR is achieved by the bulk conducting channels.

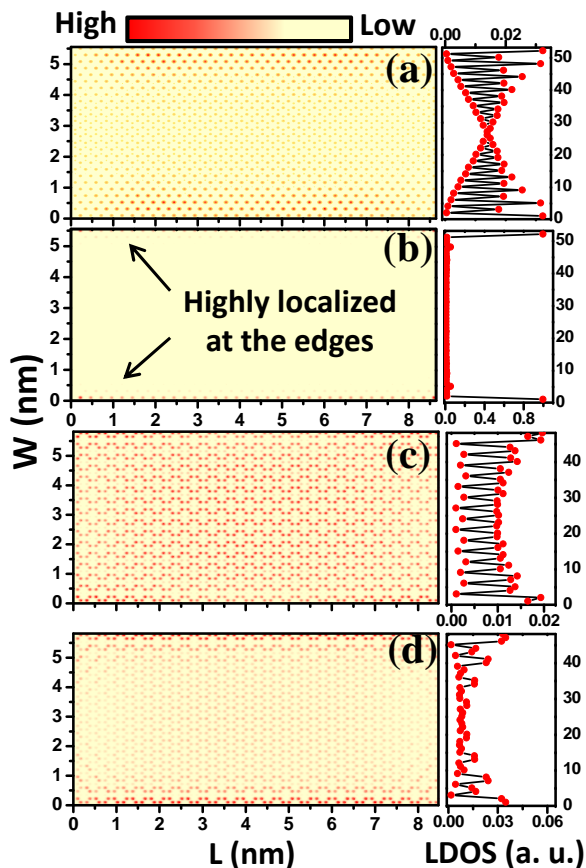


FIG. 5. Calculated STM maps for ZGNR with $N_Z=26$ for the *down* (a) and *up* (b) spins, respectively. STM maps for AGNR with $N_A=47$ for the *down* (c) and *up* (d) spins. The panels on the right show the LDOS along the transversal direction close to the leads contact. The parameters used are $\lambda_R=0.1t_0$, $\lambda_{so}=0.05t_0$ and $M=0.2t_0$.

To further inspect the edge state behavior and its robustness against a smooth staggered sublattice potential, we have calculated the LDOS for different parameter configurations for both 26-ZGNR and 47-AGNR for fixed $E=0.05t_0$, with parameters $\lambda_R=0.1t_0$, $\lambda_{so}=0.05t_0$ and $M=0.2t_0$. In Fig. 6 (a)-(f), we show the LDOS across at exactly the middle of the device, i.e. at a length $L/2$, of the 26-ZGNR while (g)-(l) corresponds to 47-AGNR, for different set of parameters. For 26-ZGNR, we can notice that the LDOS is robust against strain with a slight modification on the amplitudes of the LDOS. However, when a staggered sublattice potential is considered by setting $V_0=6t_0$, smoothness parameter ξ dependent behavior emerges. For instance, by setting $\xi=0.1$ implies

in the suppression of the LDOS in one of the edges for a given spin. Also, there is a clear asymmetry, that can be explained by the A/B sublattice asymmetry - in one side, the edge terminates in A-site, while in the other in B-site. This characteristic makes the staggered potential being an effective barrier - indeed for both spin species when $\xi=4.0$ is set - as the staggered potential can be considered as a non-magnetic impurity. Also, the LDOS amplitudes has some important changes while applying strain with $\varepsilon = 0.05$ along longitudinal ($\theta = 0$) and transversal direction ($\theta = \pi/2$), which can be understood by compression/elongation of the ribbon width that is directly associated to the length smoothness of the staggered potential.

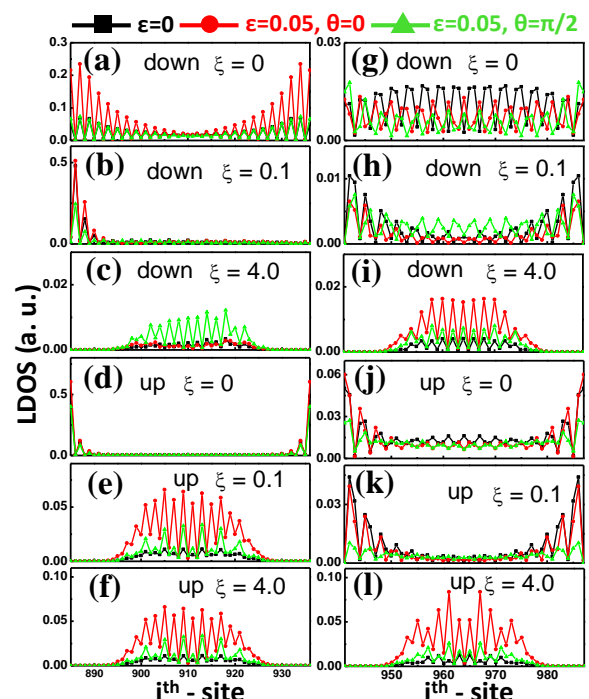


FIG. 6. LDOS along the width for 26-ZGNR (a-f panels) and 47-AGNR (g-l panels) at different smoothness parameters and spin states, with staggered potential $V_0=6t_0$. Here, $\lambda_R=0.1t_0$, $\lambda_{so}=0.05t_0$ and $M=0.2t_0$ have been used. The curves are for different configurations of applied strain in the system.

For the case of an AGNR, away from strain induced transport gap Δ_g (in fact it does not change the strain induced transport gap), we can also observe changes in the LDOS amplitude for different strain configurations. However, some important aspects can be observed by adding a staggered potential: (i) - for $\xi = 0.1$, that would correspond to a less smooth potential (the potential effectively zero in the central region of the ribbon), there is an emerging localization in the AGNR akin to the edge states usually observed in ZGNR³¹, and perfectly symmetric on both edges as it does have same sublattice termination. (ii) for $\xi = 4.0$, that would correspond to

smoother staggered potential, the edge localized LDOS is fully suppressed for both spin species, and the contributing conducting channels are now at the central region. So the transition from an abrupt to a smoother staggered potential might be traced down to a topological phase transition with the quenching of an emerging edge state, therefore the Chern number is expected to vanish in this condition^{4,22}.

IV. CONCLUSIONS

In summary, we have investigated the spin-resolved electronic transport and LDOS of GNR devices under the influence of SOC, exchange field, smooth staggered potential and uniform uniaxial strains. Our results demonstrate that it is possible to achieve a total electron transmission suppression of specific spin specie, which can be further tailored by uniaxial tensile strain on specific directions. Furthermore, by including a graded staggered potential, the following interesting behaviors have been observed in the LDOS maps: (i) selective edge conducting channel suppression for ZGNR for a sharper staggered potential and (ii) emerging of an edge state for AGNR for sharper staggered potential, which is associated to a topological phase transition³¹. These results suggest a possible implementation of a field-effect topological quantum transistor based on strained GNR, thus paving the way for the development of novel topological quantum devices.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank discussions with M. Ezawa, Shu-Shen Li and Z. Qiao. We acknowledge financial support received from CAPES, FAP-DF and CNPq.

¹C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 146802 (2005).

²C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).

³D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, Rev. Mod. Phys. **82**, 1959 (2010).

⁴Z. Qiao, H. Jiang, X. Li, Y. Yao, and Q. Niu, Phys. Rev. B **85**, 115439 (2012).

⁵Z. Qiao, S. A. Yang, W. Feng, W.-K. Tse, J. Ding, Y. Yao, J. Wang, and Q. Niu, Phys. Rev. B **82**, 161414 (2010).

⁶C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, Science **340**, 167 (2013).

⁷M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).

⁸I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).

⁹F. Xia, D. B. Farmer, Y.-m. Lin, and P. Avouris, Nano Letters **10**, 715 (2010).

¹⁰D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, Phys. Rev. B **74**, 155426 (2006).

¹¹M. P. López-Sancho and M. C. Muñoz, Phys. Rev. B **83**, 075406 (2011).

¹²M. Zarea and N. Sandler, Phys. Rev. B **79**, 165442 (2009).

¹³F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 2015 (1988).

¹⁴T. M. G. Mohiuddin, A. Lombardo, R. R. Nair, A. Bonetti, G. Savini, R. Jalil, N. Bonini, D. M. Basko, C. Galiotis, N. Marzari, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and A. C. Ferrari, Phys. Rev. B **79**, 205433 (2009).

¹⁵Z. H. Ni, T. Yu, Y. H. Lu, Y. Y. Wang, Y. P. Feng, and Z. X. Shen, ACS Nano **2**, 2301 (2008).

¹⁶M. Huang, H. Yan, T. F. Heinz, and J. Hone, Nano Letters **10**, 4074 (2010).

¹⁷N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. C. Neto, and M. F. Crommie, Science **329**, 544 (2010).

¹⁸H. Yan, Y. Sun, L. He, J.-C. Nie, and M. H. W. Chan, Phys. Rev. B **85**, 035422 (2012).

¹⁹V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, Phys. Rev. B **80**, 045401 (2009).

²⁰G. Gui, J. Li, and J. Zhong, Phys. Rev. B **78**, 075435 (2008).

²¹F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, Phys. Rev. B **81**, 035411 (2010).

²²G. S. Diniz, M. R. Guassi, and F. Qu, Journal of Applied Physics **114**, 243701 (2013).

²³D. Bercioux and A. De Martino, Phys. Rev. B **81**, 165410 (2010).

²⁴M. Topsakal and S. Ciraci, Phys. Rev. B **81**, 024107 (2010).

²⁵Y. Lu and J. Guo, Nano Research **3**, 189 (2010).

²⁶J. Wang, Z. Liu, and Z. Liu, AIP Advances **2**, 012103 (2012).

²⁷M. Morgenstern, physica status solidi (b) **248**, 2423 (2011).

²⁸E. Stolyarova, K. T. Rim, S. Ryu, J. Maultzsch, P. Kim, L. E. Brus, T. F. Heinz, M. S. Hybertsen, and G. W. Flynn, PNAS **104**, 9209 (2007).

²⁹G. Li, A. Luican-Mayer, D. Abanin, L. Levitov, and E. Y. Andrei, Nat. Commun. **4**, 1744 (2013).

³⁰W.-K. Tse, Z. Qiao, Y. Yao, A. H. MacDonald, and Q. Niu, Phys. Rev. B **83**, 155447 (2011).

³¹H. Li, L. Sheng, and D. Y. Xing, Phys. Rev. Lett. **108**, 196806 (2012).

³²M. B. Nardelli, Phys. Rev. B **60**, 7828 (1999).

³³M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho, and J. Rubio, Journal of Physics F: Metal Physics **15**, 851 (1985).

³⁴M. P. L. Sancho, J. M. L. Sancho, and J. Rubio, Journal of Physics F: Metal Physics **14**, 1205 (1984).

³⁵D. A. Bahamon and V. M. Pereira, Phys. Rev. B **88**, 195416 (2013).

³⁶L. Yang and J. Han, Phys. Rev. Lett. **85**, 154 (2000).

³⁷M. Topsakal, V. M. K. Bagci, and S. Ciraci, Phys. Rev. B **81**, 205437 (2010).

³⁸R. Rasuli, H. Rafii-Tabar, and A. I. zad, Phys. Rev. B **81**, 125409 (2010).

³⁹M. Poetschke, C. G. Rocha, L. E. F. Foa Torres, S. Roche, and G. Cuniberti, Phys. Rev. B **81**, 193404 (2010).

⁴⁰T. Lehmann, D. A. Ryndyk, and G. Cuniberti, Phys. Rev. B **88**, 125420 (2013).

⁴¹Y. Yang, Z. Xu, L. Sheng, B. Wang, D. Y. Xing, and D. N. Sheng, Phys. Rev. Lett. **107**, 066602 (2011).

⁴²R. Gómez-Medina, P. San José, A. García-Martín, M. Lester, M. Nieto-Vesperinas, and J. J. Sáenz, Phys. Rev. Lett. **86**, 4275 (2001).

⁴³S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).

Apêndice C

Zero-field and Time-Reversal-Symmetry-Broken Topological Phase Transitions in Graphene

Marcos R. Guassi,¹ Ginetom S. Diniz,¹ Nancy Sandler,² and Fanyao Qu^{1,3,*}

¹*Institute of Physics, University of Brasilia, Campus Darcy Ribeiro, DF, 70910-900, Brazil*

²*Department of Physics and Astronomy, Ohio University, Athens, Ohio 45701-2979, USA*

³*Department of Physics, University of Texas at Austin, Austin, Texas 78712, USA*

(Dated: July 2, 2015)

We propose a quantum electronic device based on a strained graphene nanoribbon. Mechanical strain, internal exchange field and spin-orbit couplings (SOCs) have been exploited as principle parameters to tune physical properties of the device. We predict a remarkable zero-field topological quantum phase transition between the time-reversal-symmetry broken quantum spin Hall (QSH) and quantum anomalous Hall (QAH) states, which was previously thought to take place only in the presence of finite magnetic field. We illustrate as intrinsic SOC is tuned, how two different helicity edge states located in the opposite edges of the nanoribbon exchange their locations. Our results indicates that the pseudomagnetic field induced by the strain could be coupled to the spin degrees of freedom through the SOC responsible for the stability of a QSH state. The controllability of this zero-field phase transition with strength and direction of the strain is also demonstrated. Our prediction offers a tempting prospect of strain, electric and magnetic manipulation of the QSH effect.

PACS numbers: 73.22.Pr,73.43.Cd,75.50.Pp,61.48.Gh,77.65.Ly

I. INTRODUCTION

New classes of matter, such as quantum spin Hall and quantum anomalous Hall states, have been theoretically predicted and experimentally observed in topological insulators¹⁻⁴, HgTe-CdTe quantum wells⁵⁻⁸, graphene⁹⁻¹² and beyond graphene systems: silicene^{13,14}, two-dimensional germanium^{13,15}, and transition metal dichalcogenides (TMDCs)^{16,17}. Both the QSH and QAH states possess topologically protected edge states at the boundary, where the electron backscattering is forbidden, offering a potential application to electronic devices to transport current without dissipation^{1,5,16,18}. However, the QSH and QAH states are essentially two very different states of matter. The QSH is characterized by a full insulating gap in the bulk and *helical gapless* edge states where opposite spin counter-propagate at each boundary protected by time-reversal symmetry (TRS)^{5-10,13,18}. Whereas in the case of QAH, the helical gapless edge states are replaced by *chiral gapless* edge states where one of the spin channels is suppressed, because of broken TRS^{1,2,19}. Therefore, to realize topological a quantum phase transition (QPT) from the QSH to QAH states, what one needs is to apply a perturbation which can break the TRS²⁰. To reach this goal, an external magnetic field is a potential solution. From the application point of view, however, an internal exchange field (EX) which leads to the majority spin band being completely filled while the minority spin band being empty, provides a more attractive alternative way^{1,11,21,22}. As known, the strain-induced pseudomagnetic field B_S leads to Landau quantization and edges states that circulate in opposite directions^{23,24}. Thus, without breaking TRS, the strain can induce the gap in the bulk and *pseudo-helical* gapless edge states. Therefore, strain, EX and SOC can be used

as versatile tools to trigger topological QPTs^{21,25}. This motivates us to propose a remarkable way in which SOC strength, uniaxial mechanical strain and EX, instead of external magnetic field, are utilized to realize this QPT in graphene nanoribbons (GNRs).

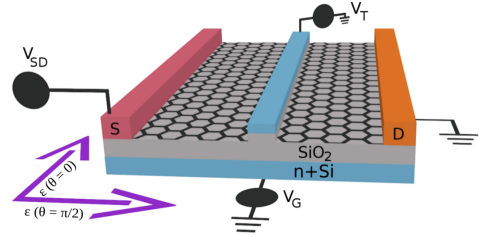


FIG. 1. Schematic representation of a zigzag GNR (ZGNR) device, deposited on SiO_2 . Electrical current is controlled between S and D using (V_{SD}) bias. The uniaxial strain is applied along either directions indicated by the arrows. The Rashba SOC strength could be tuned by top (V_T) and bottom (V_G) voltages.

II. THEORETICAL MODEL

The system is schematically illustrated in Fig. 1 and described by the following tight-binding Hamiltonian,

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} c_i^\dagger c_j + \frac{2i}{\sqrt{3}} \lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} c_i^\dagger \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) c_j \quad (1)$$

$$+ i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger \hat{e}_z \cdot (\vec{\gamma} \times \vec{d}_{ij}) c_j + M \sum_i c_i^\dagger \gamma_z c_i.$$

Here, c_i^\dagger (c_i) is the π -orbital creation (annihilation) operator for an electron on site i , where the spin index on the electron operators has been suppressed, d_{ij} is a lattice vector pointing from site j to site i , $\vec{\gamma}$ is a vector whose components are the Pauli matrices and \hat{e}_z is a unit vector along the z -direction. $\langle \rangle$ ($\langle \langle \rangle \rangle$) runs over all the nearest (next-nearest) neighbor sites. The first term is the nearest neighbors hopping term on the honeycomb lattice with hopping amplitude $t_{i,j}$. The second term denotes the intrinsic SOC with coupling strength λ_{so} ¹⁸, predicted to be rather small in pristine carbon structures due to the low atomic number of carbon atoms. However, recent experiments have demonstrated that it can be enhanced up to three orders of magnitude, which is about 17 meV by the proximity effect to TDMCs²⁶, with no drastic modification of the structure of the graphene, or by adding adatoms²⁷, such as covalently bonding hydrogen atoms to the graphene lattice²⁸. The third one represents the Rashba SOC with strength λ_R ²⁹, whose values ranging from 13-225 meV have been experimentally reported on different setups³⁰⁻³². The last term corresponds to the EX with strength M , that might be achieved by magnetic atom doping in the graphene lattice³³ or due to proximity effect by coupling the graphene to ferromagnetic insulators³⁴, such as a thin film $BiFeO_3$ for which an estimate of the exchange field predicts a value of 70 meV³⁵.

The uniaxial strain may be induced either by an external stress applied to the GNR in a particular direction^{36,37} or by a substrate due to deposition of graphene on top of other materials³⁸⁻⁴⁰. The strain modified distances between carbon atoms are described by $\vec{d}_i^s = (I + \epsilon)\vec{d}_i$, with \vec{d}_i ($i=1, 2, 3$) the unstrained vectors

for nearest-neighbors, I is the identity matrix and ϵ is the strain tensor defined as⁴¹,

$$\epsilon = \epsilon \begin{pmatrix} \cos^2 \theta - \nu \sin^2 \theta & (1 + \nu) \cos \theta \sin \theta \\ (1 + \nu) \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta - \nu \cos^2 \theta \end{pmatrix} \quad (2)$$

where $\nu = 0.165$ is the Poisson's ratio value known for graphite⁴¹, θ is the direction of strain and ϵ is the strain modulus. Then, the hopping term is affected by the strain through $t_{i,j} = t_i = te^{-3.37(d_i^s/a-1)}$, with $t = 2.7\text{eV}$ ⁴¹ being the unstrained hopping parameter and a is the C-C distance. We define the direction as $\theta = 0$ when it is parallel to the zigzag chain and $\theta = \pi/2$, when it is along armchair direction, as shown in Fig. 1. Before proceeding to the GNR cases, we can make an analysis in the *bulk* graphene by performing a Fourier transformation of Eq. 1, resulting in a 4×4 Hamiltonian matrix $H(\vec{k})$. In the low energy limit, we expand the momentum at the vicinity of the Dirac points, $\vec{k} = \eta\mathbf{K} + \vec{q}$, where $\mathbf{K} = (K_x, K_y)$ are the strain-shifted Dirac points obtained by using the condition $\mathbf{K} \cdot (\vec{d}_1^s - \vec{d}_2^s) = \cos^{-1}(t_3^2 - t_1^2 - t_2^2/2t_1t_2)$, with $\eta=\pm 1$ related to the two valleys⁴² and $\vec{q} = (q_x, q_y)$ is a small crystal momentum around $\eta\mathbf{K}$. Notice that the permutation of $d_{i=1,2,3}^s$ and $t_{i=1,2,3}$ also satisfies the previous relation to obtain the strain-shifted Dirac points. We can write the full Hamiltonian in the basis of $\{\Psi_A(\eta\mathbf{K}, \uparrow), \Psi_A(\eta\mathbf{K}, \downarrow), \Psi_B(\eta\mathbf{K}, \uparrow), \Psi_B(\eta\mathbf{K}, \downarrow)\}^\dagger$ as

$$H(\vec{q}) = \begin{pmatrix} t_{so} + MS_z & f + t_R \\ f^* + t_R^* & -t_{so} + MS_z \end{pmatrix}, \quad (3)$$

where f , t_{so} and t_R are the strain dressed hopping, intrinsic- and Rashba- SOCs, respectively given by²¹

$$f = -\{t_1[1 - i(1 + \epsilon_{22})q_y - i\epsilon_{12}q_x]e^{-i2\eta\theta_1} + t_2[1 + i/2(\epsilon_{12} + \sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}))q_x + i/2(\sqrt{3}\epsilon_{21} + 1 + \epsilon_{22})q_y]e^{i\eta\theta_3^+} + t_3[1 + i/2(\epsilon_{12} - \sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}))q_x - i/2(\sqrt{3}\epsilon_{21} - 1 - \epsilon_{22})q_y]e^{i\eta\theta_3^-}\}\mathbf{1}_s, \quad (4)$$

$$t_{so} = \det [I + \epsilon] \eta \lambda_{so} \{2 \sin(2\theta_2) - 4 \sin(\theta_2) \cos(3\theta_1)\} S_z,$$

$$t_R = \lambda_R \{-i(1 + \epsilon_{22})e^{-2i\eta\theta_1} - (\sqrt{3}\eta\epsilon_{21} \sin \theta_2 - i(1 + \epsilon_{22}) \cos \theta_2)e^{i\eta\theta_1}\} S_x + [i\epsilon_{12}e^{-2i\eta\theta_1} + (\sqrt{3}\eta(1 + \epsilon_{11}) \sin \theta_2 - i\epsilon_{12} \cos \theta_2)e^{i\eta\theta_1}\} S_y\}.$$

Here, ϵ_{ij} are the matrix elements of the strain tensor ϵ , $\mathbf{1}_s$ is the identity matrix, S_z is the Pauli spin matrix in the real spin subspace, $\det [I + \epsilon] = (1 - \epsilon_{11})(1 - \epsilon_{22}) - \epsilon_{21}\epsilon_{12}$, $\theta_1 = 1/2 [\epsilon_{12}K_x + (1 + \epsilon_{22})K_y]$, $\theta_2 = \sqrt{3}/2 [(1 + \epsilon_{11})K_x + \epsilon_{21}K_y]$ and $\theta_3^\pm = 1/2 [(\epsilon_{12} \pm \sqrt{3}(1 + \epsilon_{11}))K_x \pm (\sqrt{3}\epsilon_{21} \pm 1 \pm \epsilon_{22})K_y]$. In a special case in which there is vanishing strain, i.e.,

$\epsilon \rightarrow 0$ and $(K_x, K_y) = (\eta 4\pi/3\sqrt{3}, 0)$, with a set as unity for simplicity, our expression of the Hamiltonian reduces to the well-known and expected result, as obtained in Ref. 11. The band gap at the shifted Dirac points, is then given by:

$$\Delta_K = \Delta_{K'} = |-2\phi_{so} + \sqrt{M^2 + |\phi_{R1}|^2} + \sqrt{M^2 + |\phi_{R2}|^2}|, \quad (5)$$

where we have defined: $\phi_{so} = \det [I + \epsilon] \lambda_{so} \{2 \sin(2\theta_2) - 4 \sin(\theta_2) \cos(3\theta_1)\}$, $\phi_{R1} = R_1 - iR_2$ and $\phi_{R2} = R_1^* - iR_2^*$, with $R_1 = \lambda_R[-i(1 + \epsilon_{22})e^{-2i\eta\theta_1} - (\sqrt{3}\eta\epsilon_{21} \sin \theta_2 - i(1 + \epsilon_{22}) \cos \theta_2)e^{i\eta\theta_1}]$ and $R_2 = \lambda_R[i\epsilon_{12}e^{-2i\eta\theta_1} + (\sqrt{3}\eta(1 + \epsilon_{11}) \sin \theta_2 - i\epsilon_{12} \cos \theta_2)e^{i\eta\theta_1}]$. For systems with mirror symmetry, λ_R becomes zero. Then we obtain $\Delta_K = \Delta_{K'} = 2|-\phi_{so} + M|$, from which the critical exchange field $M_C^{(s)} = \phi_{so}$ can be straightforwardly derived.

To identify the topological properties of the Dirac gap and study the origin of QAH, we have also calculated the Berry curvature $\Omega_{xy}^n(k_x, k_y)$ of the n th bands using the Kubo formula

$$\Omega_{xy}^n(k_x, k_y) = - \sum_{n' \neq n} \frac{2Im \langle \Psi_{nk} | v_x | \Psi_{n'k} \rangle \langle \Psi_{n'k} | v_y | \Psi_{nk} \rangle}{(\omega_{n'} - \omega_n)^2}, \quad (6)$$

where $\omega_n = E_n/\hbar$ with E_n the energy eigenvalue of the n th band and $v_{x(y)} = \hbar^{-1} \partial H / \partial k_{x(y)}$ is the Fermi velocity operator. The Chern number \mathcal{C} can be calculated by⁴³

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \sum_n \int_{BZ} d^2k \Omega_{xy}^n, \quad (7)$$

where the summation is taken over the occupied states below the Fermi level and the integration is done over the first Brillouin zone. As the Berry curvatures are highly peaked around the Dirac points \mathbf{K} and \mathbf{K}' ⁴⁴, then a low energy approximation can be used in the calculation of the Chern number^{21,45}. In the low energy, we calculate the Chern number using the following equation,

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \sum_{K, K'} \sum_{n=1,2} \int_{-\infty}^{\infty} dq_x dq_y \Omega_{xy}^n(q_x, q_y). \quad (8)$$

In the above integral, a momentum cutoff is set around each valley for which the Chern number converges.

III. RESULTS

Fig. 2 (a) plots energy band-gap Δ between the conduction and valence bands of graphene as a function of EX for different values of λ_R/λ_{so} . In the regime of λ_{so} comparable to λ_R ($\lambda_R < 2\sqrt{3}\lambda_{so}$) and EX, the band gaps at either K or K' for unstrained bulk graphene can be well described by $\Delta_K = \Delta_{K'} = |\sqrt{M^2 + 9\lambda_R^2} + M - 6\sqrt{3}\lambda_{so}|$ ¹¹. Hence, for a given λ_R , the gap first decreases with increasing EX and then closes when EX reaches a critical value, $M_C = \frac{\sqrt{3}\lambda_{so}}{4} \left[12 - \left(\frac{\lambda_R}{\lambda_{so}} \right)^2 \right]$, as shown by circles in Fig. 2 (a)-(b). After that, as EX is further increased, the gap reopens, accompanied by a change of the Chern number \mathcal{C} as demonstrated by the color-change of the correspondent line^{3,11,19,21,35}. Therefore, a QPT between QSH to QAH occurs at a critical exchange field M_C . After thoroughly understanding the fate of the TRS-broken QSH phase in zero-strain graphene, we

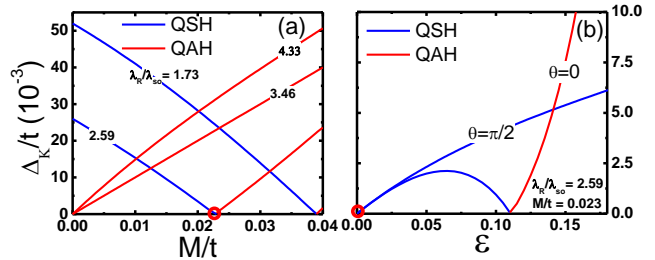


FIG. 2. (a) Energy band gap Δ_K ($\Delta_K = \Delta_{K'}$) as a function of exchange field M for graphene with four different values of Rashba SOC strength λ_R/λ_{so} for $\epsilon=0$ and (b) Δ_K versus uniaxial strain ϵ applied along $\theta = 0$ and $\theta = \pi/2$ for a strained graphene with $\lambda_R/\lambda_{so} = 2.59$ and $M/t = 0.023$. QSH (blue lines) and QAH (red lines) phases are characterized by Chern numbers $\mathcal{C}=0$ and 2 , respectively. The circles indicate the critical point at which the phase transition occurs.

move our attention to strained graphene. We found that the band gap as well as the critical point are strongly affected by the applied mechanical strain field. For instance, in the absence of the Rashba SOC, the critical value M_C^s of strained graphene is given by $M_C^{(s)} = \phi_{so}$, where ϕ_{so} is the strain-dressed intrinsic SOC strength. In comparison with M_C , we notice that the critical point is shifted by strain, as shown in Fig. 2 (b). Notice that at $M = M_C$, highlighted by the red circle, is no longer the value for the critical point for strained graphene, because no phase transition occurs at this point. Although the strain widens the bulk gap monotonically in the case of strain along the direction $\theta = \pi/2$, the closing and reopening phenomenon; and consequently a phase transition between QSH and QAH; is found for the strain applied along $\theta = 0$ direction.

If the mirror symmetry about the graphene-plane is preserved, then the intrinsic SOC which opens gaps around Dirac points is the only allowed spin dependent term in the Hamiltonian. Otherwise, if the mirror symmetry is broken, then a Rashba term is allowed, which mixes spin-up and spin-down states around the band crossing points. Besides, Rashba SOC pushes the valence band up and the conduction band down, reducing the bulk gap. Following Ref. 19, we present our results for the ZGNR in Fig. 3, that shows the effects of intrinsic- and Rashba- SOCs and EX upon the band structure of the ZGNR. Notice in Fig. 3 (a) that the interplay between intrinsic- and Rashba- SOCs, partially lifts the degeneracies of both bulk- and edge- state, breaks particle-hole symmetry and pushes the valence band up. In turn, the presence of the EX breaks the TRS and lifts the Kramer's degeneracy of electron spin, pushing the spin-up (spin-down) bands upward (downward), as shown in Fig. 3 (b). In strong contrast with Fig. 3 (b), the presence of Rashba SOC and EX induces coupling between edge and bulk states which significantly modifies the group velocity of edge states, as shown in Fig. 3 (c). The combined effects of intrinsic, Rashba SOCs and EX

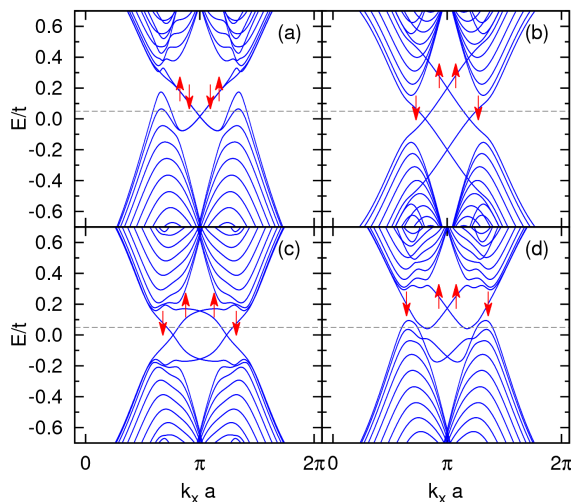


FIG. 3. Band structure of ZGNR with intrinsic- and Rashba-SOC terms (a), intrinsic SOC and EX (b), Rashba SOC and EX (c), and intrinsic- and Rashba- SOC terms and EX (d). The Fermi level is assumed to be above zero, as indicated by the dashed horizontal line, and thus has four intersections with the conduction bands. This gives rise to four edge currents on the ribbon edges. The following parameters are used: (a) $\lambda_{so} = 0.06t$, $\lambda_R = 0.20t$; (b) $\lambda_{so} = 0.06t$, $M = 0.20t$; (c) $\lambda_R = 0.20t$, $M = 0.20t$; (d) $\lambda_{so} = 0.06t$, $\lambda_R = 0.20t$ and $M = 0.20t$ for the ZGNR with width $W = 48$. The arrows represent the major components of spin.

are shown in Fig. 3 (d), which are in agreement with results reported in Ref. 19 (see for instance Fig 2). Notice that the Fermi level enters into the valence band and the energies of some edge modes are smaller than the valence band maximum.

The intrinsic SOC can be strongly enhanced by impurity (adatom) coverage on the surface of graphene, that produces strong lattice distortions⁴⁶. In this context, one may ask how the quantum phase transition in a graphene ribbon changes as the intrinsic SOC is tuned. Following the discussion of Ref. 19, the effects of strain fields are shown in Fig. 4 (with a similar representation to the one introduced in Ref. 19) with parameters $W=48$, $\lambda_R = 0.20t$, $M = 0.20t$ and uniaxial strain $\varepsilon = 0.10$ along $\theta = 0$. The left panel of Fig. 4 shows the effects of intrinsic SOC on the energy spectrum of a ZGNR. The Fermi level is set at $E_F = 0.05t$. The corresponding edge state probability distributions across the width of the nanoribbon, for each of the four edge states indicated by A, B, C and D are shown in the middle panel. Schematic diagrams of charge current distributions on the edges of ZGNR are illustrated in the right panel. To determine the edge current direction, $I = -|e|v_x$ (indicated by the arrow), the electron group velocity $v_x = \partial E(k)/\partial k_x$ has been calculated¹⁹. In the case of weak intrinsic SOC, at the ribbon boundaries, the edge states pair A and D would form a single handed loop (in the sense that

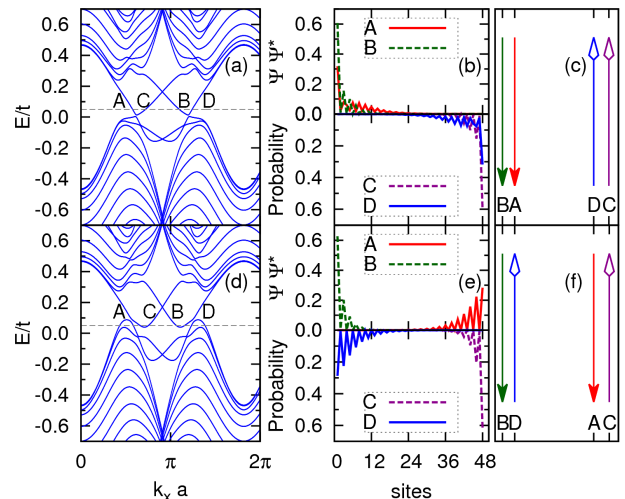


FIG. 4. Energy spectrum of ZGNR with $W = 48$, $\lambda_R = 0.20t$, $M = 0.20t$, $\varepsilon = 0.10$ and $\theta = 0$, for (a) $\lambda_{so} = 0.035t$ and (d) $\lambda_{so} = 0.055t$, respectively. The Fermi level $E = 0.05t$ corresponds to four different edge states, as indicated by A, B, C, and D. The corresponding probability distributions $|\psi|^2$ across the width of the ribbon, and diagrams of charge current distributions are shown in the middle (b)-(e) and right panels (c)-(f), respectively. The arrows indicate the current flux.

the turning point is at infinity along the ribbon length), meanwhile there is the formation of another loop with opposite handedness, which is formed by the edge states pair B and C. Both edge states A and B, consequently I_A and I_B , are located at the same edge, as indicated in Fig. 4 (c). Thus the chirality of the current loop due to the A and D edge states would produce a Chern number of ($\mathcal{C}_1 = \pm 1$) which is the same as that of current loop owing to B and C edge states. Since the system is akin to two integer quantum Hall subsystems, its Chern number \mathcal{C} is equal to $(\mathcal{C}_1 = +1) \oplus (\mathcal{C}_2 = +1)$, i.e., $\mathcal{C} = (+1) + (+1) = 2$ or $(\mathcal{C}_1 = -1) \oplus (\mathcal{C}_2 = -1)$, with $\mathcal{C} = (-1) + (-1) = -2$. Therefore, the ZGNR with a weak intrinsic SOC is in the QAH phase. For a ZGNR with strong intrinsic SOC, however, one can notice that the edge states pair A and C are located on the same edge, while the B and D edge states are in the opposite edge, as shown in Fig. 4 (f). Due to handedness of the current loop of edge states A and D, the Chern number would give a contribution of ($\mathcal{C}_1 = -1$), and the pair B and C, which has an opposite handedness, produces a Chern number of ($\mathcal{C}_2 = +1$). Since the ZGNR is composed of these two integer quantum Hall subsystems, its Chern number (\mathcal{C}) is obtained by $(\mathcal{C}_1 = +1) \oplus (\mathcal{C}_2 = -1)$, i.e., $\mathcal{C} = (+1) + (-1) = 0$. Therefore, the GNR is in the TRS broken QSH phase.

To understand the QPT and show intuitively how it takes place, we follow Ref. 19 and introduce the average value of the position $\langle y \rangle_n$, as a parameter to label the angular momentum of the current. It is defined as: $\langle y \rangle_n = \sum_i y_i |\varphi_n(y_i)|^2$, where n represents the edge states

at the Fermi level and i is the site index along the width of ribbon. We chose the origin of y -axis at the lower boundary of the ribbon. Fig. 5 (a) shows the average values $\langle y \rangle_n$ of edge states as a function of λ_{so} in the ribbon with the width $W = 48$, $\lambda_R = 0.20t$, $M = 0.20t$, $\varepsilon = 0.10$ and $\theta = 0$, where $n = A, B, C$ and D , respectively. The direction and magnitude of a group velocity are indicated by the direction and length of an arrow, respectively. When the intrinsic SOC is vanishing, the Rashba SOC and EX are dominant, A and B are on the same boundary of the ribbon, and thus both $\langle y \rangle_A$ and $\langle y \rangle_B \rightarrow 0$. So do C and D, but are localized at the other edge of the ribbon, thus $\langle y \rangle_C$ and $\langle y \rangle_D \rightarrow W$. The system is in the QAH phase. When the λ_{so} increases, however, three different topological phases are found. In the regime of small λ_{so} ($0.03t < \lambda_{so} < 0.04t$), the positions of the edge states are only very slightly shifted. With increasing λ_{so} , the states A and D become delocalized, swiftly moving to the center of the ribbon from different boundaries owing to the edge- and bulk- states coupling. In the regime of large λ_{so} ($\lambda_{so} > 0.05$), the locations of state A and D have been exchanged. Since the group velocity of state A is opposite to D, the exchange of their locations results in a change of chirality. Therefore, the system is in the QSH phase. It is worthy to point out that owing to the finite-size (finite-width) effect, the edge states are not exactly localized at the two boundaries. Remarkably, a similar behavior is also presented in Fig. 5 (b) in which $\langle y \rangle$ versus strain is plotted. At first glance, it seems to be hard to understand this exotic behavior. But, recalling the discussion of phase transition in bulk graphene, one can logically speculate that this is a manifestation of strain induced QPT between QSH and QAH states in the ZGNR. This strain induced QSH state shares many emergent properties similar to the usual zero-strain QSH effect. We notice that with realistic values for uniaxial strain the critical value for the spin-orbit coupling is reduced by a factor between 10-20%. Thus, the combination of strain and appropriate substrates, show a promising direction to realize the phase transition in current settings.

To seek the controllable topological QPTs induced either by strain, EX; or intrinsic SOC, or any of their combinations, the phase diagrams in which the phase is characterized by the difference in the average value of position $\langle y \rangle_C$ and $\langle y \rangle_A$, defined as $\langle y \rangle_{AC} = \langle y \rangle_C - \langle y \rangle_A$, are constructed, as shown in Fig. 6. Fig. 6 (a) and (b) plot the phase diagrams of ε versus λ_{so} for $\theta = 0$ and $\theta = \pi/2$, respectively. It is trivial to notice that if $\langle y \rangle_{AC} \cong 0$, the edge states A and C are localized at the same boundary, corresponding to a QSH phase, as indicated by blue. Otherwise, if $\langle y \rangle_{AC} \cong W$, the system is in the QAH phase, as marked by red. The other values of $\langle y \rangle_{AC}$ correspond to delocalized state A. Notice that both strength and direction of the strain change considerably the phase diagram. In the regime of small intrinsic SOC, the GNR lies in the QAH state. The critical λ_{so}^c at which topological QPT occurs depends strongly on both the strength and direction of the strain. The larger the strain, the

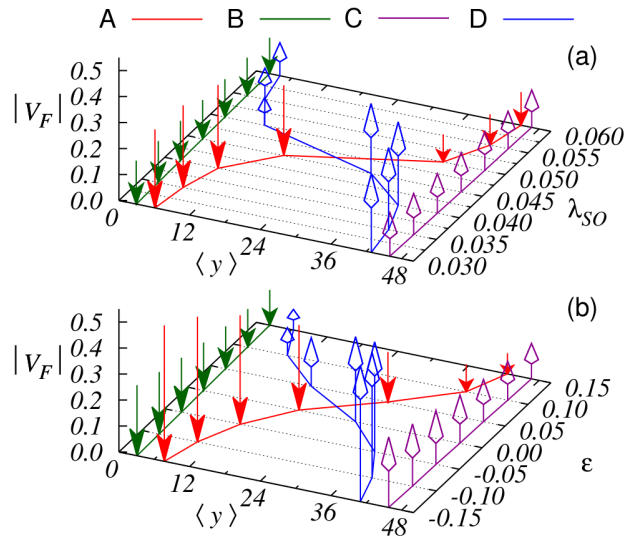


FIG. 5. (a) Average values $\langle y \rangle$ of edge states versus λ_{so} in ZGNR, subjected to a strain with $\varepsilon = 0.10$ and $\theta = 0$. (b) $\langle y \rangle$ as a function of strain with $\theta = 0$ for $\lambda_{so} = 0.05t$. $W = 48$, $\lambda_R = 0.20t$ and $M = 0.20t$ are used in the computations. Vertical axis is the Fermi velocity V_F modulus. The arrows point in the directions of band velocities and their lengths present the magnitudes of V_F .

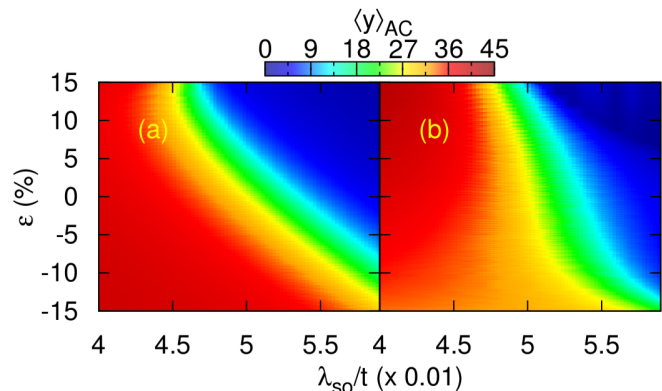


FIG. 6. Phase diagrams (strain vs intrinsic SOC) of a ribbon with $W = 48$, $\lambda_R = 0.20t$, $M = 0.20t$, characterized by a difference in the average value of position between mode A and C, defined as $\langle y \rangle_{AC} = \langle y \rangle_C - \langle y \rangle_A$, for $\theta = 0$ (a) and $\theta = \pi/2$ (b), respectively.

smaller the λ_{so}^c is required to reach the QSH state. In addition, the strain drives the GNR from the QAH into QSH states for a given λ_{so}^c . It is also noted that in the case of $\theta = \pi/2$, when the λ_{so}^c changes in the boundary between the QSH and QAH states, the correspondent critical value of ε varies faster than that for $\theta = 0$.

The underlying physics of the strain tuned phase diagram is as follows. It is well established that uniaxial mechanical strain does not break the sublattice symmetry, but rather deforms the Brillouin zone, such as, the Dirac cones located in graphene at points K (K') being

shifted in the opposite directions^{41,47}. This is reminiscent of the effect of pseudomagnetic field B_S induced by the strain on charge carriers, i.e., accumulating charge in place where the B_S is maximum. Because the B_S does not break TRS, the strain will not have any direct effect on the spin degrees of freedom of the electrons, even though it couples with sublattice pseudospin. Therefore, at first glance, it seems that the strain only induces a renormalization of the energy scales. Actually, *this is not true* for graphene with SOC. Since SOC couples the spin and the momentum degrees of freedom of the carriers, the B_S could affect real spin of an electron through the SOC. Therefore, a strong pseudomagnetic field should lead to Landau quantization and a QSH state due to opposite signs of B_S for electrons in valleys K (K'). In this context, the strain enhances the carrier localization and pushes the edge states much closer to the boundaries of the ribbon. Hence, the QSH state could be stabilized by the strain. Finally, it is worthwhile to argue that since inter-valley scattering requires a large momentum transfer⁴⁸, it is strongly suppressed in wide ZGNRs in which we are interested.

IV. CONCLUSION

In summary, a zero-field topological QPT between QSH and QAH states in GNRs is reported in the presence of internal EX, uniaxial strain, intrinsic and Rashba SOC. Both strength and direction of the strain can be exploited to tune the λ_{so}^c at which the phase transition takes place. The pseudomagnetic field induced by the strain couples the spin degrees of freedom through SOC, enhances the carrier localization in edge states, stabilizes and even leads to formation of a QSH state. Rashba-SOC and EX, on the other hand, break inversion- and TRS of the graphene, respectively. In the regime of small SOC and EX, they only induce an instability of the QSH state. The large Rashba-SOC or EX, however, can even lead the QSH state to be destroyed, producing the QAH states. Our results offer a tempting prospect of strain, electric and magnetic manipulation of the QSH effect, with potential application in topological quantum devices within the context of dissipationless electronics.

V. ACKNOWLEDGMENTS

We thank fruitful discussions with M. Ezawa and Z. Qiao. We acknowledge financial support received from CAPES, FAP-DF and CNPq (MRG, GSD and F. Qu) and NSF MWN/CIAM grant DMR-1108285 (NS).

Appendix A: Equation of motion of an electron in strained graphene

1. Strained graphene

In the pristine (unstrained) graphene, as usual, the Hamiltonian which describes the hopping of an electron in a site A_i to its nearest-neighbors in B_j with probability $t_{i,j}$ is given by,

$$H_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} (|A_i\rangle \langle B_j| + |B_j\rangle \langle A_i|) \quad (\text{A1})$$

where the sum is made about the three nearest neighbors. For convenience, the site energy which is on Fermi level is set to zero. The vectors connecting a type A to type B sites are defined by $\vec{d}_1 = -a\hat{y}$, $\vec{d}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}a \left(\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \right)$ and $\vec{d}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}a \left(-\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{y} \right)$, as shown in Fig. 7(a). We expand single particle wave functions as follows

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \left[\Psi_A(\vec{k}) |A_n\rangle + \Psi_B(\vec{k}) |B_n\rangle \right]. \quad (\text{A2})$$

where \vec{R}_n is the position of a site- n , \vec{k} is electron momentum, $\Psi_A(\vec{k})$ and $\Psi_B(\vec{k})$ are coefficients. Utilizing $\vec{R}_{n'} - \vec{R}_n = \vec{d}_l$, Schrödinger's equation can be cast into two coupled equations:

$$E\Psi_A(\vec{k}) = f \cdot \Psi_B(\vec{k})$$

and

$$E\Psi_B(\vec{k}) = f^* \cdot \Psi_A(\vec{k}), \quad (\text{A3})$$

where the geometric form factor is given by

$$f = - \sum_l^3 t_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{d}_l} = -t \left[e^{-ik_y a} + 2\cos\left(\frac{k_x a \sqrt{3}}{2}\right) e^{ik_y a/2} \right].$$

Based on above calculation, one can straight forwardly derive the matrix form of the Schrödinger's equation:

$$E \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}) \\ \Psi_B(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & f \\ f^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}) \\ \Psi_B(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (\text{A4})$$

In a strained graphene, the distance vectors are modified by uniaxial strain as $\vec{d}_l^s = (I + \epsilon)\vec{d}_l^{A1}$, where $l = 1, 2, 3$. They are given by

$$\begin{aligned} \vec{d}_1^s &= -a\epsilon_{12}\hat{x} - (1 + \epsilon_{22})a\hat{y} \\ \vec{d}_2^s &= \frac{a}{2} \left[(1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right] \hat{x} + \frac{a}{2} \left[\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right] \hat{y} \\ \vec{d}_3^s &= \frac{a}{2} \left[-(1 + \epsilon_{11})\sqrt{3} + \epsilon_{12} \right] \hat{x} + \frac{a}{2} \left[-\sqrt{3}\epsilon_{21} + (1 + \epsilon_{22}) \right] \hat{y}. \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

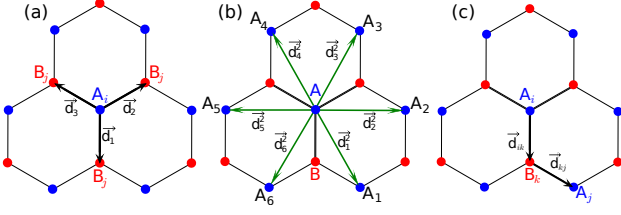


FIG. 7. Schematic diagrams of the nearest (a) and next nearest neighbours (b), and interatomic distance vectors (c) in a graphene.

Besides, the three hopping parameters t_l are also altered by the strain, as discussed in the main text. They are determined by $t_l = te^{-3.37(d_l^s/a-1)}$. Then the geometric factor f_s of the strained graphene is altered which can be calculated by $f_s = \sum_l^3 t_l e^{i\vec{k}\cdot\vec{d}_l^s}$. Taking into account the strain dressed hopping parameters and form factor, the correspondent equations of motion of an electron in the strained graphene can be obtained through substituting f in Eq. (A3) by f_s .

$$f_s = -t_1 e^{[-i\epsilon_{12}k_x a - i(1+\epsilon_{22})k_y a]} - t_2 e^{i\{[\sqrt{3}(1+\epsilon_{11})+\epsilon_{12}]k_x + [(1+\epsilon_{22})+\sqrt{3}\epsilon_{21}]k_y\} \frac{a}{2}} - t_3 e^{i\{[-\sqrt{3}(1+\epsilon_{11})+\epsilon_{12}]k_x + [(1+\epsilon_{22})-\sqrt{3}\epsilon_{21}]k_y\} \frac{a}{2}} \quad (\text{A6})$$

2. Strained graphene with intrinsic SOC

The pristine graphene with intrinsic SOC can be well described by the following Hamiltonian:

$$H = H_0 + H_{so}. \quad (\text{A7})$$

The second term in the Eq. (A7) is intrinsic SOC Hamiltonian. It can be evaluated by a summation over the next nearest-neighbors, as follows,

$$H_{so} = \frac{2i}{\sqrt{3}} \lambda_{so} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{\sigma, \sigma'} |A_i, \sigma\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \langle A_j, \sigma' | + h.c., \quad (\text{A8})$$

where λ_{so} is intrinsic SOC strength, $\langle\langle \rangle\rangle$ runs over all the next-nearest neighbor sites as shown in Fig. 7(b) and $\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}$ is a product of interatomic distances which represents an electron hopping from a i -site to a j -site through a k -site atom, as shown in Fig.7(c). Performing the summation and other algebra calculations, one derives the equations of motion as,

$$E\Psi_A(\vec{k}, \sigma) = f \cdot \Psi_B(\vec{k}, \sigma) - \lambda_{so} \cdot f_{so} \cdot \chi \Psi_A(\vec{k}, \sigma),$$

and

$$E\Psi_B(\vec{k}, \sigma) = f^* \cdot \Psi_A(\vec{k}, \sigma) + \lambda_{so} \cdot f_{so} \cdot \chi \Psi_B(\vec{k}, \sigma) \quad (\text{A9})$$

where

$$f_{so} = 4 \sin\left(\frac{k_x \sqrt{3}}{2} a\right) \left\{ \cos\left(k_y \frac{3}{2} a\right) - \cos\left(\frac{k_x \sqrt{3}}{2} a\right) \right\}$$

and $\chi = +1$, for $\sigma = \uparrow$ or $\chi = -1$, for $\sigma = \downarrow$. One can straightforwardly derive the matrix form of the Schrödinger's equation:

$$E \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_A(\vec{k}, \downarrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \downarrow) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\varphi_{so} & 0 & f & 0 \\ 0 & \varphi_{so} & 0 & f \\ f^* & 0 & \varphi_{so} & 0 \\ 0 & f^* & 0 & -\varphi_{so} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_A(\vec{k}, \downarrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \downarrow) \end{pmatrix} \quad (\text{A10})$$

where $\varphi_{so} = \lambda_{so} \cdot f_{so}$.

In strained graphene, since $C-C$ atomic distances are altered by applied strain, so does the product $\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}$. Taking into account the strain dressed interatomic distances and hopping parameters, the equations of motion of an electron in the strained graphene with intrinsic SOC become

$$E\Psi_A(\vec{k}, \sigma) = f_s \cdot \Psi_B(\vec{k}, \sigma) - \lambda_{so} \cdot f_{sso} \cdot \chi \Psi_A(\vec{k}, \sigma)$$

and

$$E\Psi_B(\vec{k}, \sigma) = f_s^* \cdot \Psi_A(\vec{k}, \sigma) + \lambda_{so} \cdot f_{sso} \cdot \chi \Psi_B(\vec{k}, \sigma) \quad (\text{A11})$$

where the form factor of the strained graphene with intrinsic SOC is governed by

$$f_{sso} = i \cdot \det(I + \epsilon) \sum_{l=1}^3 \xi(l) \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{d}_l} - e^{-i\vec{k}\cdot\vec{d}_l} \right), \quad (\text{A12})$$

with the pseudo-spin $\xi(l) = +1$, when $l = 1, 3$ and $\xi(l) = -1$ for $l = 2$.

3. Strained graphene with Rashba SOC

The breakdown of mirror symmetry induces the Rashba spin-orbit coupling. The Hamiltonian of a pristine graphene with Rashba SOC is well described by,

$$H = H_0 + H_R. \quad (\text{A13})$$

The second term in the Eq. (A13) is Rashba SOC Hamiltonian. It can be evaluated by the following expression

$$H_R = i \sum_{(i,j)} \sum_{\sigma\sigma'} [|A_i, \sigma\rangle (\vec{u}_{ij} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_j, \sigma' | + h.c.], \quad (\text{A14})$$

where $\vec{u}_{ij} = -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{ij}$ and \hat{z} is unit vector along z-axis. Then the correspondent equations of motion turn out to be:

$$E\Psi_A(\vec{k}, \uparrow) = f \cdot \Psi_B(\vec{k}, \uparrow) - \lambda_R \cdot f_{R1} \cdot \Psi_B(\vec{k}, \downarrow)$$

and

$$E\Psi_B(\vec{k}, \uparrow) = f^* \cdot \Psi_A(\vec{k}, \uparrow) + \lambda_R \cdot f_{R2} \cdot \Psi_A(\vec{k}, \downarrow) \quad (\text{A15})$$

where the form factors of the graphene with Rashba SOC are defined by

$$f_{R1} = i \left\{ e^{-ik_y 3a/2} + 2\cos\left(k_x \frac{a_0}{2} - \frac{2\pi}{3}\right) \right\} e^{ik_y \frac{a}{2}} \quad (\text{A16})$$

$$f_{R2} = i \left\{ e^{ik_y 3a/2} + 2\cos\left(k_x \frac{a_0}{2} + \frac{2\pi}{3}\right) \right\} e^{-ik_y \frac{a}{2}}. \quad (\text{A17})$$

In analogy, we can deduce another set of coupled equations for $\Psi_A(\vec{k}, \downarrow)$ and $\Psi_B(\vec{k}, \downarrow)$. After that, the matrix form of the Schrödinger's equation can be written as

$$E \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_A(\vec{k}, \downarrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \downarrow) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & f & \varphi_{R1} \\ 0 & 0 & \varphi_{R2}^* & f \\ f^* & \varphi_{R2} & 0 & 0 \\ \varphi_{R1}^* & f^* & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_A(\vec{k}, \downarrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \downarrow) \end{pmatrix} \quad (\text{A18})$$

where was made $\varphi_{R1} = \lambda_R \cdot f_{R1}$ and $\varphi_{R2} = \lambda_{R2} \cdot f_{R2}$.

In the strained graphene with Rashba SOC, the corresponding Schrödinger's equation can be obtained by making the following substitutions: $f \rightarrow f_s$, $f_{R1} \rightarrow f_{sR1}$ and $f_{R2} \rightarrow f_{sR2}$. Here the form factors of the strained graphene with Rashba SOC are defined by

$$f_{sR1} = -\frac{i}{a} \cdot \sum_{l=1}^3 \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^s} (d_{ly}^s + id_{lx}^s) \right],$$

$$f_{sR2} = \frac{i}{a} \cdot \sum_{l=1}^3 \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{d}_l^s} (d_{ly}^s + id_{lx}^s) \right], \quad (\text{A19})$$

with \vec{d}_l^s being the component of \vec{d}_l^s vector along the i -direction with $i = x, y$.

4. Strained graphene with exchange field

Considering the pristine (unstrained) graphene subjected to an exchange field, one may write

$$H = H_0 + H_M. \quad (\text{A20})$$

The second term in the Eq. (A20) is exchange Hamiltonian which is described by the following expression,

$$H_M = M \sum_i^N \{ |A_i, \sigma\rangle \gamma_z \langle A_i, \sigma| + h.c. \} \quad (\text{A21})$$

with strength M . The equations of motion is given by

$$E\Psi_A(\vec{k}, \sigma) = f \cdot \Psi_B(\vec{k}, \sigma) + M\sigma\Psi_A(\vec{k}, \sigma),$$

$$E\Psi_B(\vec{k}, \sigma) = f^* \cdot \Psi_A(\vec{k}, \sigma) + M\sigma\Psi_B(\vec{k}, \sigma). \quad (\text{A22})$$

We can also derive the matrix form of the Schrödinger's equation as

$$E \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_A(\vec{k}, \downarrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \downarrow) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M & 0 & f & 0 \\ 0 & -M & 0 & f \\ f^* & 0 & M & f \\ 0 & f^* & f^* & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_A(\vec{k}, \downarrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \uparrow) \\ \Psi_B(\vec{k}, \downarrow) \end{pmatrix}. \quad (\text{A23})$$

In the strained graphene, the correspondent Schrödinger's equation can be obtained by doing a substitution of f by f_s .

5. Strained graphene with SOC's and exchange field

With all effects together in the pristine (unstrained) graphene, the Hamiltonian now reads

$$H = H_0 + H_{so} + H_R + H_M. \quad (\text{A24})$$

Thus, the equation of motion is given by

$$E\Psi_A(\vec{k}, \sigma) = f \cdot \Psi_B(\vec{k}, \sigma) - [\lambda_{so} \cdot f_{so} - M\sigma] \cdot \Psi_A(\vec{k}, \sigma) - \lambda_R \cdot f_{R1} \cdot \Psi_B(\vec{k}, -\sigma), \quad (\text{A25})$$

$$E\Psi_B(\vec{k}, \sigma) = f^* \cdot \Psi_A(\vec{k}, \sigma) + [\lambda_{so} \cdot f_{so} + M\sigma] \cdot \Psi_B(\vec{k}, \sigma) + \lambda_R \cdot f_{R2} \cdot \Psi_A(\vec{k}, -\sigma). \quad (\text{A26})$$

The matrix form of the correspondent Hamiltonian with eigenvectors

$$(\Psi_A(\vec{k}, \uparrow), \Psi_A(\vec{k}, \downarrow), \Psi_B(\vec{k}, \uparrow), \Psi_B(\vec{k}, \downarrow))^\dagger \quad (\text{A27})$$

reads

$$H = \begin{pmatrix} M - \varphi_{so} & 0 & f & \varphi_{R1} \\ 0 & -M + \varphi_{so} & \varphi_{R2}^* & f \\ f^* & \varphi_{R2} & M + \varphi_{so} & f \\ \varphi_{R1}^* & f^* & f^* & -M - \varphi_{so} \end{pmatrix}. \quad (\text{A28})$$

In the strained graphene, the correspondent Schrödinger's equation can be obtained by doing following substitutions: $f \rightarrow f_s$, $f_{so} \rightarrow f_{sso}$, $f_{R1} \rightarrow f_{sR1}$ and $f_{R2} \rightarrow f_{sR2}$.

Appendix B: Equation of Motion of an Electron in Strained GNR

In order to write the Hamiltonian for a GNR with zigzag edges, we must consider a unit cell m and label each zigzag chain with parameter n . The whole Hamiltonian have the same general form of Eq. A24. But the specific expression of each term in the Hamiltonian is different with its partner of the pristine graphene, given

by

$$H_0 = - \sum_{m,n} \sum_{\sigma,\sigma'}^N \{ t_1 |A, m, n, \sigma\rangle \langle B, m, n-1, \sigma'| + t_2 |A, m, n, \sigma\rangle \langle B, m+1/2, n, \sigma'| + t_3 |A, m, n, \sigma\rangle \langle B, m-1/2, n, \sigma'| + h.c. \}. \quad (\text{B1})$$

As mentioned before, $t = 2.7eV$ for unstrained graphene. The intrinsic SOC is

$$H_{so} = \frac{2i\lambda_{so}}{\sqrt{3}} \sum_{m,n} \sum_{\sigma,\sigma'}^N \left\{ |A_m, n, \sigma\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A_{m+1}, n, \sigma'| + |A_m, n, \sigma\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A, m+1/2, n-1, \sigma'| + |A_m, n, \sigma\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A_{m+1/2}, n+1, \sigma'| + |A_m, n, \sigma\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A_{m-1/2}, n+1, \sigma'| + |A_m, n, \sigma\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A_{m-1}, n, \sigma'| + |A_m, n, \sigma\rangle \vec{\gamma} \cdot (\vec{d}_{kj}^s \times \vec{d}_{ik}^s) \langle A_{m-1/2}, n-1, \sigma'| + h.c. \right\} \quad (\text{B2})$$

with distance vectors modified by strain \vec{d}_{kj}^s , shown in Eq. A5. The Rashba SOC reads

$$H_R = i \sum_{(m,n)} \sum_{\sigma\sigma'}^N [|A_m, n, \sigma\rangle (\vec{u}_{n(n-1)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_m, n-1, \sigma'| + |A_m, n, \sigma\rangle (\vec{u}_{m(m+1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m+1/2}, n, \sigma'| + |A_m, n, \sigma\rangle (\vec{u}_{m(m-1/2)} \cdot \vec{\gamma}) \langle B_{m-1/2}, n, \sigma'| + h.c.] \quad (\text{B3})$$

where \vec{u} was modified to

$$\begin{aligned} \vec{u}_{n(n-1)} &= -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{n(n-1)}^s; \\ \vec{u}_{m(m+1/2)} &= -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{m(m+1/2)}^s; \\ \vec{u}_{m(m-1/2)} &= -\frac{\lambda_R}{a} \hat{z} \times \vec{d}_{m(m-1/2)}^s. \end{aligned} \quad (\text{B4})$$

The EX term now is given by

$$H_M = M \sum_{m,n} \sum_{\sigma} \{ |A_m, n, \sigma\rangle (\vec{\gamma} \cdot \hat{z}) \langle A_m, n, \sigma| + h.c. \}. \quad (\text{B5})$$

The wavevector now includes the periodicity of the unit cell

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m,n} \sum_{\sigma}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} \left\{ \Psi_A(\vec{k}, n, \sigma) |A_m, n, \sigma\rangle + \beta(\vec{k}, n, \sigma) |B_m, n, \sigma\rangle \right\}. \quad (\text{B6})$$

where $\vec{R}_m = m\vec{a}_0$ and $\vec{R}_m^s = (I + \epsilon)\vec{R}_m$ are the quantized distance among atoms in the absence and presence of strain, with $\vec{a}_0 = \sqrt{3}a\hat{x}$. Inserting this single-particle wavefunction into the Schrödinger equation, we obtain the following two equations of motion,

$$\begin{aligned} E\Psi_A(\vec{k}, n, \sigma) &= - \left[\beta(\vec{k}, n, \sigma) (t_2 e^{i\omega} + t_3 e^{-i\omega}) \right. \\ &\quad \left. + t_1 \beta(\vec{k}, n-1, \sigma) \right] + 2\chi\lambda_{so} \det(I + \epsilon) \\ &\quad \left\{ \sin(\omega) \left[\alpha(\vec{k}, n-1, \sigma) + \alpha(\vec{k}, n+1, \sigma) \right] \right. \\ &\quad \left. - \sin(2\omega) \alpha(\vec{k}, n, \sigma) \right\} - i\lambda_R \chi \{ [-\rho_1 \cos(\omega) \\ &\quad + \sqrt{3}\rho_2 \sin(\omega)] \beta(\vec{k}, n, -\sigma) + \rho_1 \beta(\vec{k}, n, -\sigma) \} \\ &\quad + \chi M \alpha(\vec{k}, n, \sigma) \end{aligned} \quad (\text{B7})$$

and

$$\begin{aligned} E\Psi_B(\vec{k}, n, \sigma) &= - \left[\alpha(\vec{k}, n, \sigma) (t_2 e^{i\omega} + t_3 e^{-i\omega}) \right. \\ &\quad \left. + t_1 \alpha(\vec{k}, n+1, \sigma) \right] - 2\chi\lambda_{so} \det(I + \epsilon) \\ &\quad \left\{ \sin(\omega) \left[\beta(\vec{k}, n-1, \sigma) + \beta(\vec{k}, n+1, \sigma) \right] \right. \\ &\quad \left. - \sin(2\omega) \beta(\vec{k}, n, \sigma) \right\} + i\lambda_R \chi \{ [-\rho_1 \cos(\omega) \\ &\quad - \sqrt{3}\rho_2 \sin(\omega)] \alpha(\vec{k}, n, -\sigma) + \rho_1 \alpha(\vec{k}, n, -\sigma) \} \\ &\quad + \chi M \beta(\vec{k}, n, \sigma) \end{aligned} \quad (\text{B8})$$

where

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{a_0}{2} \{ (1 + \epsilon_{11})k_x + \epsilon_{21}ky \}; \\ \rho_1 &= 1 + \epsilon_{22} + i\epsilon_{12}; \\ \rho_2 &= 1 + \epsilon_{11} - i\epsilon_{21}. \end{aligned}$$

* fanyao@unb.br

¹ C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C.

Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, Science **340**, 167 (2013).

² R. Yu, W. Zhang, H.-J. Zhang, S.-C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, Science **329**, 61 (2010).

- ³ M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- ⁴ K. Nomura and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 166802 (2011).
- ⁵ B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, *Science* **316**, 1757 (2006).
- ⁶ M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- ⁷ X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- ⁸ C. Liu, T. L. Hughes, X.-L. Qi, K. Wang, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 236601 (2008).
- ⁹ F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2015 (1988).
- ¹⁰ C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- ¹¹ Z. Qiao, H. Jiang, X. Li, Y. Yao, and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **85**, 115439 (2012).
- ¹² A. F. Young, J. D. Sanchez-Yamagishi, B. Hunt, S. H. Choi, K. Watanabe, T. Taniguchi, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **505**, 528 (2013).
- ¹³ C.-C. Liu, W. Feng, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076802 (2011).
- ¹⁴ X.-T. An, Y.-Y. Zhang, J.-J. Liu, and S.-S. Li, *Applied Physics Letters* **102**, 043113 (2013).
- ¹⁵ Y. Ma, Y. Dai, W. Wei, B. Huang, and M.-H. Whangbo, *Sci. Rep.* **4**, 7297 (2014).
- ¹⁶ X. Qian, J. Liu, L. Fu, and J. Li, *Science* **346**, 1344 (2014).
- ¹⁷ M. A. Cazalilla, H. Ochoa, and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 077201 (2014).
- ¹⁸ C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- ¹⁹ T.-W. Chen, Z.-R. Xiao, D.-W. Chiou, and G.-Y. Guo, *Phys. Rev. B* **84**, 165453 (2011).
- ²⁰ Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
- ²¹ G. S. Diniz, M. R. Guassi, and F. Qu, *J. of Appl. Phys.* **114**, 243701 (2013).
- ²² S. Oh, *Science* **340**, 153 (2013).
- ²³ F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **6**, 30 (2009).
- ²⁴ M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, A. Tünnermann, S. Nolte, M. Segev, and A. Szameit, *Nature Photon.* **3**, 91 (2009).
- ²⁵ S. V. Iordanskii and A. E. Koshelev, *JETP Lett.* **41**, 574 (1985).
- ²⁶ A. Avsar, J. Y. Tan, T. Taychatanapat, J. Balakrishnan, G. K. W. Koon, Y. Yeo, J. Lahiri, A. Carvalho, A. S. Rodin, E. C. T. O'Farrell, G. Eda, A. H. Castro Neto, and B. Özyilmaz, *Nat. Commun.* **5**, 4875 (2014).
- ²⁷ J. Balakrishnan, G. Kok Wai Koon, A. Avsar, Y. Ho, J. Hak Lee, M. Jaiswal, S.-J. Baeck, J.-H. Ahn, A. Ferreira, M. A. Cazalilla, A. H. Castro Neto, and B. Özyilmaz, *Nat. Commun.* **5**, 4748 (2014).
- ²⁸ J. Balakrishnan, G. Kok Wai Koon, M. Jaiswal, A. H. Castro Neto, and B. Özyilmaz, *Nat. Phys.* **9**, 284 (2013).
- ²⁹ M. Zarea and N. Sandler, *Phys. Rev. B* **79**, 165442 (2009).
- ³⁰ A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, A. M. Shikin, C. Biswas, E. Vescovo, A. Rybkin, D. Marchenko, and O. Rader, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 157601 (2008).
- ³¹ Y. S. Dedkov, M. Fonin, U. Rüdiger, and C. Laubschat, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 107602 (2008).
- ³² O. Rader, A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, D. Marchenko, A. Rybkin, and A. M. Shikin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 057602 (2009).
- ³³ T. Eelbo, M. Waśniowska, P. Thakur, M. Gyamfi, B. Sachs, T. O. Wehling, S. Forti, U. Starke, C. Tieg, A. I. Lichtenstein, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 136804 (2013).
- ³⁴ A. G. Swartz, P. M. Odenthal, Y. Hao, R. S. Ruoff, and R. K. Kawakami, *ACS Nano* **6**, 10063 (2012).
- ³⁵ Z. Qiao, W. Ren, H. Chen, L. Bellaiche, Z. Zhang, A. H. MacDonald, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 116404 (2014).
- ³⁶ W. Bao, F. Miao, Z. Chen, H. Zhang, W. Jang, C. Dames, and C. Ning Lau, *Nat. Nanotech.* **4**, 562 (2009).
- ³⁷ H. Shioya, M. F. Craciun, S. Russo, M. Yamamoto, and S. Tarucha, *Nano Letters* **14**, 1158 (2014).
- ³⁸ M. Bruna, A. Vaira, A. Battiato, E. Vittone, and S. Borini, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 021911 (2010).
- ³⁹ T. M. G. Mohiuddin, A. Lombardo, R. R. Nair, A. Bonetti, G. Savini, R. Jalil, N. Bonini, D. M. Basko, C. Galotis, N. Marzari, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and A. C. Ferrari, *Phys. Rev. B* **79**, 205433 (2009).
- ⁴⁰ Z. H. Ni, H. M. Wang, Y. Ma, J. Kasim, Y. H. Wu, and Z. X. Shen, *ACS Nano* **2**, 1033 (2008).
- ⁴¹ V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, *Phys. Rev. B* **80**, 045401 (2009).
- ⁴² F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, *Phys. Rev. B* **81**, 035411 (2010).
- ⁴³ D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- ⁴⁴ J. Jung, Z. Qiao, Q. Niu, and A. H. MacDonald, *Nano Letters* **12**, 2936 (2012).
- ⁴⁵ Z. Qiao, S. A. Yang, W. Feng, W.-K. Tse, J. Ding, Y. Yao, J. Wang, and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **82**, 161414 (2010).
- ⁴⁶ A. H. Castro Neto and F. Guinea, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 026804 (2009).
- ⁴⁷ M. Oliva-Leyva and G. G. Naumis, *Phys. Rev. B* **88**, 085430 (2013).
- ⁴⁸ J. Wurm, M. Wimmer, and K. Richter, *Phys. Rev. B* **85**, 245418 (2012).