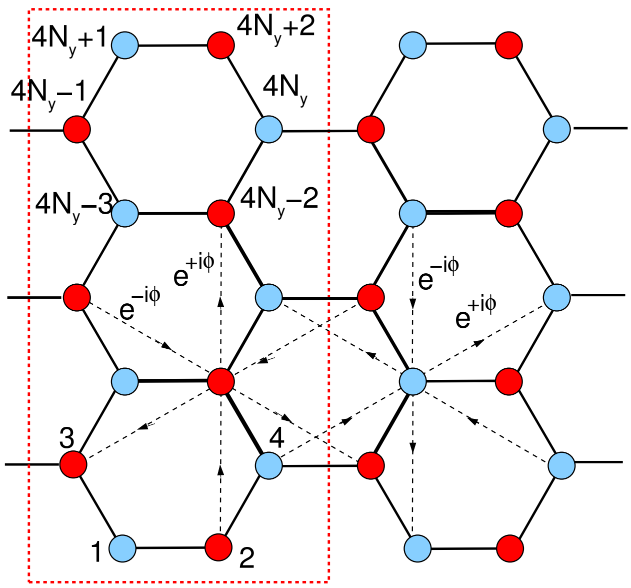
PGF5110 - Estado Sólido I

Lista de exercícios 5 - 2018 (entrega em 21/01/2019)

1. Estados de borda no modelo de Haldane

Em aula, montamos o Hamiltoniano do modelo de Haldane infinito (sem bordas) usando método de tight-binding. No entanto, essa abordagem não mostra os estados de borda que aparecem no regime topológico. O objetivo deste exercício (na verdade, um pequeno projeto) é construir e diagonalizar o Hamiltoniano de Haldane com duas bordas.

Para isso, vamos considerar uma rede hexagonal infinita na direção x mas com condições de contorno abertas (sistema *finito*) na direção y, como mostra a figura. No caso, escolhemos bordas do tipo "arm-chair" (uma outra escolha possível seriam bordas to tipo zig-zag).



A construção do Hamiltoniano será parecida com o que fizemos com o método de tight-binding. A diferença aqui é que a célula unitária é uma "faixa vertical" com $4N_y + 2$ átomos na base (onde N_y conta o número de hexágonos da célula), mostrada na figura pelo retângulo em vermelho. Desta forma, a base do nosso sistema serão $4N_y + 2$ funções de Bloch do tipo:

$$\Psi_q^{(n_y)}(x) = \sum_{R_{n_x}} e^{iqR_{n_x}} \phi_{(n_y)}(x - R_{n_x})$$

com n_y variando entre 1 e $4N_y + 2$. Logo, o Hamiltoniano resultante será uma matriz $(4N_y + 2) \times (4N_y + 2)$, cujos elementos dependem de q, o momento cristalino na direção x. Já R_{n_x} é o vetor de translação na direção x: $R_{n_x} = n_x(3a)$ onde a é a distância entre dois átomos primeiros vizinhos e n_x é um inteiro (comece mostrando que a distância horizontal entre duas células vizinhas é $3a$ para se convencer).

(a) Escreva (no papel!) os elementos de matriz do modelo de Haldane nessa formulação. Os parâmetros são aqueles que vimos em sala: (i) a energia (corrigida) do sítio ($+M$ para uma sub-rede e $-M$ para a outra sub-rede), (ii) integrais de transferência entre primeiros (t_1) e segundos vizinhos ($t_2 e^{\pm i\phi}$). Note que o sinal da fase ϕ depende da direção (quiralidade) e essas direções são opostas para átomos em subredes diferentes (vide figura).

O objetivo aqui é montar os elementos de matriz $H_{n_y n'_y}(q_x)$ (já normalizado pelo número de sítios) com n_y e n'_y variando entre 1 e $(4N_y + 2)$.

Dicas:

(i) No geral, como no grafeno, cada sítio tem três primeiros vizinhos e seis segundos vizinhos. A exceção são os sítios das bordas ($n_y = 1, 2, 3, 4$ e $n_y = 4N_y - 1, 4N_y, 4N_y + 1$ e $4N_y + 2$) que são especiais pois não terão alguns vizinhos.

(ii) Para ficar mais fácil de ver a "regra" para calcular os elementos de matriz dados n_y e n'_y, enumere os sítios na forma $n_y = 4m_y + j$ onde $0 \leq m_y \leq N_y$ e $j = 1,2,3,4$. Isso faz com que sítios com mesmo j tenham os mesmos tipos de vizinhos. A exceção são os casos das bordas: $m_y = 0$ e $m_y = N_y$ (neste último, só temos $j = 1,2$) mencionados acima.

(iii) Nesta notação, os sítios com $j = 1$ e $j = 4$ são de uma subrede (energia "on-site" $+M$) e os sítios com $j = 2$ e $j = 3$ são da outra sub-rede (energia "on-site" $-M$).

(iv) Note que, em todos os casos, haverá elementos de matriz de segundos vizinhos entre sítios dentro da mesma célula horizontal ($n_x = n'_x$) e também entre sítios de células horizontais vizinhas ($n_x = n'_x \pm 1$). No caso de primeiros vizinhos, apenas os sítios com $j = 3,4$ tem primeiros vizinhos em células vizinhas.

(v) São esses acoplamentos entre células vizinhas ($n_x = n'_x \pm 1$) que levam à dependência em q_x, através de fases do tipo $e^{\pm i(3a)q_x}$.

(b) Dadas as expressões dos elementos de matriz, faça um script ou programa na sua linguagem preferida (Mathematica, Python, Kwant, Fortran, C, etc.) para diagonalizar o Hamiltoniano. Comece testando com N_y pequeno (por exemplo, $N_y = 3$, como na figura) e vá aumentando. Quanto maior o número N_y, melhor. Como resultado você obterá $(4N_y + 2)$ estados (bandas) $E_i(q_x)$ para cada valor de q_x.

(c) Na tarefa 21, vocês mostraram que, para $t_1 = 1$ e $\phi = \pi/2$, o gap vai a zero para $M/t_2 = \pm 3\sqrt{3}$ Escolha um N_y alto (exemplo: $N_y = 10$ e calcule os níveis de energia para $q_x = 0$ para esses parâmetros.

(d) Vamos concentrar agora nos parâmetros em $t_1 = 1$, $t_2 = 0.3$ e $M = 3t_2\sqrt{3}/2 = 0.78$. Usando $N_y = 20$, faça plots das bandas $E_i(q_x)$ versus q_x para $\phi = \pi$ e $\phi = \pi/2$. Discuta os resultados com base no que aprendemos sobre estados de borda em isolantes topológicos durante o curso.

Dica: você deve obter um gráfico parecido com o mostrado a sequir: