

Efeito Hall de Spin Quântico em grafeno.

Raphael Levy Ruscio Castro Teixeira

Neste trabalho pretendemos definir e mostrar que o Efeito Hall de Spin Quântico (QSHE) em redes hexagonais surge naturalmente do modelo de Kane-Mele. Para tal introduzimos o conceito de reversão temporal (TR) e sua simetria (simetria TR). Derivamos então o modelo de Haldane que serve de base para a construção do modelo de Kane-Mele. Por fim analisamos o caso do grafeno e o motivo de não se ter nenhuma medição do QSHE.

I. INTRODUÇÃO

Até a década de 1980 todos os estados da matéria em matéria condensada podia ser expresso por quebras espontâneas de simetria, como translacional para sólidos cristalinos, de gauge para supercondutores, etc. Contudo a partir da década de 1980 foi descoberto o estado Hall Quântico em que não havia quebra espontânea, mas necessita de campo externo de forma a quebrar a simetria de reversão temporal. Mais recentemente foi descoberto o estado Hall de Spin Quântico que diferentemente do caso anterior é invariante por reversão temporal e não precisa de campo externo[1].

No final da década de 1980, Haldane propôs um modelo para uma rede hexagonal sem spin, para o efeito Hall Quântico Inteiro sem níveis de Landau e mantendo a simetria translacional da rede. Através desse modelo, Haldane propôs que o efeito Hall Quântico seria resultado de uma quebra na simetria de reversão temporal sem um fluxo total na célula unitária, mas com dois fluxos em sentidos opostos. Apesar de ser um modelo simplificado, Kane e Mele usaram-no para descrever o Efeito Hall de Spin Quântico[2].

Em 2005 Kane e Mele publicaram um artigo em que generalizam o modelo de Haldane para o caso de Spin. Se não houver acoplamento entre os elétrons de diferentes spins então o novo modelo é apenas o antigo duplamente degenerado (mantendo o efeito Hall Quântico). Contudo, quando se substitui os fluxos magnéticos por acoplamento spin-órbita observa-se um novo fenômeno, o Efeito Hall de Spin Quântico[3]. O objetivo desse trabalho é desenvolver e mostrar todas estas etapas (Reversão temporal, modelo de Haldane, modelo de Kane e Mele). Por fim, mostrar-se-á os resultados experimentais para o grafeno, e o motivo de não ter sido observado o efeito Hall de Spin Quântico nele.

II. REVERSÃO TEMPORAL

Como dito anteriormente, quebras de simetria e no caso específico a quebra da simetria de reversão temporal tem papel fundamental. Portanto, descreve-se a reversão temporal (TR) e sua simetria (TRS).

O operador de reversão temporal (Θ), como seu nome sugere, inverte a seta do tempo $t \rightarrow -t$. Isto sugere que postule-se algumas propriedades que este operador deve ter:

$$\Theta^\dagger \Theta = \mathbf{1}, \quad (1a)$$

$$\Theta^\dagger \vec{r} \Theta = \vec{r}, \quad (1b)$$

$$\Theta^\dagger \vec{p} \Theta = \Theta^\dagger i \frac{d\vec{p}}{dt} \Theta = -i \frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{p}, \quad (1c)$$

$$\Theta^\dagger \vec{L} \Theta = \Theta^\dagger (\vec{r} \times \vec{p}) \Theta = (\vec{r} \times -\vec{p}) = -\vec{L}. \quad (1d)$$

Onde \vec{r} , \vec{p} , \vec{L} são respectivamente a posição, momento e momento angular. Trivialmente a propriedade do momento angular se expande ao spin. Agora considere alguns casos particulares para exemplificar.

A. Caso sem spin:

No caso sem spin o operador TR é simplesmente o operador conjugação (K). Dessa forma, se $\Psi(r, t)$ é uma função de onda temos:

$$\Theta^\dagger \Psi(r, t) \Theta = \Psi^*(r, t) \quad (2)$$

B. Caso com spin 1/2:

Já o caso com spin 1/2 o operador TR tem que ser capaz de inverter o spin e por isso ele tem a forma:

$$\theta = -i\sigma_y K \quad (3)$$

Onde σ_y é a matriz de Pauli correspondente. Desta forma as matrizes de Pauli (que correspondem ao spin) se transformam como $\Theta^\dagger \sigma_i \Theta \rightarrow -\sigma_i$.

C. Simetria de reversão temporal

Ter uma simetria de reversão temporal (simetria TR) é ser invariante pelo operador Θ ($[H, \Theta]=0$). Desta forma, para uma hamiltônia de bandas:

$$H(-k) = \Theta H(k) \Theta^{-1} \quad (4)$$

Se em algum ponto (Γ_i) da zona de Brillouin tem-se:

$$-\Gamma_i = \Gamma_i + n_i G_i \quad (5)$$

Onde n é zero ou um e G_i é um vetor da rede recíproca. O sistema satisfaz a condição $H(-\Gamma_i) = H(\Gamma_i)$ e portanto tem simetria de reversão temporal, além disso estes pontos sempre serão degenerados. No caso de uma rede quadrada,

por exemplo, existem um total de 4 pontos que satisfazem essa condição.

Para um sistema de spin 1/2 essa invariância implica que existe um número par de degenerescência. Numa estrutura de banda isso significa que as bandas se cruzam. Um par destas bandas é chamado de par de Kramers. Sempre que existirem estes pares e eles forem separados por gaps de outros pares, pode-se definir um invariante topológico associado.

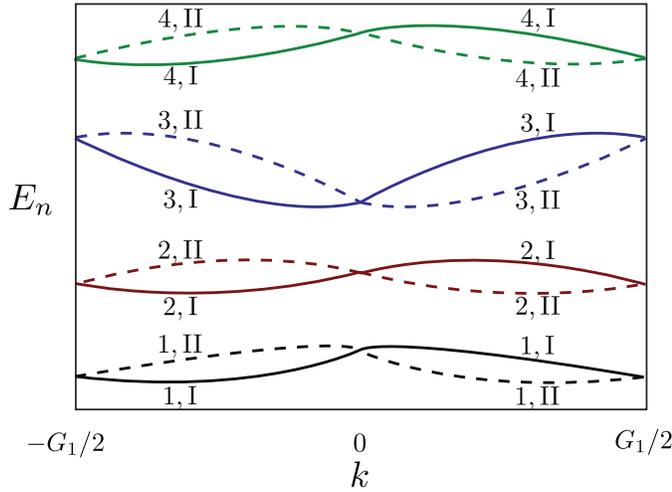


Figura 1: Exemplo de pares de Kramers[2].

Considere agora o exemplo da Hamiltoniana de um sistema de 2 níveis:

$$H(k) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + M \sigma_z \quad (6)$$

Onde k_x, k_y são associados ao momento e são bons números quânticos, M é uma constante não negativa e σ_i são matrizes de Pauli, não associadas ao spin. Aplicando o operador TR:

$$\Theta^\dagger H(k) \Theta = -k_x \sigma_x - k_y \sigma_y + M \sigma_z \quad (7)$$

Com isso plota-se a estrutura de bandas para este sistema em função de $\|k\|$.

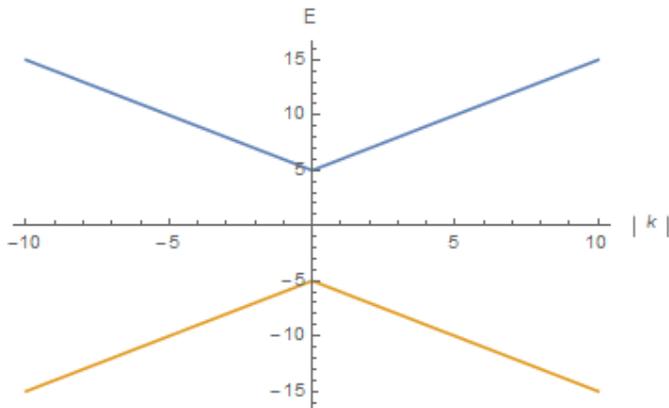


Figura 2: Caso $M \neq 0$.

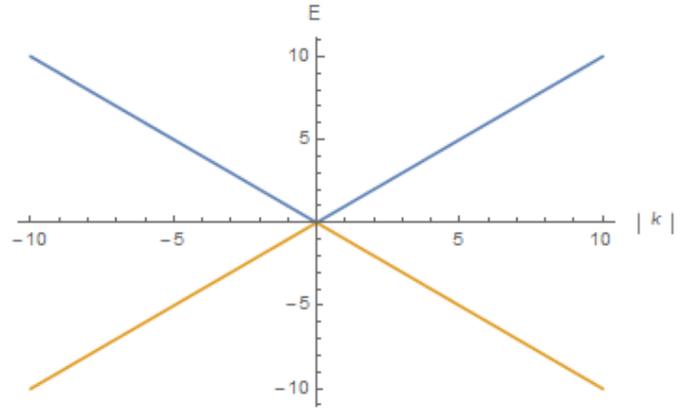


Figura 3: Caso $M=0$.

Dessa forma o sistema descrito anteriormente tem gap de $2M$ entre as bandas. Além disso ele tem simetria TR se e somente se $M=0$.

III. MODELO DE HALDANE

Tentando descrever um sistema que teria um efeito Hall Quântico inteiro mas mantendo simetria translacional da rede. Haldane propôs o seguinte modelo em uma rede hexagonal.

A sub-rede será dividida entre sítios A (pretos) e B (branco). Existe um termo de hopping t_1 entre os primeiros vizinhos ($A \rightarrow B$ ou $B \rightarrow A$) e t_2 entre os segundos vizinhos ($A \rightarrow A$ ou $B \rightarrow B$). Além disso os sítios A e B tem energias $+M$ e $-M$ respectivamente. Por fim adicionou-se um fluxo de campo magnético periódico, perpendicular ao plano, mas de forma que o fluxo total por célula seja zero, como visto na Figura 4[2].

Com isto se introduz uma fase $\pm\phi$, cujo sinal dependerá se o vetor que liga os pontos está paralelo (+) ou anti-paralelo (-), a direção do fluxo (Figura 4). Tal fase é $\phi = 2\pi e\phi_a/h$, com ϕ_a o fluxo magnético na região a.

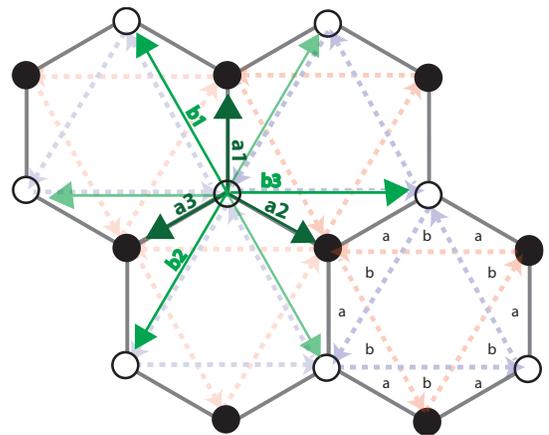


Figura 4: Exemplo do modelo de Haldane. região a tem fluxo ϕ_a e região b tem fluxo $-\phi_a$ de forma que o fluxo total na célula é zero.

Define-se então $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ os vetores entre os primeiros vizinhos e $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$ entre os segundos vizinhos como na Figura 4. Escreve-se então a Hamiltoniana do sistema na base $(c_{k,A}^\dagger, c_{k,B}^\dagger)$. Tal derivação é vista no Apêndice A e resulta em:

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})\mathbb{1} + \mathbf{d}(\mathbf{k})\boldsymbol{\sigma}, \quad (8a)$$

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \cos(\phi) \cos(\mathbf{k}\mathbf{b}_i), \quad (8b)$$

$$d_x(\mathbf{k}) = t_1 \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_i), \quad (8c)$$

$$d_y(\mathbf{k}) = t_1 \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k}\mathbf{a}_i), \quad (8d)$$

$$d_z(\mathbf{k}) = M - 2t_2 \sin(\phi) \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k}\mathbf{b}_i). \quad (8e)$$

Tendo a forma do Hamiltoniano, pode-se diagonalizá-lo e nota-se que os únicos pontos da banda que fecham são os vértices do hexágono (K, K' análogo ao A e B no espaço real) e apenas se $M = \pm 3\sqrt{3}t_2 \sin(\phi)$. Para o caso $|t_2/t_1| < 1/3$, que garante que as bandas não se interceptem, plotamos a estrutura de bandas para M positivo e negativo respectivamente:

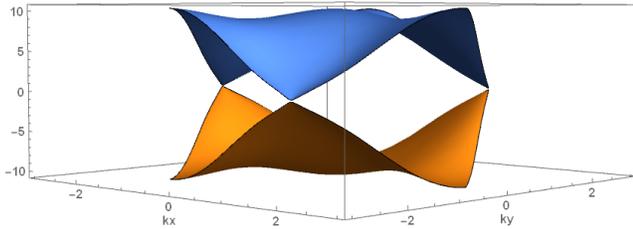


Figura 5: Estrutura de banda para $M = +3\sqrt{3}t_2 \sin(\phi)$.

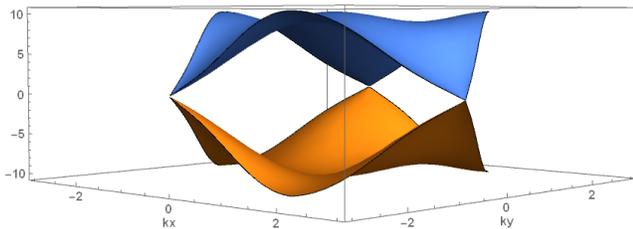


Figura 6: $M = -3\sqrt{3}t_2 \sin(\phi)$

Dessa forma vemos que $M \neq 0$ abre o gap oposto dependendo do sítio. Podemos por sua vez querer saber a condutância Hall. Para isso usamos o número de Chern (n_c) e sua

relação com a condutância Hall ($\sigma_H = n_c \frac{e^2}{h}$). Neste caso temos:

$$n_c = \frac{1}{2} [Sgn(M - 3\sqrt{3}t_2 \sin(\phi)) + Sgn(-M - 3\sqrt{3}t_2 \sin(\phi))]. \quad (9)$$

Sendo Sgn a função sinal. Por fim tem-se o diagrama de fase para o número de Chern em função de ϕ e M/t_2 :

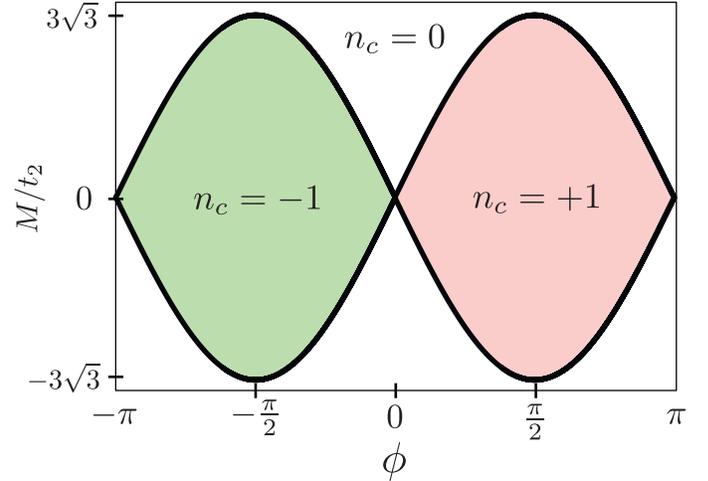


Figura 7: Diagrama de fase do número de Chern[2]

IV. MODELO DE KANE-MELE

Quando se introduz spin no modelo de Haldane, surgem novas possibilidades de termos que façam com que os spins interajam, caso não se acrescente tais termos esse novo modelo seria igual ao de Haldane só que duplamente degenerado. Dessa forma o novo Hamiltoniano para o sistema é:

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + i\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{ij} c_i^\dagger s_z c_j + i\lambda_R \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger (s \times \mathbf{d}_{ij})_z c_j + \lambda_\nu \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i \quad (10)$$

Onde s_i é a matriz de Pauli correspondente e representa o spin. O primeiro termo é o hopping normal com $c_i^\dagger = (c_{i,\uparrow}^\dagger, c_{i,\downarrow}^\dagger)$. O segundo é um termo simétrico de interação spin-órbita e $\nu_{ij} = \frac{2}{\sqrt{3}}(\mathbf{d}_i \times \mathbf{d}_j)_z = \pm 1$, e $\mathbf{d}_i, \mathbf{d}_j$ são vetores unitários que ligam dois sítios do j para o i. Este termo respeita a simetria TR. O terceiro termo é chamado termo cd Rashba e explicitamente viola a simetria $z \rightarrow -z$. Por fim o último termo é a energia no sítio e como no modelo anterior dependendo do sítio tem sinal oposto ($\xi_i = \pm 1$)[2, 3].

Toda Hamiltoniana (4x4) pode ser escrita na forma:

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{a=1}^5 d_a(\mathbf{k})\Gamma^a + \sum_{a<b=1}^5 d_{ab}(\mathbf{k})\Gamma^{ab}, \quad (11)$$

com $\Gamma^a = (\sigma_x \otimes s_0, \sigma_z \otimes s_0, \sigma_y \otimes s_x, \sigma_y \otimes s_y, \sigma_y \otimes s_z)$ e $\Gamma^{ab} = \frac{1}{2i}[\Gamma^a, \Gamma^b]$.

Para que haja uma corrente puramente de spins, os elétrons com spin para cima vão em uma direção e os de spin para baixo em outra. Para isso ocorrer deve-se ter simetria de reversão temporal. Dessa forma, nesta representação o operador de reversão temporal é dado por:

$$\Theta = i(\sigma_0 \otimes s_y)K, \quad (12)$$

com isso $\Theta\Gamma^a\Theta^{-1} = \Gamma^a$ e $\Theta\Gamma^{ab}\Theta^{-1} = -\Gamma^{ab}$. Para ter simetria de reversão temporal e portanto $H(-k)=H(k)$, impõe-se que $d_\alpha(k)$ é uma função par e $d_{\alpha\beta}(k)$ é uma função ímpar. Os coeficientes do modelo de Kane e Mele são:

$$d_1 = t(1 + 2 \cos(\frac{k_x}{2}) \cos(\frac{\sqrt{3}k_y}{2})) \quad (13a)$$

$$d_2 = \lambda_\nu \quad (13b)$$

$$d_3 = \lambda_R(1 - \cos(\frac{k_x}{2}) \cos(\frac{\sqrt{3}k_y}{2})) \quad (13c)$$

$$d_4 = -\sqrt{3}\lambda_R \sin(\frac{k_x}{2}) \sin(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}) \quad (13d)$$

$$d_{12} = -2t \cos(\frac{k_x}{2}) \sin(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}) \quad (13e)$$

$$d_{15} = \lambda_{SO}(2 \sin k_x - 4 \sin(\frac{k_x}{2}) \cos(\frac{\sqrt{3}k_y}{2})) \quad (13f)$$

$$d_{23} = -\lambda_R \cos(\frac{k_x}{2}) \sin(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}) \quad (13g)$$

$$d_{24} = \sqrt{3}\lambda_R \sin(\frac{k_x}{2}) \cos(\frac{\sqrt{3}k_y}{2}) \quad (13h)$$

Desta forma uma estrutura com 4 bandas, e como o sistema tem simetria TR o número de Chern é sempre zero. Quando $\lambda_R = 0$ a hamiltoniana é separada em duas partes independentes,

$$H = \sum_s H_s. \quad (14)$$

Neste caso há um gap $|6\sqrt{3}\lambda_{SO} - 2\lambda_\nu|$. Para cada s define-se um número de Chern dependente do spin. No caso do gap ser dominado por λ_ν ($\lambda_\nu > 3\sqrt{3}\lambda_{SO}$) ambos são 0. Para o gap dominado por λ_{SO} ($\lambda_\nu < 3\sqrt{3}\lambda_{SO}$) o número de Chern é não nulo:

$$n_s = \text{sgn}(s\lambda_{SO}). \quad (15)$$

Apesar da soma do número de Chern ser sempre zero, sua diferença não é, com isso percebemos que há uma combinação de efeito Hall Quântico em direções opostas, i.e. os elétrons se com spin opostos se movem em direções opostas de forma que não haja corrente elétrica apenas de spin.

Para $\lambda_R \neq 0$, há uma mistura entre os elétrons de forma que não é possível usar o número de Chern, sendo necessário a introdução de um parâmetro Z_2 .

Para uma amostra com condições periódicas de contorno em x , pode-se diagonalizar o Hamiltoniano. Quando analisa-se a estrutura de banda, são vistos dois casos distintos. Um em que as bandas de condução e valência se conectam e outro em que o material é isolante (Figura 8). Como o material é isolante no "bulk", a conexão deve ser nos estados de borda indicando a existência de uma fase topológica não trivial.

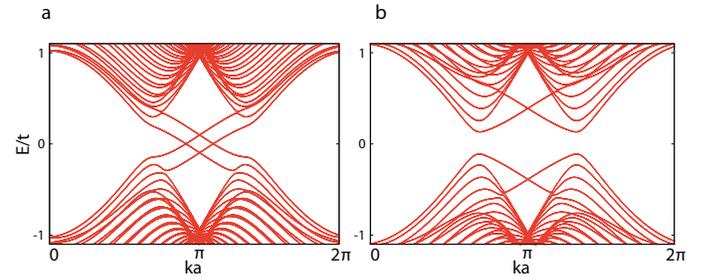


Figura 8: Estrutura de bandas em uma dimensão para uma tira com condição de contorno em zigzag, $\lambda_{SO} = 0.06t$ e $\lambda_R = 0.05t$. (a) Fase do efeito Hall de Spin Quântico com $\lambda_\nu = 0.1t$ e (b) fase isolante com $\lambda_\nu = 0.4t$ [2]

V. RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Para concluir nota-se a ausência de comprovação experimental no caso do grafeno. Isto se deve ao fato do acoplamento spin-órbita do mesmo ser baixo. Apesar disto, outros sistemas, distintos, como poços quânticos de HgTe apresentam efeito Hall de Spin Quântico. Para descrever estes sistemas é necessário outro modelo (BHZ)[4].

A. DERIVAÇÃO DOS TERMOS DO MODELO DE HALDANE

Para facilitar a prova da equação 8 dividiremos a Hamiltoniana em H_A e H_B dependendo do sítio.

$$H_A(\mathbf{r}) = M c_{A_c}^\dagger c_{A_c} + t_1 \sum_{i=1}^3 c_{B_i}^\dagger c_{A_c} + t_2 \left(\sum_{i=1}^3 e^{-i\phi} c_{A_i}^\dagger c_{A_c} + \sum_{\mathbf{k}=j=4}^6 e^{i\phi} c_{A_j}^\dagger c_{A_c} \right) + H.C.$$

$$H_B(\mathbf{r}) = M c_{B_c}^\dagger c_{B_c} + t_1 \sum_{i=1}^3 c_{A_i}^\dagger c_{B_c} + t_2 \left(\sum_{i=1}^3 e^{-i\phi} c_{B_i}^\dagger c_{B_c} + \sum_{\mathbf{k}=j=4}^6 e^{i\phi} c_{B_j}^\dagger c_{B_c} \right) + H.C.$$

Mudando para a base $(c_{k,A}^\dagger, c_{k,B}^\dagger)$ no espaço \mathbf{k} . Do primeiro termo obtemos:

$$c_{A_c}^\dagger c_{A_c} = c_{B_c}^\dagger c_{B_c} = \mathbb{1}$$

Do segundo termo obtemos:

$$\begin{aligned} H_A(\mathbf{r}) : t_1 \sum_{i=1}^3 c_{B_i}^\dagger c_{A_c} + t_1 \sum_{i=1}^3 c_{A_i}^\dagger c_{B_i} &= \\ &= \frac{1}{V} t_1 \left[\sum_{i=1}^3 \left(\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{a}_i + \mathbf{r})} c_{\mathbf{k},B}^\dagger \right) \left(\sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},A} \right) + \left(\sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},A}^\dagger \right) \left(\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i)} c_{\mathbf{k},B} \right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_B(\mathbf{r}) : t_1 \sum_{i=1}^3 c_{A_i}^\dagger c_{B_c} + t_1 \sum_{i=1}^3 c_{B_c}^\dagger c_{A_i} &= \\ &= \frac{1}{V} t_1 \left[\sum_{i=1}^3 \left(\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}_i + \mathbf{r})} c_{\mathbf{k},A}^\dagger \right) \left(\sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},B} \right) + \left(\sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},B}^\dagger \right) \left(\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i)} c_{\mathbf{k},A} \right) \right]. \end{aligned}$$

Como consideramos a mesma interação duas vezes H.C de H_A é o mesmo termo de H_b , dividimos a soma por dois. reordenando \mathbf{k}, \mathbf{k}' encontramos:

$$H(\mathbf{r}) : \frac{t_1}{2V} \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})} (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_i} + e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{a}_i} c_{\mathbf{k},B}^\dagger c_{\mathbf{k}',A}) + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} (e^{i\mathbf{k}'\mathbf{a}_i} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_i} c_{\mathbf{k}',A}^\dagger c_{\mathbf{k},B}) \right]$$

Fazendo a transformada de fourier:

$$\int \frac{t_1}{2V} \sum_{i=1}^3 \left[\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_i} + e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{a}_i} c_{\mathbf{k},B}^\dagger c_{\mathbf{k},A}) + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{r}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} (e^{i\mathbf{k}'\mathbf{a}_i} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_i} c_{\mathbf{k}',A}^\dagger c_{\mathbf{k},B}) \right]$$

Ao realizarmos obtemos um $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ de forma que $H(\mathbf{k})$ será:

$$t_1 \sum_{i=1}^3 \left[(\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_i) - i \sin(\mathbf{k}\mathbf{a}_i)) c_{\mathbf{k},B}^\dagger c_{\mathbf{k},A} + (\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_i) + i \sin(\mathbf{k}\mathbf{a}_i)) c_{\mathbf{k},A}^\dagger c_{\mathbf{k},B} \right]$$

O terceiro termo é:

$$\begin{aligned} H_A(\mathbf{r}) : t_2 \left(\sum_{i=1}^3 e^{-i\phi} c_{A_i}^\dagger c_{A_c} + \sum_{\mathbf{k}=j=4}^6 e^{i\phi} c_{A_j}^\dagger c_{A_c} + \sum_{i=1}^3 e^{i\phi} c_{A_i}^\dagger c_{A_c} + \sum_{\mathbf{k}=j=4}^6 e^{-i\phi} c_{A_j}^\dagger c_{A_c} \right) \\ + \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i\phi} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{b}_i + \mathbf{r})} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},A}^\dagger c_{\mathbf{k}',A} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\phi} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{b}_i + \mathbf{r})} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},A}^\dagger c_{\mathbf{k}',A} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\phi} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{b}_i + \mathbf{r})} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}',A}^\dagger c_{\mathbf{k},A} + \right. \\ \left. + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i\phi} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{b}_i + \mathbf{r})} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}',A}^\dagger c_{\mathbf{k},A} \right) \end{aligned}$$

Ao fazer a transformada de fourier, obtemos novamente que $k=k'$ e encontramos:

$$2t_2 \sum_{i=1}^3 (\cos(\phi) \cos(\mathbf{k}\mathbf{b}_i) - \sin(\phi) \sin(\mathbf{k}\mathbf{b}_i)) c_{\mathbf{k},A}^\dagger c_{\mathbf{k},A}$$

Para H_b temos um caso análogo com

$$H_B(\mathbf{r}) : t_2 \left(\sum_{i=1}^3 e^{i\phi} c_{B_i}^\dagger c_{B_c} + \sum_{\mathbf{k}=j=4}^6 e^{-i\phi} c_{B_j}^\dagger c_{B_c} + \sum_{i=1}^3 e^{-i\phi} c_{B_i}^\dagger c_{B_c} + \sum_{\mathbf{k}=j=4}^6 e^{i\phi} c_{B_j}^\dagger c_{B_c} \right)$$

onde obtemos no final

$$2t_2 \sum_{i=1}^3 (\cos(\phi) \cos(\mathbf{k}\mathbf{b}_i) + \sin(\phi) \sin(\mathbf{k}\mathbf{b}_i)) c_{\mathbf{k},B}^\dagger c_{\mathbf{k},B}$$

Para não considerar a mesma interação duas vezes novamente temos que fazer $H = (H_A + H_B)/2$ (análogo ao caso do segundo termo), o que nos da:

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})\mathbb{1} + \mathbf{d}(\mathbf{k})\boldsymbol{\sigma}$$

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \cos(\phi) \cos(\mathbf{k}\mathbf{b}_i)$$

$$d_x(\mathbf{k}) = t_1 \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_i)$$

$$d_y(\mathbf{k}) = t_1 \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k}\mathbf{a}_i)$$

$$d_z(\mathbf{k}) = M - 2t_2 \sin(\phi) \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k}\mathbf{b}_i)$$

-
- [1] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. The quantum spin hall effect and topological insulators. *Physics Today*, 63(1):33–38, 2010.
- [2] Shun-Qing Shen. *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters*, chapter 6. Springer, 1 edition, 2013.
- [3] B. Andrei Bernevig. *Topological Insulators and Topological Superconductors*, chapter 8–9. Princeton University Press, 1 edition, April 2013.
- [4] Joseph Maciejko, Taylor L Hughes, and Shou-Cheng Zhang. The quantum spin hall effect. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 2(1):31–53, 2011.