



ESTUDOS DE ESTADOS TOPOLÓGICOS EM SISTEMAS DE DUAS BANDAS HIBRIDIZADAS

Gabriel Aller Tolentino Oliveira

O objetivo proposto no projeto, é estabelecer os conceitos da classificação topológica de isolantes através do índice Z_2 , e utilizá-lo para classificar materiais conhecidos como isolantes de Kondo, com foco em orbitais hibridizados do tipo $f - p$, $f - d$. Esses materiais, quando possuem topologia não trivial, são caracterizados pela presença de um gap de energia entre as bandas de valência e de condução, entretanto em sua superfície apresentam estados condutores proibidos de abrirem o gap por simetrias da rede.

Baseado em Kane and Mele [1], estabelece-se uma distinção entre as fases topológicas ao observar os auto-estados do sistema, isso define um invariante do tipo Z_2 e o seu valor $[+1, -1]$ indica se o material é um isolante topológico trivial ou topológico não trivial, respectivamente. Este número calcula a quantidade de trocas entre os centros de cargas dos orbitais de Wannier enquanto o sistema evolui na metade da Zona de Brillouin, e a paridade desse reflete no valor do invariante.

Para aprender como aplicar corretamente o invariante, calcula-se, utilizando o software Mathematica, os auto-estados do modelo de Kane and Mele [2] para o grafeno e compara os resultados com a referência. Foi observado que este método de classificação topológica depende, essencialmente, da definição contínua dos auto-estados do sistema dentro da Zona de Brillouin. Esta dependência não é problemática de um ponto de vista teórico, visto que todas as variáveis do modelo são definidas continuamente, entretanto computacionalmente, foi observado uma grande dificuldade de se definir os auto-estados de forma contínua. Isso se deve à forma local de como o programa resolve o problema de auto-vetor da Hamiltoniana, bem como as degenerescências impostas pelas simetrias do problema, sendo assim necessário encontrar o gauge correto que suaviza os estados para calcular o invariante.

Uma possível solução para o problema segundo Fu and Kane [3], é escolher um gauge transverso que simplifica o cálculo do invariante, na presença de duas simetrias: reversão temporal e inversão espacial (paridade), sendo assim necessário apenas encontrar auto-valores do operador de paridade associados as bandas ocupadas. Este novo método será implementado para os modelos já conhecidos, e caso retorne resultados positivos seguiremos para a classificação das redes de Kondo.

Referências

- [1] Liang Fu; C. L. Kane. Time reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump. *Physical Review*, 74, (2006).
- [2] C. L. Kane; E. J. Mele. Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect. *Physical Review Letters*, 95, (2005).
- [3] Liang Fu; C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review*, 76, (2007).