

Estados de superfície do Bi_2Te_3 - DFT aplicada a isolantes topológicos

Resumo

Além das três grandes classes de materiais, classificados de acordo com a sua estrutura eletrônica: condutores, semicondutores e isolantes, há alguns outros tipos que se destacam pelas suas propriedades peculiares. Uma dessas classes é a de isolantes topológicos (*TI's*). Sua descoberta foi tema do Prêmio Nobel de física em 2016, justificado pelo exótico comportamento de sua superfície e sua relação com o interior (*bulk*) do material. Esses sistemas apresentam propriedades isolantes em seu *bulk* e condutoras na superfície. Isso ocorre pelo forte acoplamento spin-órbita (SOC) dos átomos que os compõem, forçando com que apareça estados de superfície condutores por não se tratar de um isolante trivial. Essa e outras diversas propriedades dos *TI's* os colocam na fronteira dos estudos em matéria condensada pelas diversas possibilidades de aplicações em um futuro próximo, como na spintrônica e na computação quântica. Dessa forma, o presente projeto propõe o estudo do Bi_2Te_3 , um isolante topológico, via métodos de primeiros princípios, mais precisamente via teoria do funcional da densidade (DFT). O interesse está no estudo das aplicações do SOC nas equações da DFT com o intuito de se modelar os estados de superfície desse material, os quais aparecem na forma de cones de Dirac.

1 Introdução

A física da matéria condensada busca explicar os estados existentes da matéria por meio de modelos baseados nas leis que conhecemos da natureza. A ascensão da mecânica quântica permitiu a compreensão das propriedades magnéticas, eletrônicas e até estruturais dos materiais [1], possibilitando o maior conhecimento e consequente aplicações em problemas do cotidiano.

A explicação do magnetismo em materiais, por exemplo, foi obtida através dos conceitos de momento angular orbital dos elétrons [1] e do grau de liberdade interno das partículas previsto pela equação de Dirac, o spin [2, 3]. O momento angular orbital se relaciona aos materiais diamagnéticos,

enquanto que o spin dá origem aos materiais paramagnéticos [1]. É importante ressaltar que ambos os exemplos citados não são considerados materiais magnéticos pois na ausência de campo externo \mathbf{B} não há qualquer tipo de ordenamento dos momentos de dipolo [4]. Sendo assim, dentro da classe de materiais magnéticos pode-se citar os Ferromagnéticos (FM) e Antiferromagnéticos (AFM), ambos possuindo ordenamento intrínseco da projeção do spin [5].

As propriedades eletrônicas em sólidos periódicos tem explicação por meio da teoria de bandas [1]. Ao aplicar o *teorema de Bloch* para potenciais periódicos chega-se naturalmente, através da equação de Schrödinger, nas relações de dispersão ou estrutura de bandas do material [5]. Com isso, os materiais se separam em 3 grandes classes, de acordo com o preenchimento das bandas pelos elétrons: condutores, isolantes e semicondutores. Entretanto, não existem apenas essas três fases eletrônicas da matéria.

Em 2016, os trabalhos de David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane e J. Michael Kosterlitz receberam o Prêmio Nobel de Física por "Descobertas teóricas de transições de fase topológicas e fases topológicas da matéria" [6]. A nova descoberta abriu portas tanto para o estudo teórico de fases topológicas, quanto para as possíveis aplicações desse novo estado da matéria.

O presente trabalho tem foco no estudo de isolantes topológicos ou *Topological Insulators* (*TI's*), sistemas que se mostram isolantes em seu interior (*bulk*) e condutores em sua superfície, carregando os chamados *estados de superfície* [7]. Os estados de superfície para materiais tridimensionais tomam a forma de cones de Dirac, ou autoestados de Hamiltonianas tipo Dirac para férmions sem massa, similares ao modelo tight binding do grafeno [8]. A figura 1 ilustra esses resultados.

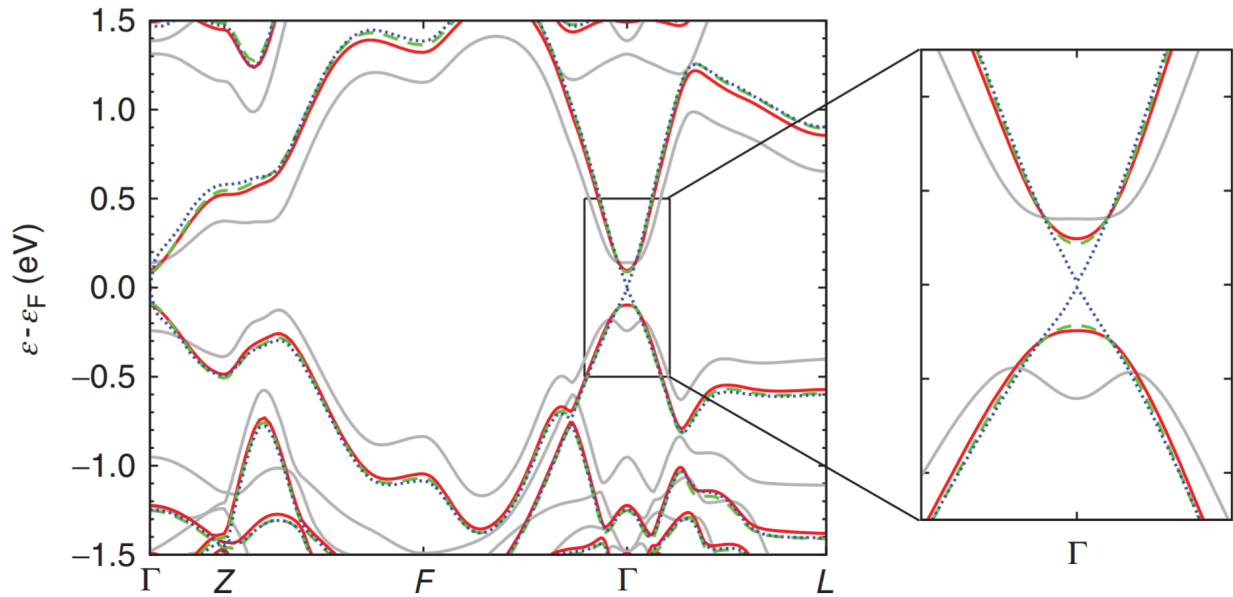


Figura 1: Relação de dispersão calculada via DFT mostrando a presença de estado de superfície em um *TI*. É visível a aparição do cone de Dirac, representado pelo pontilhado em azul. Figura extraída da referência [7].

Esses estados se dão por conta da forte interação entre o momento angular dos elétrons e seu spin, o chamado acoplamento spin-órbita ou *Spin-Orbit Coupling* (SOC) [9]. Dessa forma, para a modelagem de *TI*'s é imprescindível inserir os efeitos do SOC no modelo estudado. *Toy Models* como o SSH (*Su-Schrieffer-Heeger*) nos ajudam a observar também, com o auxílio de um parâmetro denominado *invariante topológico* (ν), que é possível demonstrar a necessidade desses estados de superfície para *TI*'s ($\nu \neq 0$) a partir de deformações contínuas na Hamiltoniana, enquanto que os isolantes comuns da teoria de bandas, ou *isolantes triviais* ($\nu = 0$), não exigem esses estados [10].

Os elétrons na superfície desses materiais apresentam comportamentos exóticos e acredita-se que os isolantes topológicos poderão ser utilizados em spintrônica e na computação quântica [9], o que por si só já é a motivação necessária para se estudar esses sistemas. Um *TI* precisa necessariamente ser composto por átomos pesados já que eles possuem maior efeito de SOC. Sendo assim, forma-se a motivação completa para o estudo do composto Bi_2Te_3 , que apresenta essas características necessárias e promissoras para futuras aplicações das propriedades exóticas de seus estados de

superfície. A estrutura desse sistema é explicitada na figura 2.

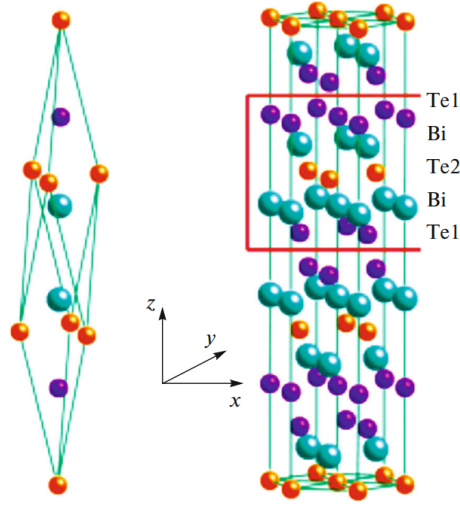


Figura 2: Estrutura cristalina do Bi_2Te_3 . Figura extraída da referência [11]

2 Objetivos

O presente projeto tem como objetivo a modelagem dos estados de superfície do isolante topológico Bi_2Te_3 através de cálculos de primeiros princípios. Em particular utilizaremos a teoria do funcional da densidade (DFT) com o SOC. Assim, não menos importante, objetiva-se a apresentação do acoplamento spin-órbita via primeiros princípios ao discente, e a consequente aparição de cones de Dirac na forma de estados de superfície, caracterizando um TI .

3 Metodologia

Como mencionado anteriormente, será utilizada a DFT para a aplicação dos métodos de primeiros princípios. A principal vantagem da DFT é a sua aplicação em problemas de muitos corpos. Isso porque ela lida muito bem com a multidimensionalidade da função de onda e dos espaços de *Hilbert*, trocando o objeto principal da teoria quântica, a função de onda $\psi(\mathbf{r})$, pela densidade eletrônica $\rho(\mathbf{r})$ [5]. Isso é realizado ao considerar que a função de onda de muitos corpos

é para elétrons não interagentes, transportando essa informação para a Hamiltoniana através de um novo termo chamado de *correlação e troca*. Sendo assim, a teoria permite trocar um objeto $3N$ -dimensional, onde N é o número de partículas, por um problema 3-dimensional.

Através dos teoremas de Hohenberg e Kohn [12], a DFT garante calcular a energia total do sistema, bem como suas principais propriedades, através de funcionais da densidade eletrônica $f[\rho]$ [5]. Com isso, o novo termo é chamado de funcional de correlação e troca, ou *Exchange and Correlation Functional* $E_{XC}[\rho]$. Não se sabe ainda a forma exata desse funcional [13], mas aproximações adequadas para diversos tipos de problema existem e garantem resultados satisfatórios. Destacam-se o LDA (*Linear Density Aproximation*), o GGA (*Generalized Gradient Aproximation*), o LDA/GGA + U (com correção de *Hubbard*), entre outros [5]. No presente trabalho, será realizada uma revisão bibliográfica dos funcionais mais adequados para se descrever propriedades de isolantes topológicos, com o objetivo de aplicá-los ao problema.

Para modelar a interação dos elétrons com os íons é comum a utilização da técnica de *pseudopotenciais*, metodologia natural quando usado o método de expansão em ondas planas (*plane waves expansion*) [5, 7]. Essa aproximação congela os elétrons de caroço em valores de energia constantes, considerando nos cálculos apenas elétrons de valência [5, 13].

A eficácia do método é boa já que grande parte das ligações químicas e interações envolvendo os elétrons acontecem para as partículas eletrônicas em níveis mais superficiais de energia. É no pseudopotencial que os efeitos relativísticos do SOC serão inseridos. Dessa forma, todos os cálculos serão realizados com *full-relativistic pseudopotentials*, com o intuito de se modelar os estados de superfície do Bi_2Te_3 . Uma revisão bibliográfica sobre quais pseudopotenciais são mais adequados para descrever *TI's* também será realizada com a finalidade de se aplicar o com melhor poder descritivo no presente projeto.

Do ponto de vista prático os cálculos via DFT serão realizados utilizando o cluster *Titânio*, disponibilizado na UFABC pela Central Computacional Multiusuário (CCM). A utilização da *Titânio* é imprescindível já que os cálculos exigem computadores de alta performance e um grau

elevado de processamento. Será utilizado o software aberto *Quantum ESPRESSO* [14, 15], já instalado na *Titânio*.

4 Viabilidade da execução do projeto

O presente projeto é viável do ponto de vista metodológico pois a Universidade já disponibiliza o poder de processamento necessário. Com os cálculos realizados nos nós disponíveis na *Titânio*, nenhum recurso adicional é preciso e a obtenção dos resultados esperados e objetivos propostos é perfeitamente viável.

Do ponto de vista teórico, o discente já teve contato com a DFT em duas iniciações científicas anteriormente. Estudos anteriores, tanto na área de sistemas fortemente correlacionados, com a aplicação do funcional GGA+U para descrever propriedades de TMO's, quanto na área de adsorção de H_2 em materiais baseados em grafeno deram base ao discente na DFT. Ambos os trabalhos foram realizados utilizando o software *Quantum ESPRESSO*, o que facilita na viabilidade operacional do projeto.

Ainda no campo teórico, o aluno já está em contato com o tema de isolantes topológicos, realizando estudos individuais e preparatórios para a realização do presente projeto. A execução dessa pesquisa também será importante para o discente, já que o mesmo pretende ingressar no programa de pós-graduação da física no tema proposto aqui, fazendo com que esse projeto tome caráter fundamental em sua formação.

5 Cronograma de atividades

O trabalho será realizado no período de 1 ano, como indica o edital 01/2022 PIBIC. Durante este período, as atividades serão divididas em:

1. Estudo teórico e discussões acerca da física envolvida nos isolantes topológicos;

2. Estudo teórico e discussões acerca da implementação do SOC nas equações da DFT, e a implicação disso na modelagem de isolantes topológicos;
3. Revisão bibliográfica sobre os funcionais e pseudopotenciais mais adequados para a descrição de isolantes topológicos, focando na modelagem do Bi_2Te_3 ;
4. Montagem da estrutura do Bi_2Te_3 ;
5. Cálculo das energias e estrutura de bandas do Bi_2Te_3 sem e com o SOC;
6. Comparação entre as estruturas de bandas obtidas sem considerar o SOC e considerando o SOC.

As tarefas serão dispersas no período de um ano de acordo com a tabela abaixo:

Atividade/Bimestre	1º	2º	3º	4º	5º	6º
1	X	X	X			
2	X	X	X			
3		X	X	X		
4			X			
5			X	X	X	X
6				X	X	X

Tabela 1: Disposição das atividades de maneira bimestral

Bibliografia

- [1] C. Kittel, *Introdução à Física do Estado Sólido*. LTC, 2016.
- [2] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*. Springer, 2014.
- [3] J. J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge, 1985.
- [4] R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*. Elsevier, 1979.
- [5] F. Giustino, *Materials Modelling using Density Functional Theory: Properties and Predictions*. Oxford, 2014.
- [6] J. D. Thouless, M. D. F. Haldane, and M. J. Kosterlitz. (2016) The nobel prize in physics 2016. nobelprize.org. nobel prize outreach ab 2022. [Online]. Available: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2016/summary/>
- [7] F. Ortmann, S. Roche, and S. O. Valenzuela, *Topological Insulators: Fundamentals and Perspectives*. Wiley, 2015.
- [8] L. E. F. F. Torres, S. Roche, and J.-C. Charlier, *Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport*. Cambridge, 2020.
- [9] J. Zhang *et al.*, “Band structure engineering in $(Bi_{1-x}Sb_x)_2Te_3$ ternary topological insulators,” *Nature Communications*, 2011.
- [10] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, *A Short Course on Topological Insulators: Band Structure and Edge States in One and Two Dimensions*. Springer, 2016.
- [11] O. V. Misochko and M. V. Lebedev, “Study of thermal and coherent A_{1g} phonons in bismuth telluride,” *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2017.

-
- [12] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864, 1964.
 - [13] D. Sholl and J. A. Steckel, *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. Wiley, 2009.
 - [14] P. Gianozzi *et al.*, “Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009.
 - [15] P. Gianozzi, M. Cococcioni *et al.*, “Advanced capabilities for materials modelling with quantum espresso,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017.
 - [16] M. Hasan and M. A. Majidi, “Electronic structure of 9 quintuple layers Bi_2Se_3 within density functional theory,” *4th International Symposium on Current Progress in Functional Materials 2019*, 2019.