

Modelos Tight-Binding: Rede de Lieb

Matéria Condensada, 2025.

Aluno: Joana de Medeiros Oliveira Hulse Molinete*

Professor: Felipe Crasto de Lima†

CNPEM - ILUM - Escola de Ciência

1 Introdução

Em materiais bidimensionais, a geometria da rede cristalina desempenha um papel fundamental na determinação da estrutura de bandas eletrônicas. Geometrias não convencionais (como Kagomé, Lieb, Graphynes e Dicalcogenetos de Metais de Transição) podem fazer surgir propriedades eletrônicas incomuns, como supercondutividade, ferromagnetismo, fenômenos de Hall quântico fracionário, entre outros. Esses fenômenos impulsionaram o avanço da física da matéria condensada dedicada ao estudo de materiais com dispersões raras, como as bandas planas *flat bands* e os cones de Dirac.

A rede de Lieb é o análogo 2D da rede tridimensional das perovskitas [1], que pode ser descrita como uma rede quadrada depletada, composta por três sítios distintos na célula unitária, caracterizada por uma estrutura de bandas com cones de Dirac interseptados por uma *flat band*. A coexistência de uma banda totalmente não dispersiva com bandas de dispersão linear está ilustrada na Figura 1c, na qual duas bandas dispersivas se cruzam formando um cone de Dirac no ponto M da primeira zona de Brillouin. A geometria da rede de Lieb está representada na Figura 1a e na Figura 1b.

Na distribuição de preenchimento eletrônico apresentado, a banda inferior é totalmente ocupada, enquanto a banda plana e a banda superior permanecem vazias no ponto de Fermi, resultando em um sistema isolante *gapless* (sem lacunas), onde não tem estados disponíveis exatamente no nível de Fermi devido ao caráter não dispersivo da banda plana. A presença de uma *flat band* está associada ao aparecimento de fenômenos como ordem magnética espontânea [2], efeito Hall quântico [3] e supercondutividade de alta temperatura crítica [4], que são intensificados devido à alta densidade de estados divergente na energia da banda plana, que amplifica o efeito das interações eletrônicas.

A estrutura de bandas da rede de Lieb pode ser descrita pelo modelo *tight-binding*, onde o Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i - t \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{H.c.}) - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{H.c.}) \quad (1)$$

onde ϵ_i representa a energia *on-site* do sítio i , t e t' são os parâmetros de *hopping* entre vizinhos mais próximos e segundos vizinhos. Neste trabalho, levou-se em consideração apenas o termo de primeiros vizinhos ($t' = 0$), visto que as contribuições de segundos vizinhos são desprezíveis.

As ligações importantes para a rede de Lieb são:

*joana24003@ilum.cnpem.br

†felipe.lima@ilum.cnpem.br

- A - B (horizontais);
- A - C (verticais).

Essa padrão é responsável pela interferência destrutiva dos estados de Bloch, que resulta na banda plana característica da rede de Lieb.

O objetivo deste trabalho é investigar como as energias *on-site* influenciam a estrutura eletrônica da rede de Lieb no modelo tight-binding implementado na biblioteca PythTB. Para isso, foram analisadas diferentes configurações de simetria entre os sítios da célula unitária, observando como essas modificações quebram degenerescência, abrem *gaps* e alteram a posição relativa da *flat band*.

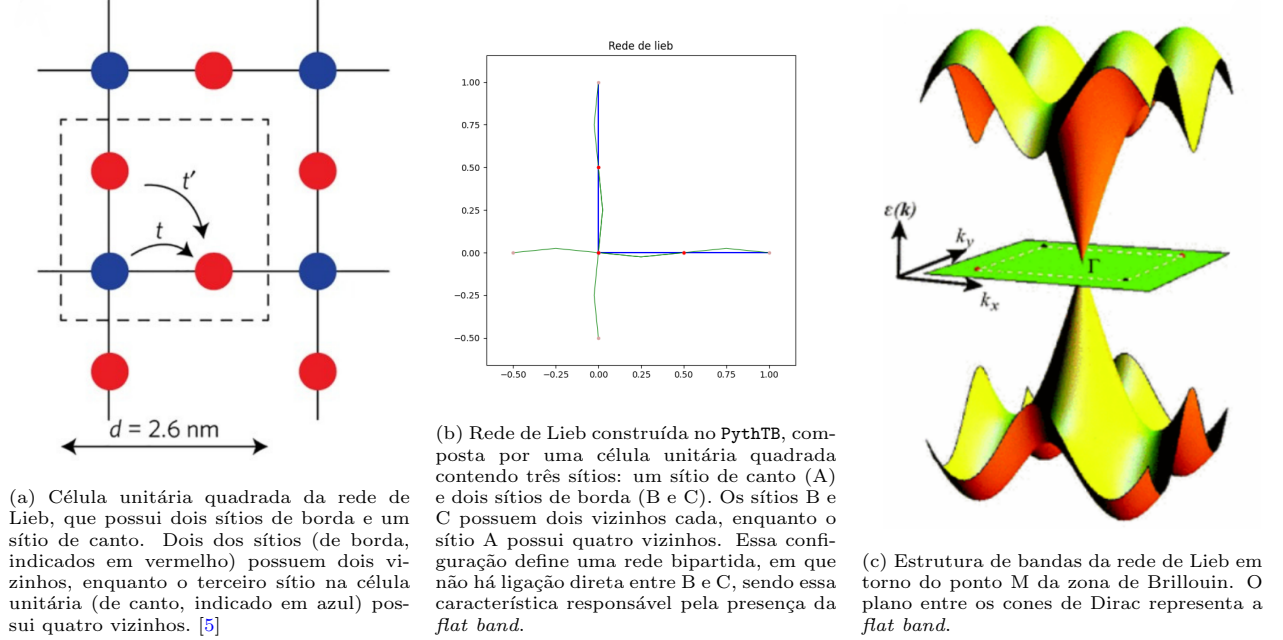


Figura 1: (a) Célula unitária, (b) rede de Lieb e (c) estrutura de bandas correspondentes.

2 Metodologia

O desenvolvimento dos códigos foi realizado utilizando a biblioteca PythTB e pode ser encontrado no [repositório do GitHub](#).

A primeira etapa da implementação consistiu em definir a célula unitária da rede de Lieb, contendo três sítios não equivalentes:

- Sítio A: localizado no canto dos vértices da rede ($[0,0]$);
- Sítio B: localizado no centro da aresta horizontal ($[\frac{1}{2},0]$);
- Sítio C: localizado no centro da aresta vertical ($[0,\frac{1}{2}]$)

As constantes de rede foram normalizadas para $a = 1$, visto que em modelos *tight-binding* as equações não dependem da escala absoluta, já que o modelo é adimensional, e somente as relações relativas entre posições e amplitudes de *hopping* influenciam a estrutura de bandas. A escolha de constantes de rede normalizadas simplifica a implementação no código, reduzindo a expressão dos vetores de onda no espaço recíproco e facilitando a análise visual das bandas.

Os sítios formam uma rede onde cada sítio A está conectado a seus 4 vizinhos (dois B e dois C), e os sítios B e C estão conectados apenas aos sítios A da mesma célula. Essa conectividade é necessária para o aparecimento da *flat band*, que resulta de interferência destrutiva nos caminhos de *hopping*.

Conforme descrito na equação 1, o sistema é caracterizado por energias *on-site* ϵ_i e pela amplitude de *hopping* t , que representa a probabilidade de um elétron “pular” de um sítio para outro. Neste estudo, considerou-se apenas o termo de primeiros vizinhos ($t' = 0$), visto que a interação com segundos vizinhos é irrelevante para a análise nesse caso.

Foram estudadas três configurações distintas de energia *on-site*:

- **Caso simétrico:** $\epsilon_A = \epsilon_B = \epsilon_C = 0$, onde todos os sítios são equivalentes, mantendo-se a simetria total da célula unitária. Esse caso recupera a estrutura típica da rede de Lieb, com banda plana no ponto de Dirac.
- **Casos antissimétricos:** mantendo $\epsilon_A = 0$, variam-se as energias ϵ_B e ϵ_C entre um valor Δ , simulando potenciais locais distintos nos sítios de borda. Esse cenário reproduz fisicamente situações em que diferentes átomos ou adsorbatos ocupam posições B e C, quebrando a simetria da rede.
- **Caso deslocado simetricamente:** $\epsilon_B = \epsilon_C = \Delta$ com $\epsilon_A = 0$. Aqui, apenas o sítio A permanece com energia diferente, preservando a equivalência entre B e C, mas quebrando a simetria em relação ao sítio de canto.

A biblioteca PythTB realiza o cálculo da estrutura de bandas aplicando a transformada de Bloch ao Hamiltoniano, resultando em uma matriz $H(k)$. A diagonalização dessa matriz para cada vetor de onda k ao longo de um caminho de simetria no espaço recíproco, fornece os autovalores de energia.

Foram simulados diferentes valores de Δ para redes antissimétricas, permitindo investigar como a quebra de simetria entre os sítios B e C afeta a estrutura eletrônica do sistema, simulando uma rede moderada e uma fortemente antissimétrica ($\Delta = 0.5$ e $\Delta = 1.0$, respectivamente).

3 Resultados

A rede de Lieb construída é apresentada na Figura 1b. Os pontos vermelhos correspondem aos sítios da célula unitária.

No caso simétrico, como mostrado na Figura 2a, observa-se a presença de uma *flat band* em $E = 0$ característica da rede de Lieb. Essa banda corresponde a estados eletrônicos localizados nos *sublattices* B e C, enquanto as bandas superior e inferior são dispersivas (valência e condução). A banda plana toca ambas as bandas dispersivas no ponto M, formando um ponto de Dirac degenerado.

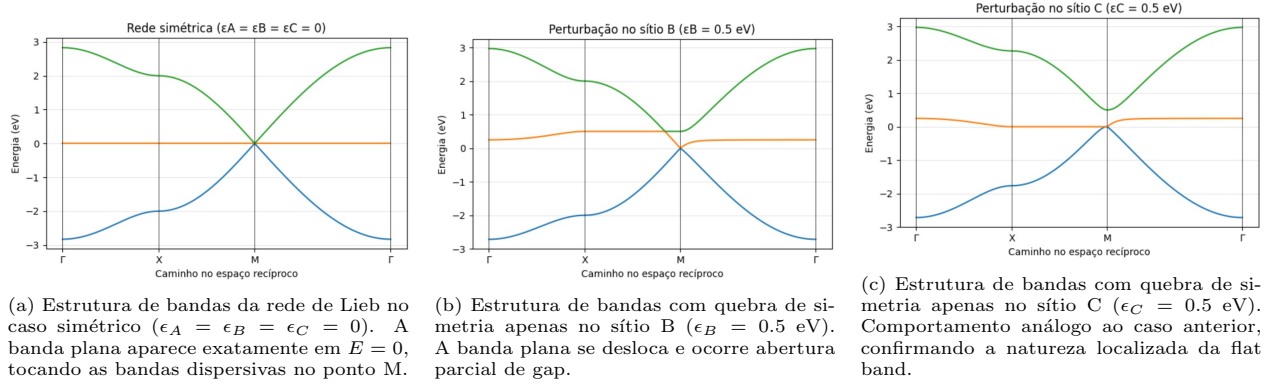


Figura 2: (a) Célula unitária, (b) rede de Lieb e (c) estrutura de bandas correspondentes.

Ao introduzir uma diferença de energia $\Delta = 0.5\text{eV}$ em apenas um dos sítios de borda (B ou C), quebra-se a equivalência entre os *sublattices* laterais. Nesse caso, parte da degenerescência se perde e a banda plana se desloca do centro, iniciando uma abertura parcial de gap entre as bandas de condução e valência, como mostrado na Figura 2b e Figura 2c. Alterações nos sítios de borda alteram diretamente a energia da banda plana, enquanto a banda associada ao sítio A é menos afetada.

No caso em que as energias dos sítios B e C são variadas de forma equivalente ($\epsilon_B = \epsilon_C = 0.5$ eV, mantendo $\epsilon_A = 0$), observamos uma quebra de simetria entre o sítio A e os sítios de borda, como observado na Figura 3. A banda plana se separa completamente das outras e o gap de energia aumenta, indicando uma transição de comportamento semimetálico do sistema para isolante, causado pela perda de contato entre as bandas no ponto M. Ao aumentar ainda mais a diferença de energia, como no exemplo onde $\epsilon_B = \epsilon_C = 1$ eV, notamos um maior afastamento entre as bandas, como demonstrado na Figura 4, indicando a eliminação da degenerescência no ponto de Dirac.

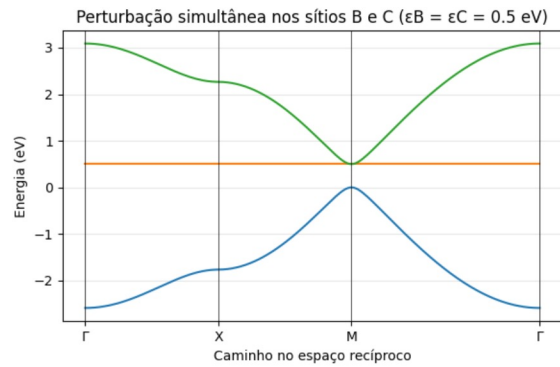


Figura 3: Estrutura de bandas para $\Delta = 0.5\text{eV}$. Surge um *gap* de energia, separando as bandas de condução e valência.

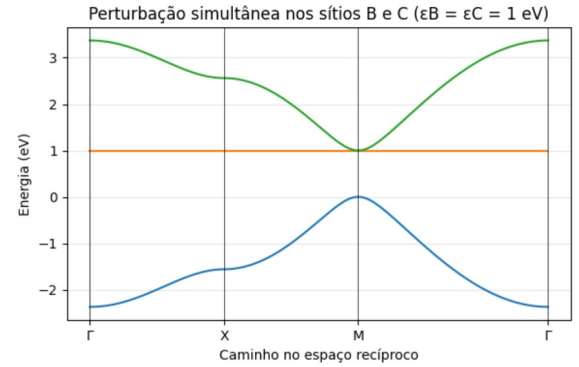


Figura 4: Estrutura de bandas para $\Delta = 1.0\text{eV}$. O aumento de Δ aumenta o gap entre as bandas e acaba com a degenerescência característica do ponto de Dirac.

4 Conclusão

A análise da estrutura eletrônica da rede de Lieb demonstra que a simetria entre os sítios B e C é fundamental para a existência da *flat band* e do ponto de Dirac característico dessa rede cristalina. Quando as energias *on-site* são iguais ($\Delta = 0$), a interferência destrutiva entre as amplitudes de *hopping* para os sítios B e C ultrapassa a propagação eletrônica, dando origem uma banda plana. Essa banda corresponde a

estados eletrônicos localizados, sem dispersão, característicos de um comportamento semimetálico.

A *flat band* apresenta velocidade nula, pois

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$$

o que implica que os elétrons nela tem mobilidade praticamente nula. Em termos de massa efetiva, que é dada por

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

a curvatura nula da banda implica $m \rightarrow \infty$, indicando que os elétrons nessa banda comportam-se como partículas extremamente pesadas, praticamente imobilizadas, comportamento observado para estados fortemente localizados por interferência.

Ao introduzir diferenças de energia *on-site* (variando Δ) nos sítios B e C, a simetria é quebrada, perdendo a interferência da *flat band* antes presente. A degenerescência no ponto M é eliminada e o sistema passa a ter um *gap* de energia caracterizando uma transição do material semimetálico para uma fase isolante.

Portanto, nota-se que o parâmetro Δ atua como um mecanismo de controle externo que permite modificar o comportamento eletrônico do sistema, de condutor para isolante.

Esses resultados evidenciam como o ajuste de energias *on-site* em materiais artificiais permite controlar a delocalização ou localização eletrônica, a abertura de gaps e a massa efetiva de elétrons, que apresentam propriedades importantes para aplicações em dispositivos eletrônicos, fotônicos e topológicos baseados na arquitetura da rede de Lieb.

Referências

- [1] C. Weeks and M. Franz. Topological insulators on the lieb and perovskite lattices. *Physical Review B*, 82(8), August 2010.
- [2] Elliott H. Lieb. Two theorems on the hubbard model. *Physical Review Letters*, 62(10):1201–1204, March 1989.
- [3] Evelyn Tang, Jia-Wei Mei, and Xiao-Gang Wen. High-temperature fractional quantum hall states. *Physical Review Letters*, 106(23), June 2011.
- [4] N. B. Kopnin, T. T. Heikkilä, and G. E. Volovik. High-temperature surface superconductivity in topological flat-band systems. *Physical Review B*, 83(22), June 2011.
- [5] Marlou R. Slot, Thomas S. Gardenier, Peter H. Jacobse, Guido C. P. van Miert, Sander N. Kempkes, Stephan J. M. Zevenhuizen, Cristiane Morais Smith, Daniel Vanmaekelbergh, and Ingmar Swart. Experimental realization and characterization of an electronic lieb lattice. *Nature Physics*, 13(7):672–676, April 2017.