

JORNADA PCI

APRESENTAÇÃO DE PROJETO – 2021/2022

BOLSISTA: TIAGO PEREIRA DOURADO
SUPERVISOR: TOBIAS MICKLITZ
MODALIDADE: PCI-DC

Investigação de fases anisotrópicas de sistemas Hall quânticos em estruturas de grafeno

1. INTRODUÇÃO

Motivado por recentes resultados experimentais, que destacam uma transição de fase quântica nemática como uma nova classe de estado fundamental de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados em estruturas de grafeno [1], este projeto tem como objetivo desenvolver uma teoria efetiva a uma temperatura T nula e finita para descrever esse comportamento exótico.

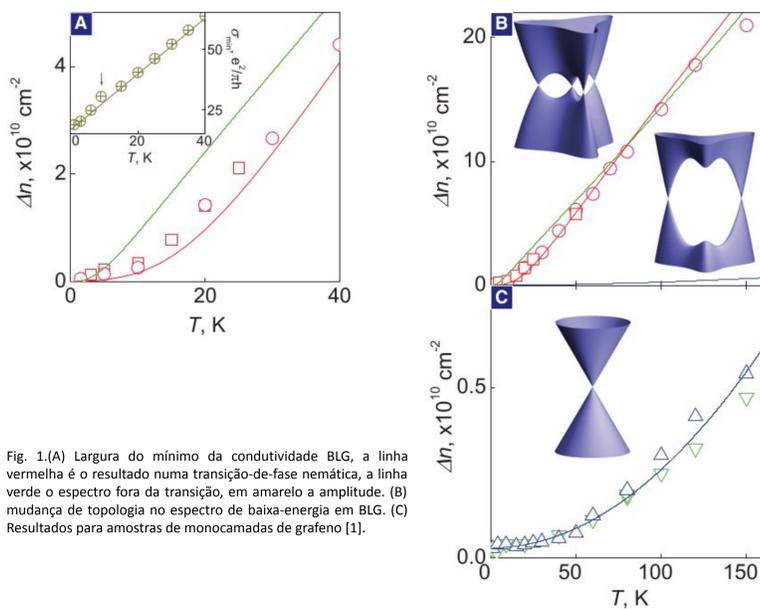


Fig. 1.(A) Largura do mínimo da condutividade BLG, a linha vermelha é o resultado numa transição-de-fase nemática, a linha verde o espectro fora da transição, em amarelo a amplitude. (B) mudança de topologia no espectro de baixa-energia em BLG. (C) Resultados para amostras de monocamadas de grafeno [1].

2. FASE NEMÁTICA EM BICAMADAS DE GRAFENO

Na Fig.1 apresenta-se medidas experimentais da largura e amplitude do mínimo da condutividade como função da temperatura para diferentes amostras de mono e bicamadas de grafeno. Percebe-se na Fig.1(B) uma mudança na topologia da estrutura de banda a baixas-energias em amostras de BLG (do inglês *bilayer-graphene*) que caracteriza uma transição-de-fase nemática. É sabido que isto é compatível com uma quebra espontânea de simetria de rotação da rede, que nesse caso ocorre em $C_6 \rightarrow C_2$ [4][5]. De fato, esta fase anisotrópica é caracterizada por ser invariante translacional e variante rotacional [2].

Assim, tomando um hamiltoniano *tight-binding* para elétrons numa rede *honeycomb* em BLG do tipo:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle \mathbf{r}\mathbf{r}' \rangle} [t_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) c_{\sigma}(\mathbf{r}') + \text{H.c.}] + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \delta \hat{n}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta \hat{n}(\mathbf{r}')$$

E encontrando os auto-valores de energia, tem-se a formação de curvas de dispersão parabólica, como mostrado na Fig.2, as quatro bandas em vermelho representam a dispersão no estado nemático. Tal estado surge devido a quebra espontânea de simetria de rotação e também pela competição de interações coulombianas, tendo como principal efeito o transporte anisotrópico em amostras de alta mobilidade eletrônica [3].

Podemos caracterizar essa quebra de simetria por um parâmetro de ordem do tipo complexo

$$\Delta_{nem}(\mathbf{r}) \equiv \Delta_x(\mathbf{r}) + i\Delta_y(\mathbf{r})$$

cujas componentes são

$$\Delta_x(\mathbf{r}) = \left\langle a_{1\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[b_{2\sigma}(\mathbf{r} - \hat{x}) - \frac{1}{2} \sum_{s=\pm} b_{2\sigma} \left(\mathbf{r} + \frac{a}{2} \hat{x} + s \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right) \right] + \text{H.c.} \right\rangle,$$

$$\Delta_y(\mathbf{r}) = \left\langle a_{1\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \sum_{s=\pm} b_{2\sigma} \left(\mathbf{r} + \frac{a}{2} \hat{x} + s \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right) \right] + \text{H.c.} \right\rangle.$$

e formam a representação bidimensional do grupo hexagonal. Para verificar a ordem nemática basta tomar a invariância do hamiltoniano de baixa-energia para uma rotação arbitrária α , ou seja,

$$U^{\dagger}(\alpha) H U(\alpha) = H$$

mas sobre uma rotação α encontramos

$$\Delta_{nem}(\mathbf{r}) \rightarrow \Delta_{nem}(\mathbf{r}) e^{2i\alpha}$$

Isto mostra que o parâmetro de ordem é par para rotações de π e ímpar para $\pi/2$, que o faz nemático.

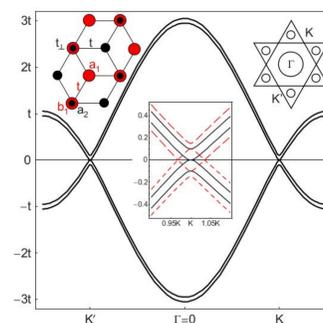


Fig.2. Dispersão parabólica para um sistema de bicamadas de grafeno. No canto superior esquerdo tem-se um modelo de célula unitária do tipo *honeycomb*. Já no direito tem-se um esquema de contornos da energia resultante da dispersão. Na figura principal, a dispersão de energia para as quatro bandas ao longo de um corte vertical na zona de Brillouin. A separação de banda em K e K' ocorre em $\Gamma=0$. No meio, medida da dispersão no ponto Γ e em vermelho a dispersão no estado nemático [4].

3. MEDELO E PERSPECTIVAS

O medelo estudado é de um sistema de BLG submetido a campos magnéticos fortes. Como entendemos a quebra de simetria e o parâmetro de ordem nemático, por se tratar de um problema de muitos-corpos faremos uso da aproximação de Hartree-Fock. Portanto, os passos seguintes são:

- Cálculo do potencial efetivo na aproximação Hartree-Fock;
- Desenvolver uma teoria efetiva para investigar a existência da fase nemática e de uma transição de fase quântica isotrópica-nemática, de modo similar a referência [6]. Para isso, é importante analisar flutuações além da aproximação Hartree-Fock;
- Serão estudados os efeitos de temperatura na fase nemática.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos, ao Programa de Capacitação Institucional-PCI do CBPF e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq-Brasil, pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS:

- [1] A. S. Mayorov, et al., *Science*, v.333, 860 (2011).
- [2] S. A. Kivelson, E. Fradkin, V. J. Emery, *Nature* 393, 550 (1998).
- [3] E. Fradkin, S. A. Kivelson, E. Manousakis, K. Nho, *Phys. Rev. Lett.* 84, n.9, 1982 (2000).
- [4] O. Vafek, K. Yang, *Phys. Rev. B* 81, 041401 (2010).
- [5] Y. Lemonik, I. L. Aleiner, C. Toke, V. I. Falko, *Phys. Rev. B* 82, 201408 (2010).
- [6] Daniel G. Barci, Daniel A. Stariolo, *Physical Review Letters* 98, 200604, (2007).