

Bruno Messias Farias de Resende

Modelos Matemáticos para Isolantes Topológicos em Redes

Uberlândia

2017

Bruno Messias Farias de Resende

Modelos Matemáticos para Isolantes Topológicos em Redes

Disseratação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Física.

Universidade Federal de Uberlândia
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Edson Vernek
Coorientador: Prof. Dr. Gerson Ferreira Junior

Uberlândia
2017

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

R433m
2017 Resende, Bruno Messias Farias de, 1990-
Modelos matemáticos para isolantes topológicos em redes / Bruno
Messias Farias de Resende. - 2017.
103 f. : il.

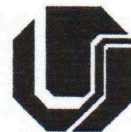
Orientador: Edson Vernek.
Coorientador: Gerson Ferreira Junior.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Programa de Pós-Graduação em Física.
Disponível em: <http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2018.90>
Inclui bibliografia.

1. Física - Teses. 2. Quiralidade - Teses. 3. Fermions - Teses. 4.
Simetria (Física) - Teses. I. Vernek, Edson. II. Ferreira Junior, Gerson.
III. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em
Física. IV. Título.

CDU: 53



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



Bruno Messias Farias de Resende

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, do Instituto de Física, da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Uberlândia, 30 de Outubro de 2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Edson vernek
Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Prof. Dr. Gerson Ferreira Junior
Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Prof. Dr. Ginetom Souza Diniz
Universidade Federal de Goiás - UFG

Agradecimentos

- Ao conjunto de eventos que me permitiram chegar até o presente momento da minha vida.
- A minha namorada Yara, a sua mãe Ione Lisboa e ao seu irmão Juan Carlos por todo o apoio durante esses anos.
- Aos meus orientadores, Prof. Edson Vernek e Prof. Gerson Ferreira pela confiança depositada e por todo o auxílio prestado sem o qual o presente trabalho não seria possível.
- A minha mãe.
- Ao grande amigo de longa data João Lucas, vulgo Tico, pelo apoio e companhia inenarrável.
- Agradeço ao meu amigo Gil Souza pelas valiosas e motivadoras discussões.
- Ao professor Ademir pelos ensinamentos.
- A todos os meus colegas do Grupo de Nanociências.
- A Allan Daemon por sua amizade e pelo aprendizado.
- Aos meus outros Amigos da computação Bruno Dantas e Luiz Gustavo pelas discussões quase sempre cômicas.
- Aos amigos de longa data Marcos, Alexander, Ciro e Robert por toda a trajetória de amizade nesses anos.
- Ao amigo Régis Maicon pela tolerância.
- As agências de fomento: CNPQ e CAPES, pelo apoio financeiro.

Resumo

Sistemas descritos por Hamiltonianos do tipo Dirac são ubíquos. Surgindo em materiais como grafeno, isolantes topológicos ou recentemente nos semimetais de Weyl. Devido ao interesse tecnológico e acadêmico desses materiais, caracterizar suas propriedades é essencial. Uma abordagem matemática para efetuar o estudo de tais sistemas consiste em discretizar o Hamiltoniano no espaço das posições, mas tal abordagem esbarra no problema da duplicação de férmions. De forma breve, esse problema atesta pela impossibilidade de simulação de férmions livres não massivos em uma rede discreta sem que alguma simetria ou propriedade da Hamiltoniana seja quebrada. No presente trabalho demonstramos que tal problemática não deveria ser causa de preocupação para o estudo de sistemas na matéria condensada, pois podemos utilizar a simetria quebrada para confinar os portadores de carga no sistema para remover os estados duplicados. Tal remoção é conseguida com a inserção de um termo quadrático em relação ao momento, conhecido como massa de Wilson. Nesse sentido podemos inserir um termo de Wilson com quebra de simetria necessária para o confinamento, tornando o problema de duplicação de férmions irrelevante, essa relação não tinha sido notada até o presente trabalho, e recentes resultados na literatura erroneamente atribuem a massa de Wilson com a quebra de uma simetria de reversão temporal, o que não necessariamente é verdade. Nesse contexto além de abordar essa relação a presente dissertação objetiva também elucidar alguns mal entendimentos a respeito das massas de Wilson, quiralidade e outras simetrias. Para validar nosso argumento central estudamos diversos sistemas de interesse e comparamos com os resultados na literatura.

Palavras-Chave: isolantes topológicos; problema da duplicação de fermions; redes; quebras de simetria; quiralidade; Dirac; massas de Wilson

Abstract

Hamiltonians of Dirac type are ubiquitous. Appearing in materials such as graphene, topological insulators or recently in the Weyl semimetals. Due to the technological and academic interest of these materials, characterizing their properties is essential. A mathematical approach to study these systems consists of discretizing the Hamiltonian in the space of positions, but such an approach causes the problem of doubling fermions (FDP). We demonstrate the FDP should not be a cause of concern for the study of confined systems because we can use the broken symmetry to confine in the system to remove the duplicate states. Such removal is achieved by inserting a quadratic term with respect to the moment, known as the Wilson mass. In this sense we can insert a Wilson term with symmetry breaking required for confinement, rendering the fermion duplication problem irrelevant, this relationship had not been noticed until the present work, and recent literature results erroneously attribute Wilson's mass to break of a symmetry of time reversal, which is not necessarily true. In this context, in addition to addressing this relationship, the present dissertation also aims to elucidate some misconceptions regarding the Wilson masses, chirality and other symmetries. In order to validate our central argument we study several systems of interest and compare it with the results in the literature.

Keywords: topological insulators; fermion doubling problem; lattice; symmetry breaking; chirality.

Lista de abreviaturas e siglas

Ref.	Referência
Eq.	Equação
Fig.	Figura
TRS	Simetria de Reversão Temporal
TI	Isolante Topológico
QCD	Cromodinâmica Quântica
PDF	Problema da Duplicação de Férmions
DFT	Teoria do Funcional da Densidade

Lista de ilustrações

Figura 1 – Teorias em redes.	13
Figura 2 – Representação esquemática do experimento realizado por Cho et al..	15
Figura 3 – Rede Discreta e Teoria de Grupos	17
Figura 4 – Solução de autovalores dada a condição de Bloch	20
Figura 5 – Grupo de homotopia fundamental e Loops na Esfera.	27
Figura 6 – Mapeamento da Zona de Brillouin como Torus	29
Figura 7 – Exemplificação do conceito de maços de fibra.	31
Figura 8 – Exemplificação do espaço projetivo de Hilbert e evolução de um sistema em um espaço de Hilbert.	34
Figura 9 – Representação da função de onda na interface entre um isolante de Chern e um isolante trivial	36
Figura 10 – Transformação classe de simetria $AIII$ para outra $AIII$	40
Figura 11 – Representação do sistema de coordenadas e do sistema.	41
Figura 12 – Gráfico de Energia para um rede discreta bidimensional em função de k_x e k_y	50
Figura 13 – Estrutura de bandas para nanofita com potencial localizado. Comparação com resultados da literatura. da literatura.	52
Figura 14 – Estrutura de Bandas utilizando o método de confinamento em k	53
Figura 15 – Representação esquemática do efeito da adição da massa de Wilson para o caso unidimensional de uma cadeia com periodicidade a	55
Figura 16 – Comparação do custo computacional entre o formalismo utilizado pelo kwant e o formalismo de funções de Green recursivas.	58
Figura 17 – Comparação entre quebras de simetria ocasionada por diferentes tipos de massas de Wilson.	62
Figura 18 – Comparação entre quebras de simetria ocasionada por diferentes tipos de massas de Wilson.	63
Figura 19 – Densidade de estados para o disco	64
Figura 20 – Estrutura de Bandas para semimetais de Weyl com o problema da duplicação de férmions.	65
Figura 21 – Estrutura de Bandas para semimetais de Weyl sem o problema da duplicação de férmions.	66
Figura 22 – Estados propagantes em um semimetal de Weyl sujeito a tensão	67
Figura 23 – Comparação de estrutura de bandas e relação com o termo Δ	68
Figura 24 – Estrutura de bandas extraída do trabalho de (Shan, Lu e Shen, 2010)	68
Figura 25 – Representação esquemática de um sistema 3D finito em z formado por um isolante topológico em contato com um metal.	69
Figura 26 – Demonstração da causa da assimetria no espectro do isolante topológico	70

Figura 27 – Condutância em função do potencial de porta e do acoplamento.	71
Figura 28 – Condutância em função do potencial de porta da matriz de quebra de simetria e do acoplamento entre os reservatórios.	72
Figura 29 – Condutância para nanofita em função do potencial de porta e da energia dos modos propagantes	72
Figura 30 – Comparação com adição termo de Wilson e dimensão extra com resultado sem termo de Wilson.	74
Figura 31 – Potencial da impureza utilizado para gerar as figuras 33 e 30.	74
Figura 32 – Potencial da impureza utilizado para gerar a figura 36.	75
Figura 33 – Comparação com adição termo de Wilson e dimensão extra com resultado de Seshadri e Sen para k pequeno.	76
Figura 34 – Estrutura de bandas para o metal que foi acoplado nos isolantes topológicos.	76
Figura 35 – Correntes em uma nanofita dopada com uma impureza(figura (31) potencial estreito). Reservatório metálico e nanofita é um isolante topológico.	77
Figura 36 – Correntes em uma nanofita dopada com uma impureza (figura (36) potencial largo). Reservatório metálico e nanofita é um isolante topológico.	78
Figura 37 – Registro de tecnologia social.	84

Lista de tabelas

Tabela 1 – Parâmetros para sistema em forma de disco com ausência de campo elétrico.	62
Tabela 2 – Parâmetros para sistema em forma de disco com ausência de campo elétrico e termo de acoplamento entre superfícies.	63
Tabela 3 – Parâmetros para um semimetal de Weyl sujeito a tensão.	67
Tabela 4 – Parâmetros utilizados para simulação do sistema 3D e posteriormente extração dos termos de acoplamento do Hamiltoniano.	69
Tabela 5 – Parâmetros extraídos via DFT para o hamiltoniano do Bi_2Se_3	70
Tabela 6 – Parâmetros extraídos via DFT para o hamiltoniano do $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$	71
Tabela 7 – Parâmetros extraídos do trabalho de (Seshadri e Sen, 2014)	73

Sumário

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	Objetivos e Desafios da Pesquisa	15
1.2	Hipótese	15
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E METODOLOGIAS	16
2.1	Simetrias na Física	16
2.1.1	Teoria de Grupos	16
2.1.2	Teoria de Bandas não-topológica	18
2.1.3	Quebras de Simetria	21
2.2	Topologia	24
2.2.1	Invariantes Topológicos	26
2.2.1.1	Grupos de homotopia	26
2.2.1.2	Teorema de Poincaré-Hopf	27
2.3	Teoria de Bandas Topológica	28
2.3.1	A zona de Brillouin é sempre um Torus	28
2.3.2	Espaços Projetivos	29
2.3.3	Maços de Fibras	30
2.3.3.1	Tipos de fibrados	31
2.3.4	Isolantes na Iniguagem de Fibrados de Bloch	32
2.3.4.1	Modelo de dois níveis	32
2.3.4.2	Fases de Anandan e Berry	33
2.3.4.3	Número de Chern	34
2.3.4.4	Estados metálicos na superfície	34
2.4	Simetrias e Isolantes topológicos	36
2.4.1	Simetria de Reversão Temporal	37
2.4.1.1	Simetria de Reversão Temporal em Mecânica Quântica	37
2.4.1.2	Simetria de Reversão Temporal e Espectro	38
2.4.2	Simetria de Subrede, Quiral	38
2.5	Modelo Efetivo	41
2.5.1	Condições de Contorno	43
2.5.1.1	Vizinhanças de $z = 0$	43
2.5.1.2	Vizinhanças de $z = l$	44
2.5.1.3	Estudando caso semi-infinito	44
2.5.2	Condições de Contorno e equações de Dirac.	47
2.5.2.1	Partícula relativística em uma caixa unidimensional.	47

2.5.2.2	Uma tentativa de solução com a condição de contorno errada.	48
2.6	Discretização e problema da duplicação de fermions	49
2.6.1	O teorema de Nielsen-Ninomiya	50
2.7	Contornando o problema da duplicação de fermions	51
2.7.1	Potenciais localizados	52
2.7.2	Massas de Wilson	53
2.8	Implementações numéricas	55
2.8.1	Funções de Green	55
2.8.2	Matriz de Espalhamento & Kwant	56
2.8.2.1	Formalismo de Landauer-Buttiker	57
2.8.2.2	Propriedades locais	58
2.9	Tecnologias utilizadas	58
3	RESULTADOS	60
3.1	Modelo efetivo: Massa de Wilson, Simetrias e PDF	60
3.1.1	TRS e Quiralidade	60
3.2	Relação entre acoplamento da superfície e termo de Wilson	67
3.3	Modelo Efetivo: termo de assimetria, campo elétrico	69
3.4	Possíveis estados Kondo em isolantes topológicos.	70
3.5	Modelo efetivo: aplicação em sistemas $2D$ com ou sem impurezas.	73
3.5.1	Transporte eletrônico: comparação entre os modelos.	75
4	CONCLUSÕES	79
5	ANEXOS	80
5.1	Simetria Quiral	80
5.1.1	Quiralidade e modelo efetivo	80
5.1.1.1	Conservação de correntes	81
5.1.1.2	Operadores	82
5.1.1.3	Quebra de simetria quiral	82
5.2	Produção: pesquisa & extensão	84
	REFERÊNCIAS	97

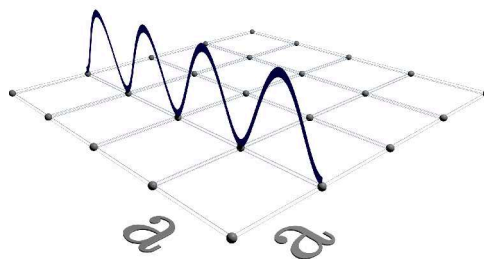
1 Introdução

No célebre livro *The Universe in a helium droplet* Volovik discorre sobre como fenômenos presentes na cosmologia e física de altas energias possuem análogos na matéria condensada. Dessa maneira um físico de partículas ou cosmólogo pode investigar fenômenos que vão desde a escala de buracos negros até as diminutas partículas quânticas em um laboratório com hélio superfluido. Convém ressaltar que essa ideia não é nova. Podemos citar como exemplo a formulação matemática do Bóson de Higgs baseou-se nos trabalhos de Anderson e seu mecanismo de localização (Anderson, 1963) .

Contudo a matéria condensada não é um subconjunto da física de altas energias ou cosmologia. Na verdade é interessante notar que a matéria condensada fornece uma liberdade maior para físicos experimentais e teóricos, permitindo os mesmos criarem seus próprios “universos” com novas simetrias, ou com ausência de algumas que estão presentes no vácuo entre as estrelas. Nesse contexto, convém ressaltar a recente discussão sobre a possibilidade de férmions de Majorana serem detectados em sistemas complexos envolvendo supercondutores, tais férmions foram propostos no contexto de física de partículas em meados do início do século passado, mas a recente literatura científica vem indicando que tais férmions talvez possam ser detectados primeiramente em um experimento de matéria condensada (Pawlak et al., 2015) do que em um grande colisor de Hádrons.

Neste contexto o presente trabalho busca descrever interfaces entre isolantes com diferentes topologias utilizando equações e métodos análogos àqueles utilizados em física de partículas. Isso é, como podemos modelar de forma precisa fenômenos descritos por equações cujo domínio é representado por variáveis contínuas em um espaço discreto.

Figura 1 – Teorias em redes.



Fonte: Próprio autor.

Em uma teoria quântica em um espaço discreto (rede) existe um comprimento de onda mínimo dado pelo espaçamento entre pontos na rede, $\lambda \sim a$, o que implica, devido ao princípio de incerteza em um momento de onda máximo, $p \sim \frac{1}{a}$.

Nesse sentido, uma teoria de rede para mecânica quântica encontra desafios de ordem

conceitual. Com desafios em relação a ferramenta matemática é melhor dizer o seguinte: como modelar uma teoria quântica de rede que no limite contínuo retorne os resultados contínuos? A pergunta pode parecer estranha, isto é, a teoria contínua é o modelo correto enquanto a teoria discreta é apenas uma aproximação para permitir que métodos computacionais sejam utilizados na física de altas energias? A resposta é sutil, e depende da crença de que nosso universo tenha uma digitalidade ou não. Se o leitor acredita que a resposta é sim então ele deve compreender que devemos ser capazes de a partir de uma teoria discreta em rede tenhamos os mesmos resultados que o modelo contínuo. Isto é, em uma teoria discreta que utiliza elementos finitos para definir derivadas e somatórios para integrais devemos obter o mesmo resultado que o modelo que utiliza das derivadas usuais a medida que o parâmetro de rede, a , torna-se muito menor se comparando com os outros elementos da equação (Creutz, 2014) .

Ao longo deste trabalho mostraremos resultados e teoremas já presentes na literatura mostrando o quão não trivial essa tarefa é para o caso relativístico. Citamos por exemplo o problema de duplicação de férmions (que é um dos focos principais desta dissertação).

No presente trabalho, ao efetuar o estudo de isolantes topológicos 3D notamos que uma dessas propriedades não é respeitada no caso discreto, mas como dito em um parágrafo anterior o leitor deve tomar o cuidado para não fazer um mapeamento direto entre física de partículas e matéria condensada, pois como será mostrado em seções posteriores essa propriedade que não é respeitada no caso discreto também não é respeitada no modelo contínuo do isolante topológico.

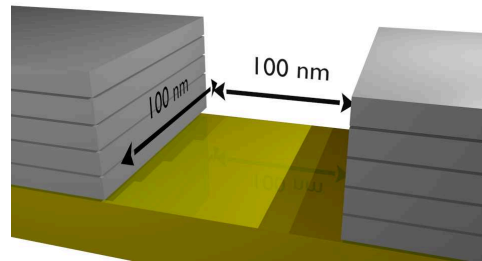
Em termos práticos e tecnológicos essa pesquisa objetiva fornecer um ferramental matemático para que simulações de Isolantes Topológicos e demais hamiltonianos do tipo Dirac possam ser simulados computacionalmente utilizando técnicas de discretização. A importância desses materiais para sociedade como um todo pode ser argumentada pelo prêmio Nobel de 2016 que foi recebido por Michael Kosterlitz, David J. Thouless e Duncan Haldane. Tais cientistas foram os responsáveis por desenvolverem o arcabouço teórico da década de 80 onde os mesmos descobriram fenomenologias que não poderiam ser descritas apenas por quebras de simetria, esses cientistas descobriram fenômenos em que defeitos e caráter topológicos têm o papel principal (The Royal Swedish Academy of Sciences, 2016) . A importância tecnológica dos isolantes topológicos é destacada quando pensamos na possibilidade da construção de computadores quânticos, pois um grande problema de se construir computadores quânticos é como manter a decoerência controlada¹ a medida que um estado quântico se propaga por um computador quântico, isso foi apontado por (Unruh, 1995) . Em meados de 1997 Alexei Kitaev (Ogburn e Preskill, 1999) sugere que a coerência pode ser mantida utilizando o paradigma de computadores quânticos topológicos.

¹ A decoerência é o mecanismo pelo qual um sistema quântico perde informação para o ambiente

1.1 Objetivos e Desafios da Pesquisa

O objetivo inicial da pesquisa foi estudar e desenvolver modelos matemáticos que poderiam descrever corretamente o experimento realizado por (Cho et al., 2016). No referido experimento os pesquisadores observaram que a condutância através de um sistema composto por um isolante topológico 3D (representado esquematicamente na figura 2) exibe um comportamento em função da temperatura e campo magnético que se assemelha ao comportamento de um sistema onde o fenômeno Kondo² encontra-se presente.

Figura 2 – Representação esquemática do experimento realizado por Cho et al..



Fonte: Próprio autor.

Onde um metal (cinza) se acopla a uma isolante topológico 3D (dourado).

Para elucidar se o efeito Kondo poderia ser observado no referido experimento torna-se necessário desenvolver modelos matemáticos que possam descrever o mesmo. Para alcançar tal objetivo torna-se necessário satisfazer os seguintes objetivos específicos:

1.2 Hipótese

É possível formular um modelo discreto para isolantes topológicos 3D que corrobore com resultados experimentais presentes na literatura, além de não violar nenhuma propriedade relevante do sistema sendo que tal modelo seja consistente com teoremas já demonstrados de topologia.

² O leitor que não possuir conhecimento sobre esse fenômeno pode consultar a vasta literatura sobre o tema Kouwenhoven e Glazman, Goldhaber-Gordon et al., Cronenwett, Oosterkamp e Kouwenhoven).

2 Fundamentação teórica e Metodologias

2.1 Simetrias na Física

Ao rotacionar uma esfera perfeita em torno de qualquer eixo que passa pelo seu centro a situação visual é a mesma, tal que um observador não pode distinguir a situação da esfera não rotacionada da esfera rotacionada. A operação de rotação da esfera é enquadrada no que é chamado conjunto de operações de simetria da esfera. Como dito por (Feynman, 2011). Quando observamos estrelas, vegetais, e diversos outros materiais e objetos notamos padrões de simetria, tal que devido aos mecanismos de evolução os humanos sentem-se mais confortáveis com objetos e situações que exibam padrões de simetria. Dessa forma, como dito por Feynman, humanos podem identificar facilmente padrões de simetria em uma flor ou abelha, mas esses objetos ainda estão longe de possuir simetrias tão próximas da perfeição ou da fundamentalidade como aquelas encontradas em estruturas cristalinas. Tais simetrias são de fundamental importância para a fenomenologia dos isolantes topológicos, mas antes de abordar as mesmas torna-se necessário compreender de forma rigorosa o conceito de simetria o que é conseguido através do estudo da estrutura matemática conhecida como grupos.

2.1.1 Teoria de Grupos

Definição 1 Segundo (Joshi, 2008) Um grupo é um conjunto G equipado com uma operação binária, \bullet , tal que para uma tupla de elementos (a, b) a operação binária $a \bullet b$ implica em um mapeamento no próprio conjunto G ,

$$(a, b) \mapsto a \bullet b : G \times G \rightarrow G$$

satisfazendo as seguintes condições

A operação binária é associativa. $\forall a, b, c \in G$,

$$(a \bullet b) \bullet c = a \bullet (b \bullet c)$$

Existe um elemento neutro. $\exists e \in G$ tal que

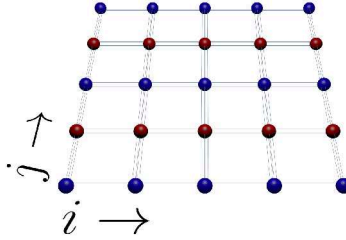
$$a \bullet e = a = e \bullet a, \quad \forall a \in G$$

Existe o Inverso. Para cada $a \in G \exists a' \in G$ tal que

$$a \bullet a' = a' \bullet a = e$$

Para exemplificar o uso da teoria de grupos, tomemos como exemplo uma rede discreta, \mathcal{R} , em conjunto com os pontos da rede associemos uma outra variável, “cor”. Seja f uma função, cujo domínio é essa rede.

Figura 3 – Rede Discreta e Teoria de Grupos



Fonte: Próprio autor

Representação esquemática de uma rede discreta.

Considere uma função, $T_{l,m}$ ¹, cuja composição com f aplicando no ponto $(0,0)$ leva ao mapeamento

$$(T_{l,m} \circ f)(0,0) = f(l,m),$$

onde o primeiro e segundo argumento se referem ao vértice da rede. Supondo que a função f é tal que só depende da cor do vértice, então seja m um múltiplo de 2

$$(T_{l,m} \circ f)(i,j) = f(i+l, j+m) = f(i,j).$$

Portanto, conclui-se que para qualquer elemento t pertencente ao conjunto $\{T_{10}, T_{02}, T_{12}, T_{04} \dots\}$ teremos

$$(t \circ f)(x,y) = f(x,y)$$

veja que as funções t formam um grupo por composição. Podemos notar que embora existam infinitas funções t apenas duas são necessárias para gerar todas as outras funções do conjunto que deixa f invariante, isto é, qualquer função T_{nm} pode ser produzida por uma composição de funções T_{10} e T_{20} ,

$$t_{nm} = \underbrace{T_{10} \circ \dots \circ T_{10}}_{n \text{ vezes}} \circ \overbrace{T_{02} \circ \dots \circ T_{02}}^{m \text{ vezes}}$$

Então podemos concluir que uma função que apresente um conjunto de simetrias, pode ser gerada por uma composição de outras funções.

O conceito de simetria apresentado anteriormente é de fundamental importância para a física do estado sólido. Por exemplo, tal conceito é necessário para explicar a condutância de materiais metálicos. Pois, como dito por (Wilson, 1931) na introdução de seu trabalho seminal, a teoria

¹ A função T translada f na rede descrita pela figura 3.

de condução metálica de Drude, Lorentz e Sommerfeld apresentam grandes dificuldades para explicar a condutância no metal e sua dependência com a temperatura. A primeira teoria que fornecia bons resultados para tal comportamento surge nos trabalhos de Felix (Bloch, 1929). Em tais trabalhos, Bloch formula uma teoria utilizando as simetrias da rede cristalina para explicar a relação de dependência entre a temperatura e a condutância de metais. Posteriormente, Wilson baseando-se nos trabalhos de Bloch formula uma teoria para os isolantes. As teorias de Wilson e Bloch ficaram conhecidas posteriormente como teoria de Bandas, no presente estado atual da física teórica convêm-se indentificar tal teoria como teoria de bandas não-topológica.

2.1.2 Teoria de Bandas não-topológica

Antes da publicação do trabalhos de Bloch e Wilson a estrutura cristalina dos materiais metálicos havia sido demonstrada por resultados experimentais. Partindo desse fato, Bloch formula uma teoria para condução metálica utilizando a teoria quântica.

Para compreender a teoria de Bloch, suponha um sistema quântico unidimensional descrito pela função de onda ψ ²,

$$\psi : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{H},$$

suponha que exista uma condição de periodicidade, isto é, $\forall x \in \mathbb{R}$ e para um dado $L \in \mathbb{R}$

$$\psi(x + L) = \psi(x)$$

Podemos definir um operador que translada a função de onda em um ângulo ϕ , isto é,

$$(T(\phi) \circ \psi)(x) = \psi(x + r\phi).$$

Temos que o gerador dessa transformação (translação) é dado por

$$(I \circ \psi)(x) = \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{(T(\phi) \circ \psi)(x) - \psi(x)}{i\phi} \quad (2.1)$$

$$= \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{\psi(x + r\phi) - \psi(\theta)}{i\phi} \quad (2.2)$$

$$= (-ir \frac{df}{dx})(x) \quad (2.3)$$

Então, pelo que fora discutido anteriormente sobre grupos contínuos, o operador de translação é

$$T(\phi) = e^{-i\phi r \frac{d}{dx}} = e^{-i\phi r k}$$

Supondo que ao longo do círculo existem N átomos equidistantes um do outro por uma distância $a = N/L$, tal que

$$\psi(0) = \psi(L).$$

² Mostraremos posteriormente que para descrever completamente a fenomenologia de alguns materiais e necessário expandir o conceito de função de onda para os chamados fibrados de Hilbert.

Utilizando o operador de translação na equação acima obtêm-se

$$\begin{aligned}\psi(0) &= (T(2\pi) \circ \psi)(0) \\ \psi(0) &= e^{i2Na k} \psi(0)\end{aligned}$$

logo

$$\begin{aligned}k &= \frac{2\pi n}{Na}, \quad \forall n \in \mathcal{Z} \\ k &= \frac{G}{N}\end{aligned}$$

Podemos provar agora que a periodicidade no espaço das posições implica em uma periodicidade no espaço dos momentos, por exemplo tome uma função

$$\Psi_{k+G}(x+a) = e^{i(k+G)a} \Psi_{k+G}(x) = e^{ika} \Psi_{k+G}(x),$$

mas

$$\Psi_k(x+a) = e^{ika} \Psi_k(x),$$

logo

$$\Psi_{k+G}(x) = \Psi_k(x). \quad (2.4)$$

A condição acima implica na periodicidade dos vetores de onda, k , e é responsável pela topologia da Zona de Brillouin³ que será discutida posteriormente.

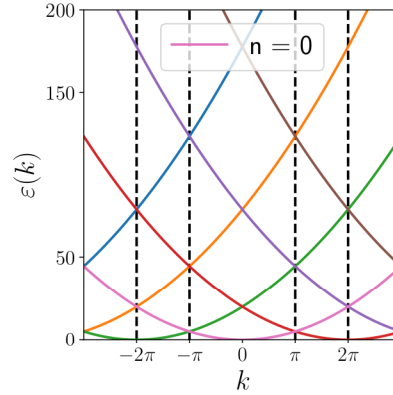
É possível então encontrar o espectro de um sistema restrito a condição (2.4). Considerando a ausência de interações temos que a equação de Schrodinger retorna o seguinte autovalor,

$$E_n(k) = \frac{\hbar^2}{2ma} \left(k - \frac{2\pi}{a} n \right),$$

que é função do índice da banda, n , e do vetor de onda. O gráfico desse espectro é apresentado na figura 4

³ A zona de Brillouin é uma célula primitiva de uma rede formada pelos vetores de onda G .

Figura 4 – Solução de autovalores dada a condição de Bloch



Fonte: Próprio autor

Atuvalores em função do momento (k). Na figura acima $\hbar = m = a = 1$.

Na figura 4 o espectro de energias permite estados para todos os valores de energia. A condição de (2.4) já é suficiente para capturar algumas características da condução metálica mas a mesma não é suficiente para explicar os isolantes. Pois esses últimos não apresentam condutância mesmo a temperaturas baixas ou condições de alta pureza do material.

Segundo Bloch na ausência de impurezas e a temperatura zero a condutância deveria ser infinita. Portanto a condição (2.4) não é suficiente para explicar porque certos materiais (isolantes) tem uma condutância finita, mesmo a temperaturas extremamente baixas e na ausência de impurezas no material. Wilson então conjectura que a interação ente os elétrons e os núcleos precisa ser de tal maneira que ocasione ausência de estados para certos intervalos de energia, isto é, existem regiões de energia proibidas para o elétron existir.

A derivação do resultado de Wilson segue da seguinte maneira:

Primeira suposição: Resultados experimentais corroboram a estrutura cristalina dos metais e isolantes, então é razoável conjecturar uma rede cúbica suficientemente grande, onde o lado de cada cubo é fixo, a ,

Segunda suposição: o elétron sofre a influência de um potencial constante, V_0 , então, segundo Bloch a função de onda para o elétron é a solução da partícula livre normalizada pelo volume da rede,

$$\psi_{k_x, k_y, k_z}^0 = \frac{1}{(Na)^{-3/2}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = \frac{1}{(\Omega)^{1/2}} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})},$$

onde

$$k_x, k_y, k_z \in \left\{ \frac{2n\pi}{Na} \mid \forall n \in \mathbb{Z} \right\},$$

são os vetores de onda, e são bons números quânticos tal que a auto-energia é

$$E_k^{(0)} = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Dado um auto-estado de H_0 identificado por $|k_x, k_y, k_z\rangle$, inserimos uma perturbação tal que em primeira ordem as auto-energias são perturbadas pelo termo

$$E_k^{(1)} = \langle \psi_{\vec{k}}^{(0)} | V(\vec{r}) | \psi_{\vec{k}}^{(0)} \rangle = \langle V(\vec{r}) \rangle = V_0$$

O caso mais simples é assumir que os estados $|\vec{k}\rangle$ e $|\vec{k} + \vec{G}\rangle$ estão acoplados pelo potencial $V_{\vec{G}}$. Portanto, podemos encontrar as auto-energias do sistema a partir do cálculo do determinante

$$\begin{vmatrix} E^{(0)}(\vec{k}) + E^{(1)}(\vec{k}) - E & \langle \vec{k} + \vec{G} | V(\vec{r}) | \vec{k} \rangle \\ \langle \vec{k} | V(\vec{r}) | \vec{k} + \vec{G} \rangle & E^{(0)}(\vec{k} + \vec{G}) + E^{(1)}(\vec{k} + \vec{G}) - E \end{vmatrix} = 0$$

Tal que os valores possíveis para E são

$$E^\pm(\vec{k}) \approx \frac{1}{2} \left[E^{(0)}(\vec{k}) + E^{(0)}(\vec{k} + \vec{G}) \right] + V_0 \pm |V_{\vec{G}}|.$$

A equação acima demonstra o surgimento de gaps no espectro de energia da ordem de

$$\Delta = E^+ - E^- = 2|V_{\vec{G}}|.$$

Wilson utiliza esse gap de separação das regiões de energia para explicar a fenomenologia dos isolantes. Mas, apesar da teoria de Wilson explicar o transporte de portadores de carga, a mesma não diz como tais isolantes surgem. E, como mostrado anteriormente o comportamento dos isolantes surge devido a grupos de simetria discretos no sistema. Então para explicar como isolantes surgem devemos explicar como um sistema físico transita entre simetrias distintas.

2.1.3 Quebras de Simetria

O cerne da teoria de bandas é o conjunto de simetrias discretas de uma rede, e a formação de tal rede ocorre quando um sistema físico transita de um estado mais simétrico para um menos simétrico. O conjunto de parâmetros para o qual ocorre essa transição no sistema é conhecido como ponto crítico. No ponto crítico, a energia livre de Helmotz,

$$F = -k_B T \ln \left[\sum_{\mu} e^{-H[\mu]/k_B T} \right] \quad (2.5)$$

é descontínua em primeira ou segunda ordem, de modo que suas derivadas são singulares. O leitor poderá se indagar do porquê das singularidades se a energia livre é um somatório de funções analíticas. Tais singularidades tornam-se presentes pois implicitamente na definição de energia livre é necessário considerar o limite termodinâmico, isto é, na presença de um número infinito de graus de liberdade.

Em 1937 Landau (Landau, 1937) formula uma teoria capaz de explicar o comportamento das transições de fase através das quebras de simetria do sistema⁴.

⁴ Landau assume que a energia livre pode ser expandida na base dos geradores do grupo de simetria, como dito em (Salinas, 1997) a teoria de Landau apesar de poderosa é limitada, e para alguns casos é necessário usar um arcabouço matemático mais requintado, a Teoria de Grupo de Renormalização.

Para estudar as transições de fase, Landau define em seu artigo original uma distribuição de probabilidades $\rho(x, y, z)$, tal que $\rho(x, y, z)dxdydz$ é a probabilidade de um átomo estar no volume $dxdydz$ centrado em (x, y, z) . A utilização da função densidade é útil pois ρ possui as simetrias do material (ρ é um invariante do grupo espacial) Landau pressupõe que um lado do ponto crítico é mais simétrico. Tomando um ponto específico em uma curva de variáveis extensivas tal que nesse ponto a densidade do material seja ρ e o grupo espacial seja G_0 suponha que nesse ponto o sistema encontra-se na região mais simétrica, assuma que exista uma perturbação na densidade, $\delta\rho$, que é responsável por diminuir a simetria do sistema. Portanto, como argumenta Landau a densidade nesse ponto passa a ser

$$\rho = \rho_0 + \delta\rho, \quad (2.6)$$

tal que $\delta\rho$ é menos simétrico que ρ_0 . Portanto, a soma dessas funções tem as simetrias do elemento menos simétrico. O grupo de ρ , G , precisa ser subgrupo de G_0 . Portanto, podemos exprimir a perturbação na densidade como uma combinação linear de algumas funções bases da representação irredutível de G_0 ,

$$\delta\rho = \sum_n \sum_i c_i^{(n)} \phi_i^{(n)},$$

onde $\phi_i^{(n)}$, representa a i -ésima base para a n -ésima representação irredutível, $D^{(n)}$, de G_0 .⁵ Note que se R é uma operação de simetria de G_0 , então $\delta\rho$ e $R\delta\rho$ originam a mesma distribuição de densidade,

$$R\delta\rho = \sum_n \sum_i c_i^{(n)} R\phi_i^{(n)} \quad (2.7)$$

$$= \sum_n \sum_i c_i^{(n)} \left(\sum_j D_{ji}^{(n)}(R) \phi_j^{(n)} \right) \quad (2.8)$$

$$= \sum_n \sum_j \left(\sum_i c_i^{(n)} D_{ji}^{(n)}(R) \right) \phi_j^{(n)} \quad (2.9)$$

$$= \sum_n \sum_j c_j^{(n)} \phi_j^{(n)} \quad (2.10)$$

$$= \delta\rho. \quad (2.11)$$

Postulando que a energia livre é função somente dos parâmetros extensivos que caracterizam o sistema e da densidade, $F = F(T, P, \rho)$, de modo que podemos expandir tal energia em termos do funcional $\delta\rho$,

$$F(T, P, \rho) = \sum_i F^{(i)}, \quad (2.12)$$

⁵ Na soma também se desconsidera a base da representação da identidade do grupo G_0 , pois tal termo seria invariante por operações de G_0 , logo ele pode ser absorvido por ρ_0 (Inui, Tanabe e Onodera, 1990).

onde

$$F^{(0)} = F(T, P, \rho_0), \quad (2.13)$$

$$F^{(1)} = \sum_n \sum_i c_i^{(n)} \frac{\partial F}{\partial c_i^{(n)}} /_0, \quad (2.14)$$

$$F^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \sum_{i,j} c_i^{(n)} c_j^{(m)} \frac{\partial^2 F}{\partial c_i^{(n)} \partial c_j^{(m)}} /_0, \quad (2.15)$$

Como $\delta\rho$ é invariante as aplicações dos elementos de G_0 , isto é, $R\delta\rho = \delta\rho$, temos que F precisa ser um invariante também.

Como foi considerado que o termo de identidade estava absorvido então os coeficientes em primeira ordem precisam ser todos nulos. O termo de segunda ordem, $F^{(2)}$, pode ser posto numa forma quadrática,

$$F^{(2)} = \sum_n A^{(n)} \sum_i [c_i^{(n)}]^2. \quad (2.16)$$

No estado mais simétrico da transição de fase temos $\delta\rho = 0$. Portanto, o termo de segunda ordem precisa ser ponto de mínimo, logo é necessário que todos os $A^{(n)}$ sejam positivos com pelo menos um nulo, tal que seja garantido a transição de fase. Seja α o índice do termo nulo,

$$A^{(\alpha)} = 0.$$

Do lado menos simétrico temos $\delta\rho \neq 0$, ao menos um termo de $A^{(n)}$ precisa ser negativo. Como a transição é contínua podemos assumir que o coeficiente α passa a ser negativo desse lado, e a densidade fica definida como

$$\rho = \rho_0 + \sum_i c_i^{(\alpha)} \phi_i^{(\alpha)},$$

onde o somatório sobre as representações foi removido, pois a transição de fase corresponde a mudança da simetria associada com apenas uma representação irredutível, $D^{(\beta)}$. Reunindo tudo o que foi dito até aqui podemos dizer que o termo de segunda ordem é dado pela expressão

$$F^{(2)} = A^{(\alpha)} \eta,$$

onde η é conhecido como parâmetro de ordem,

$$\eta = \sum_i [c_i^{(\alpha)}]^2.$$

Os termos de terceira ordem, $F^{(3)}$, se anulam para garantir a condição de ponto de equilíbrio. Para os termos de quarta ordem podemos realizar o mesmo tratamento utilizado para os de segunda ordem, de modo que a expansão da energia livre até quarta ordem apresentará a seguinte forma

$$F = F_0 + A(P, T) \eta^2 + B(P, T) \eta^4. \quad (2.17)$$

Na equação acima se $A = 0$ e $\eta = 0$, a energia livre, F , é justamente a energia livre para o caso mais simétrico, F_0 . Note que a energia livre fica determinada em função do parâmetro η , que é conhecido como parâmetro de ordem.

Antes da descoberta de transições de fase topológicas a caracterização de materiais era feita utilizando-se as simetrias do espectro da Hamiltoniana. Mas, os trabalhos de David J. Thouless and F. Duncan M. Haldane (The Royal Swedish Academy of Sciences, 2016) demonstraram a formação de estados da matéria que não poderiam ser explicados utilizando-se de teorias sobre quebras de simetrias. Para abordar as transições de fase topológica e suas implicações na física da matéria condensada é essencial entender o conceito de topologia, bem como o conjunto de estruturas matemáticas que tal conceito carrega consigo.

2.2 Topologia

Segundo (Nakahara, 2003) :

“The most general structure with which we work is a topological space. Physicists often tend to think that all the spaces they deal with are equipped with metrics. However, this is not always the case. In fact, metric spaces form a subset of manifolds and manifolds form a subset of topological spaces.”

O que define um espaço topológico? Formalmente, segundo (Nakahara, 2003) , seja X um conjunto e seja τ uma família de subconjuntos de X . Então τ é chamado de Topologia sobre X se:

1. O conjunto vazio e X são elementos de τ ;
2. Qualquer união dos elementos de τ é um elemento de τ ;
3. Qualquer intersecção finita de elementos de τ é um elemento de τ

Se os requisitos acima são cumpridos então (X, τ) é um espaço topológico.

Por exemplo, dado o conjunto finito

$$X := a, b, c,$$

Podemos definir os seguintes espaços topológicos,

$$\begin{aligned}
\tau_1 &= \{\emptyset, \{a, b, c\}\} \\
\tau_2 &= \{\emptyset, \{c\}, \{a, b, c\}\} \\
\tau_3 &= \{\emptyset, \{a, b\}, \{a, b, c\}\} \\
\tau_4 &= \{\emptyset, \{c\}, \{a, b\}, \{a, b, c\}\} \\
\tau_5 &= \{\emptyset, \{c\}, \{b, c\}, \{a, b, c\}\} \\
\tau_6 &= \{\emptyset, \{c\}, \{a, c\}, \{b, c\}, \{a, b, c\}\} \\
\tau_7 &= \{\emptyset, \{a\}, \{b\}, \{a, b\}, \{a, b, c\}\} \\
\tau_8 &= \{\emptyset, \{b\}, \{c\}, \{a, b\}, \{b, c\}, \{a, b, c\}\} \\
\tau_9 &= \{\emptyset, \{a\}, \{b\}, \{c\}, \{a, b\}, \{a, c\}, \{b, c\}, \{a, b, c\}\}
\end{aligned}$$

Espaços topológicos permitem definir a continuidade de uma função sem invocar o conceito de métrica. A definição de uma função contínua é apresentada abaixo.

Definição 2 *Seja (X_1, τ_1) e (X_2, τ_2) dois espaços topológicos, seja f o mapeamento*

$$f : X_1 \mapsto X_2$$

então f é dita contínua se a inversa da imagem de f pertencente a τ_2 é elemento de τ_1 .

Definido o que é um espaço topológico, podemos definir quais espaços topológicos são equivalentes⁶. Portanto, sem perda de generalidade podemos estudar as características de um certo espaço topológico i , e consequentemente aplicar todos os resultados obtidos em i para os espaços topológicos equivalentes a i . Mas como definir se um espaço topológico é equivalente a outro? Para tal definimos o conceito de homeomorfismo.

Definição 3 *Seja (X_1, τ_1) e (X_2, τ_2) dois espaços topológicos, seja f o mapeamento*

$$f : X_1 \mapsto X_2$$

tal que

- *f é uma bijeção;*
- *f é contínuo;*
- *f tem uma inversa, e essa inversa é contínua.*

Se as três condições acima são respeitadas então os espaços são ditos homeomórficos, e a função f é um homeomorfismo entre os espaços topológicos.

⁶ Com equivalentes queremos dizer que esses espaços compartilham certas propriedades, por exemplo dois triângulos são equivalentes então seus ângulos são iguais.

Apesar da definição de homeomorfismo o leitor há de concordar que seria uma tarefa estranha buscar randomicamente uma função f que respeite as condições anteriores para descobrir se dois espaços são ou não homeomórficos entre si. O que podemos fazer para decidir se dois espaços são ou não homeomórficos é descobrir todos os invariantes topológicos de cada espaço.

2.2.1 Invariantes Topológicos

Um invariante topológico é uma propriedade tal que se existe uma função homeomórfica entre esses dois espaços se e somente se todos os invariantes topológicos são iguais. Como exemplos de invariantes topológicos podemos citar compactação. Mas como descobrir quais são os invariantes topológicos possíveis? A ideia é definir uma propriedade, e depois demonstrar que se existe um homeomorfismo entre espaços topológicos, então, tal propriedade é invariante nos dois espaços. Abaixo apresentaremos as propriedades que se mostram mais interessantes para o estudo de isolantes topológicos.

2.2.1.1 Grupos de homotopia

Antes de abordar grupos de homotopia convém definir o conceito de loop.

Definição 4 *Seja (M, τ) uma variedade topológica⁷. Então seja f uma função tal que*

$$f : [0, 1] \mapsto M$$

restrita as condições tais que para um dado $x \in M$, $f(0) = x$ e $f(1) = x$. Então f é chamado loop sobre x

Suponha que M é a esfera, S^2 , então loops podem ser entendidos como caminhos fechados que são possíveis de serem descritos na superfície da esfera.

O interessante sobre os loops é que podemos combina-los, ou seja dado os loops f_1 e f_2

$$(f_1 \circ f_2) := \begin{cases} f_1(2\lambda) & \text{se } \lambda \in [0, 1/2] \\ f_2(2\lambda - 1) & \text{se } \lambda \in (1/2, 1) \end{cases}$$

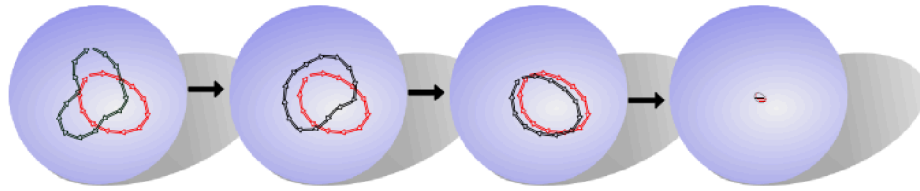
então fica claro que

$$f_3 = f_1 \circ f_2 := [0, 1] \mapsto M$$

ou seja, podemos compor caminhos através da composição de funções, e o conjunto dos loops equipado com a composição de funções acima forma um grupo. Podemos notar que no exemplo dado acima os loops acima são homeomórficos a um círculo S^1 .

⁷ Uma variedade topológica de dimensão N grosseiramente é um espaço que localmente se assemelha ao \mathbb{R}^N

Figura 5 – Grupo de homotopia fundamental e Loops na Esfera.



Fonte: Próprio autor

Na imagem acima exemplificamos a equivalência entre dois loops.

O grupo de homotopia é um conjunto que representa o espaço de todos os loops que não são homotópicos entre-si em um dado ponto x . Para o caso em que os loops são círculos, o grupo desses loops é denominado grupo de homotopia fundamental, e é representado por $\pi_1(\mathcal{M}, x)$.

Para a 2-esfera, $\pi_1 = \emptyset$, enquanto para o 2-Torus $\pi_1 = \mathbb{Z}^2$. O resultado da esfera é compreendido de forma grosseira imaginando que colocando um elástico em sua superfície sempre podemos contrai-lo a um ponto.

Os grupos de homotopia estão relacionados com características geométricas das variedades topológicas. Por exemplo, é possível demonstrar que o gênero, g , o número de “buracos” na variedade se relaciona com o invariante topológico conhecido como característica de Euler,

$$\chi(\mathcal{M}) = 2g - 2.$$

Por sua vez, a característica de Euler pode ser relacionada com as propriedades de funções sobre a variedade através do Teorema de Poincaré-Hopf (Poincaré, 1879), (Hopf, 1927).

2.2.1.2 Teorema de Poincaré-Hopf

Até o presente momento pode parecer que invariantes não são úteis para física, mas isso não é verdade. Como demonstração da utilidade da característica de Euler podemos citar o teorema de Poincaré-Hopf. Tal teorema relaciona a característica de Euler, essencialmente uma propriedade da topologia geométrica, com o número de índices de uma função, que é uma característica analítica de uma função. A primeira demonstração foi feita por (Poincaré, 1879) para variedades no \mathbb{R}^2 e posteriormente (Hopf, 1927) generaliza o teorema para um espaço qualquer. Por exemplo para o 2-Torus temos que

$$\sum_p I_v^{(p)} = \chi(T^2) = 0.$$

Portanto, dado um campo vetorial, o número de “vórtices” sempre deve ser igual ao número de “anti-vórtices” no 2-torus. Existem inúmeras aplicações de tal teorema na física. Entre elas está a demonstração do teorema da duplicação de fermions (Karsten, 1981). Munidos das informações discutidas até o presente momento sobre topologia, voltaremos a tornar como foco a temática principal deste trabalho, isolantes topológicos e o problema da duplicação de fermions.

2.3 Teoria de Bandas Topológica

Na seção 2.1.2 foi discutido o espectro de energias para isolantes e condutores, tendo sido abordado como causa desse espectro as simetrias da rede cristalina. Em tal seção afirmamos que a teoria de quebras de simetria não é suficiente para tratar toda a fenomenologia dos isolantes ou condutores, para isso é necessário estudar tais materiais da perspectiva da topologia, o que será feito nas seções a seguir.

2.3.1 A zona de Brillouin é sempre um Torus

De acordo com a equação (2.4) podemos definir uma relação de equivalência em relação para cada componente do vetor de onda, isto é

$$k_l \sim k_l + 2\pi.$$

Um conjunto pertencente aos \mathbb{R} equipado com a relação de equivalência acima é conhecido como círculo, S^1 , uma variedade que localmente se assemelha aos \mathbb{R} . Formalmente escreve-se que

$$S^1 := \mathbb{R}/\sim,$$

Onde a barra se refere a tomar o quociente do conjunto dos \mathbb{R} via relação de semelhança ($x \sim y \iff x = y + 2\pi \ \forall \ x, y \in \mathbb{R}$). Esse quociente pode ser entendido como uma “colagem”(veja figura 6) dos elementos semelhantes, de modo que

$$k_x, k_y \in (-\pi, \pi]$$

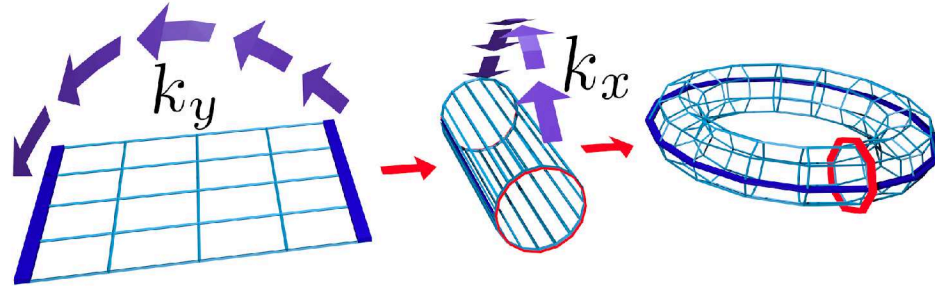
Como cada componente pertence a um espaço S^1 , podemos concluir que o espaço total dos momentos é um produto cartesiano⁸,

$$T^2 := S^1 \times S^1,$$

ou seja o espaço dos momentos para uma rede bidimensional é uma 2-torus, T^2 , uma variedade cujo o embebimento no \mathbb{R}^3 possui a conhecida forma de “rosquinha”.

⁸ O produto cartesiano entre dois espaços, A e B , de forma grosseira significa que devemos associar a cada elemento de A um espaço B , formando pares ordenados.

Figura 6 – Mapeamento da Zona de Brillouin como Torus



Fonte: Próprio autor

Portanto, devido a periodicidade, a zona de Briolluin $2D$ é sempre um 2-torus. Em uma primeira análise poderia-se concluir erroneamente que devido a esse fato o estudo da topologia dos isolantes é desnecessário, uma vez que todos os materiais possuem a zona de Briolluin como 2-torus, mas para estudar a topologia de isolantes devemos estudar uma estrutura mais completa, capaz de levar em conta a informação da zona de Briolluin e dos vetores de Bloch. Essa estrutura é conhecida como *Bloch bundles* (maços de Bloch). Para compreender o significado físico dos maços de Bloch é necessário compreender o conceito de espaços projetivos e fibrados.

2.3.2 Espaços Projetivos

Relatos históricos (The. . . , 2007) sugerem que a ideia de espaços projetivos foi desencadeada primeiramente devido aos estudos de perspectiva em pinturas. A dificuldade em representar-se a perspectiva surge também na geometria euclidiana. Por exemplo, em um plano euclidiano duas retas paralelas nunca se intersectam, mas em uma fotografia (uma projeção) isso não é verdade. Isto acontece por que na geometria de Euclides o termo “pontos no infinito” causa problemas, especialmente em teoremas que envolvem a classificação de objetos geométricos, assim dito por (Gallier, 2011) . Como exemplo o espaço projetivo associado ao \mathbb{R}^3 , denominado como $P^2\mathbb{R}$, é o conjunto de todas as linhas em \mathbb{R}^3 que atravessam a origem. Dessa maneira pontos que residem sobre a mesma reta no \mathbb{R}^3 são representados no espaço projetivo pelo mesmo elemento. Assim como é possível definir um espaço projetivo para os reais, também é possível definir um espaço projetivo para o espaço de Hilbert na mecânica quântica. O leitor poderá se indagar se tal definição tem sentido físico. Notemos que experimentalmente apenas os valores esperados são relevantes. Portanto, de forma mais restrita só é obrigatório respeitar a regra de Born, que diz que a probabilidade de um sistema descrito por um vetor de estado $|\psi\rangle$ ser colapsado em um estado $|\phi\rangle$ é

$$P(\phi, \psi) = \frac{|\langle\phi|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle}.$$

Podemos associar a cada vetor de estado o que é chamado de raio, que nada mais é que o mapeamento

$$\psi \rightarrow \lambda\psi, \forall \lambda \in \mathbb{C}^* \quad |\lambda| = 1.$$

Pois, dado a definição acima, todos os raios de um vetor de estado fornecem os mesmos resultados pela regra de Born, ou também podemos notar que operador de projeção⁹ não se altera

$$|\psi\rangle\langle\psi| = |\tilde{\psi}\rangle\langle\tilde{\psi}|,$$

onde ψ e $\tilde{\psi}$ diferem-se entre-si apenas por uma fase arbitrária. Podemos nos indagar então do por que preferimos um vetor de estado $|\phi\rangle$ em relação a um vetor de estado $e^{i\theta}|\phi\rangle$. Antes dos trabalhos (Aharonov e Bohm, 1959) e (Berry, 1984) a fase de um vetor de estado era considerada irrelevante, pois a mesma desaparecia na regra de Born ou na projeção em um dado estado, mas graças aos trabalhos citados anteriormente e inúmeros outros os físicos foram obrigados a considerar a fase como uma componente da realidade. Então nesse sentido torna-se necessário construir uma teoria que tenha essa ambiguidade na escolha da fase em seu cerne (Lyre, 2014). De forma rigorosa seja \mathbb{H} o espaço de Hilbert e \mathbb{P} o espaço projetivo do espaço de Hilbert, diz-se que \mathbb{P} é o conjunto quociente de \mathbb{H} por uma relação de equivalência, (Grigorenko, 1992)

$$\psi \sim \lambda\psi$$

tal que define-se uma operação de projeção

$$\pi : \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{P}$$

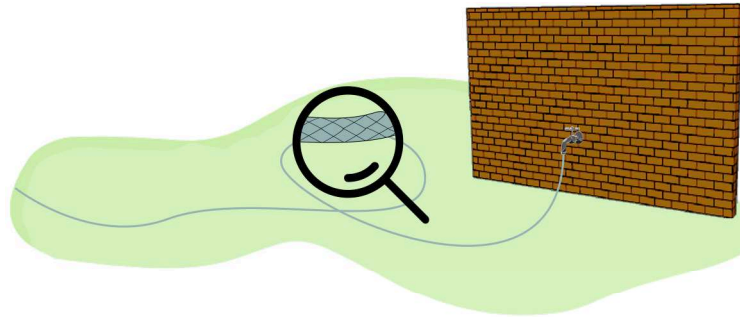
A conexão com espaços projetivos e a física discutida até o presente momento neste trabalho se da ao associar a cada valor de k (a cada ponto do torus) os raios de autoestados da Hamiltoniana, $H(k)$, dessa maneira conseguimos acoplar a informação da fase e dos vetores de estado ao torus da zona de Briolluin. A estrutura formada por essa associação em conjunto com uma função de projeção é o denominado maço de Bloch.

2.3.3 Maços de Fibras

Em seu livro “The road to reality” Sir. Roger Penrose (Penrose e Jorgensen, 2006) discorre sobre a importâncias dos maços. Como exemplo da importância de tal formalismo ele cita o exemplo as teorias de Gauge para interação entre as partículas elementares. Essas teorias evocam dimensões extras, internas, com isso quer-se dizer que a cada ponto do espaço-tempo é necessário associar um outro espaço, de modo que possam ocorrer movimentos nesse espaço interno, ou como diz Penrose *internal direction*.

⁹ Relembre o que foi dito na seção sobre quebras de simetria e operador de densidade.

Figura 7 – Exemplificação do conceito de maços de fibra.



Fonte: Próprio autor (2017)

Seguindo a ideia proposta por (Penrose e Jorgensen, 2006) podemos compreender de forma grosseira o conceito de maços de fibras ao realizar a analogia com uma mangueira de jardim que quando vista de longe podemos confundi-la com uma estrutura unidimensional, mas ao examina-la de perto notamos que existe uma estrutura em uma superfície bidimensional. Embora interessante essa analogia o leitor deverá tomar o cuidado pois no caso da mangueira a estrutura (que é feita analogia com o espaço extra) reside no próprio espaço onde encontra-se a mangueira.

Abaixo apresentamos a definição mais rigorosa de um fibrado

Definição 5 *Seja E, B espaços tais que B é um espaço conectado, seja F um espaço (denominado fibra), e seja π mapeamento contínuo tal que*

$$\pi : E \mapsto B$$

se $\forall x \in B$

$$\pi^{-1} : B \mapsto F$$

$$\pi^{-1}(x) \mapsto F(x)$$

então $\pi : E \mapsto B$ é denominado (locally trivial fibralization) *fibração trivial local sobre um espaço F , ou maço de fibras F se localmente E é equivalente (isomórfico) a $B \times F$. Isto é dado um aberto, O*

$$\begin{array}{ccc} \pi^{-1}(O) & \xrightarrow{\phi} & O \times F \\ & \searrow \pi & \downarrow \text{proj} \\ & & O \end{array}$$

2.3.3.1 Tipos de fibrados

Podemos classificar os fibrados triviais e não triviais. Fibrados são ditos triviais se existe um homeomorfismo entre E e $B \times F$, isto é, além de localmente eles serem equivalentes ao produto cartesiano entre o espaço base e a fibra existe um mapeamento entre o espaço total, E , e o espaço obtido pelo produto cartesiano $B \times F$. Os fibrados não triviais por sua vez não possuem esse mapeamento.

2.3.4 Isolantes na Linguagem de Fibrados de Bloch

2.3.4.1 Modelo de dois níveis

Como dito na seção de isolantes, um isolante constitui de bandas de condução separada da banda de valência por um gap de energia. Podemos modelar de maneira mais simples possível um isolante como um sistema de dois níveis, dado pela matriz abaixo

$$H(k) = \vec{h}(k) \cdot \vec{\sigma} = \begin{bmatrix} h_z & h_x - ih_y \\ h_x + ih_y & -h_z \end{bmatrix},$$

onde h_i é uma função que leva reais(torus) em reais. Tal que os autoestados são

$$H(k)u_{\pm}(k) = \pm \varepsilon(k)u_{\pm}(k),$$

onde $\varepsilon(k) = h(k) = \sqrt{h_x^2 + h_y^2 + h_z^2}$. Note que para que o sistema descreva um isolante h nunca pode se anular.

Analisando a solução da banda de valência, descrita pelo autoestado

$$u_{-}(\vec{h}) = \left(1 + \frac{h_z + \varepsilon_-^2}{h_x^2 + h_y^2} \right) \begin{bmatrix} \frac{\varepsilon_-}{h_x + ih_y} \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Assim, um mapeamento que define para cada ponto do torus de Briolluin um autoestado corresponde o que é chamado fibrado de Bloch.

Temos que h é parametrizado em uma esfera \mathbf{S}^2 ,

$$\frac{\vec{h}}{h} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{bmatrix}$$

como consequência o autoestado da banda de valência é

$$u_{-}^N(\vec{h}) = \begin{bmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$$

Note que para $\theta = 0$ o vetor não fica bem definido por causa da fase. Independente de como a parametrização é escolhida haverá pontos em que o autoestado não é bem definido, por exemplo multiplicando o vetor por $e^{-i\phi/2}$,

$$u_{-}^S(\vec{h}) = \begin{bmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{bmatrix}$$

Na equação acima note que o autovetor assume valores diferentes para $\phi = 0$ e $\phi = 2\pi$, ou seja, u_{-} não pode ser definido de forma única. Esse comportamento dos vetores parametrizados na esfera não pode ser removido. Pois o fibrado na superfície da esfera é não trivial. Portanto, assim como o caso do fita de Mobius é necessário escolher um recobrimento na base desse fibrado, isto é a esfera, em que cada “pedaço” desse recobrimento possa ser “unido” por funções de transição.

A parte “norte” da esfera é recoberta pelo vetor

$$u_-^N(\vec{h}) = \begin{bmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$$

enquanto a parte “sul”

$$u_-^S(\vec{h}) = \begin{bmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{bmatrix}$$

As duas partes são unidas pela função de transição

$$t_{NS} = e^{i\phi}.$$

A função acima nunca pode ser deformada em uma função identidade. Portanto, se o mapeamento da função \hat{h} do torus de Brioullin nos parâmetros θ e ϕ percorre toda a esfera o fibrado de Bloch é não-trivial, pois não podemos definir um único autoestado globalmente. Para quantitativamente mensurar tal mapeamento, e descobrir se o mesmo é trivial ou não é necessário utilizar os números de Chern.

2.3.4.2 Fases de Anandan e Berry

O pêndulo de Foucault é um aparato capaz demonstrar a rotação da terra em torno de seu próprio eixo. Inúmeros exemplos e simulações de tal aparato podem ser encontradas na internet. Tal pêndulo é descrito por um processo conhecido como não-holonômico. Um processo não-holonômico ocorre de tal maneira que um sistema partindo de um estado inicial descrito por um dado conjunto de parâmetros dependentes do tempo, $R_0(t), R_1(t) \dots R_N(t)$, ao efetuar uma evolução cíclica, isto é $R_i(\tau) = R_i(t = 0)$ o sistema não retorna ao seu estado inicial. Durante o período de um dia o vetor que descreve a oscilação do pêndulo é rotacionado por um dado ângulo.

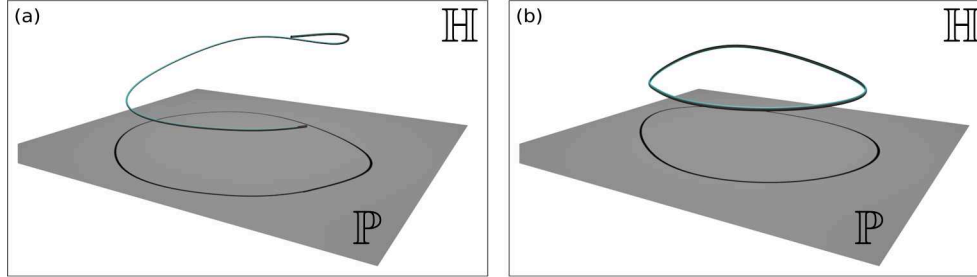
Um sistema quântico que descreve uma trajetória cíclica no espaço de parâmetros também pode “desenvolver” uma fase geométrica assim como no caso do pêndulo de Foucault.

A primeira demonstração de tal fase parte dos trabalhos de (Berry, 1984), no qual, os autores estudam um sistema que evolui de forma lenta, adiabática, isto é, a taxa de variação do Hamiltoniano, $H(t)$, é pequena se comparada com as oscilações do estado quântico. Suponha que o hamiltoniano possua N parâmetros dependentes do tempo, esse pressuposto assume que tais parâmetros, $R_i(t)$, variam de forma mais lenta que a transição entre os estados, $\Delta t \approx \Delta E_n(t)/\hbar$. Portanto, um sistema descrito por um autoestado $|n, t = 0\rangle$ permanecerá nesse estado a menos de uma fase em um instante t . A fase geométrica adquirida durante essa evolução adiabática ficou conhecida como fase de Berry.

Posteriormente, (J. Anandan Aharonov Y., 1988) notaram que um espaço projetivo de Hilbert generaliza a fase de Berry, de modo que a necessidade de uma transformação adiabática é removida. A partir da teoria de fibrados eles notam que embora existam caminhos distintos a projeção no espaço projetivo é a mesma, veja a figura 8. Essa fase mais geral é conhecida como

fase de Anandan-Aharonov, carrega em si uma física mais completa que a fase de Berry (Lyre, Grigorenko).

Figura 8 – Exemplificação do espaço projetivo de Hilbert e evolução de um sistema em um espaço de Hilbert.



Fonte: Próprio autor (2017)

Caminhos no espaço de Hilbert e seus respectivos caminhos fechados no espaço projetivo \mathbb{P} .

A fase de Berry permite definir um invariante topológico conhecido como número de Chern, que carrega a informação da estrutura topológica do fibrado de Bloch. Assim como a fase que o pêndulo de Foucault nos permite deduzir que a terra rotaciona em torno do seu próprio eixo.

2.3.4.3 Número de Chern

O número de Chern permite caracterizar a banda preenchida do isolante. Para a introdução do número de Chern é necessário definir o que é conhecido como curvatura de Berry,

$$\vec{A} = \frac{1}{i} \langle u_- | du_- \rangle$$

onde o primeiro número de Chern é obtido integrando tal curvatura sobre o torus da zona de Brillouin,

$$c_1 = \int_{BZ} dA$$

E é possível demonstrar que tal número só se anula quando as funções de transição podem ser deformadas na função identidade.

2.3.4.4 Estados metálicos na superfície

Como dito na introdução, o interesse nos isolantes topológicos surge pois na interface entre um isolante com topologia trivial e um com topologia não trivial ocorre a formação de um estado metálico na interface. Tal fenômeno se dá pois os dois isolantes tem o número Chern distintos, e tal número não se altera de forma contínua.

Para compreender tal fenômeno utilizaremos o modelo de (Haldane, 1988) para um isolante topológico 2D com número de Chern igual a um. Tal modelo é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = -i\vec{\sigma} \cdot \nabla + m(y)\sigma_z,$$

onde $m(y) = \tanh(y)$ é conhecido como termo de massa.

Podemos aplicar uma transformação unitária na hamiltoniana através da matriz

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

tal que

$$\tilde{H} = UHU^{-1} = \begin{bmatrix} k_x & ik_y + m(y) \\ -ik_y + m(y) & -k_x \end{bmatrix}$$

Queremos encontrar um autoestado, $\langle\psi| = [a \ b]$, para $\tilde{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ Considerando a expressão anterior obtêm-se duas equações acopladas

$$\begin{aligned} (k_x - E)a &= (-ik_y - m(y))b \\ (-k_x - E)a &= (ik_y - m(y))b. \end{aligned}$$

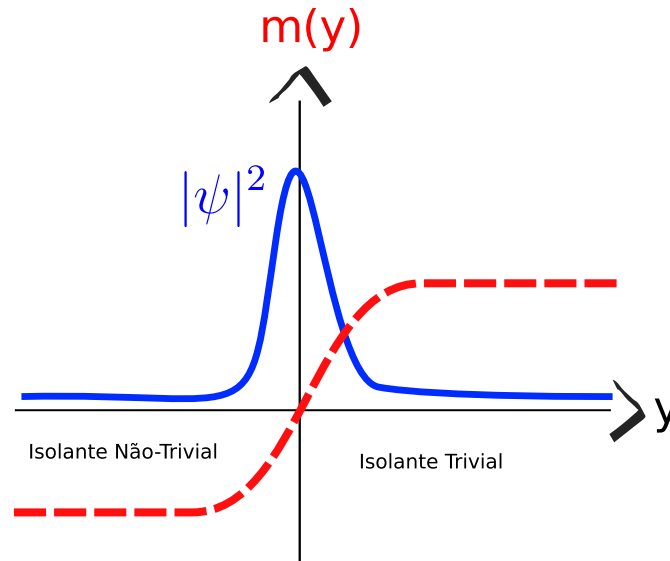
As equações acima admitem solução apenas se ambas são nulas. De modo que é possível demonstrar que a solução é

$$|\psi\rangle \propto e^{ik_x x} e^{-\int_0^y m(y') dy'} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

e é uma solução localizada na interface em que o termo de massa troca de sinal, assim como mostrado na figura 9¹⁰.

¹⁰ Um potencial de massa pode ser usado como mecanismo para confinamento dos estados em um sistema descrito por um Hamiltoniano do tipo Dirac.

Figura 9 – Representação da função de onda na interface entre um isolante de Chern e um isolante trivial



Fonte: Próprio autor (2017)

2.4 Simetrias e Isolantes topológicos

No presente momento já discutimos a maioria das características dos isolantes topológicos que nos interessa, na seção anterior discorremos sobre os isolantes de Chern, existem outras classes de isolantes topológicos, cada uma com um invariante específico. Mas fugiria muito do tema dessa dissertação abordar todos as classes e sua dedução. No presente trabalho estudou-se especialmente os isolantes topológicos em 3 dimensões, os quais podem ser classificados dentro de 10 classes distintas via teoria de matrizes randômicas¹¹ feita por (Schnyder et al., 2008). De forma bastante sucinta a classificação de Schnyder et al. baseia-se estudar o conjunto de transformações para os quais o espectro global do hamiltoniano mantém-se invariante. Focaremos em apenas duas dessas simetrias a quiral e a simetria de reversão temporal.

¹¹ A teoria de matrizes randômicas foi desenvolvida principalmente em trabalhos envolvendo interações nucleares, (Wigner, 1955). Wigner propoe que estudar o espectro de um ensemble de matrizes randômicas restritas a um dado conjunto de simetrias é um problema equivalente a estudar um sistema físico descrito por uma hamiltoniana sujeito as mesmas simetrias.

2.4.1 Simetria de Reversão Temporal

O mapeamento que define uma reversão temporal em um espaço de fase é descrito pelas equações abaixo,

$$t \rightarrow -t \quad (2.18)$$

$$q(t) \rightarrow q(-t) \quad (2.19)$$

$$\dot{q}(t) \rightarrow -\dot{q}(-t) \quad (2.20)$$

De modo que o mapeamento da Lagrangeana nesse referido espaço com reversão temporal é escrito como

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) \rightarrow \mathcal{L}(q, -\dot{q}, -t) \quad (2.21)$$

Como a Lagrangeana gera as equações de movimento para um sistema, se o sistema é simétrico por reversão temporal, então

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = \mathcal{L}(q, -\dot{q}, -t). \quad (2.22)$$

Se $q_c(t)$ é solução então $q_c(-t)$ também é.

2.4.1.1 Simetria de Reversão Temporal em Mecânica Quântica

Dada a equação de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x, t) - V\psi(x, t). \quad (2.23)$$

podemos mapeá-la em um espaço de fase com o parâmetro tempo invertido:

$$-i\hbar\partial_t\psi(x, -t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x, -t) - V\psi(x, -t). \quad (2.24)$$

Definindo \hat{k} como o operador de reversão temporal,

$$\hat{k}\hat{\mathbf{r}}\hat{k}^{-1} = \hat{\mathbf{r}}; \quad \hat{k}\hat{\mathbf{p}}\hat{k}^{-1} = -\hat{\mathbf{p}} \quad (2.25)$$

as relações acima implicam que nos seguintes resultados para o comutador dos operadores posição e momento:

$$\hat{k}[\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{k}^{-1} = \hat{k}(i\hbar)\hat{k}^{-1} \quad (2.26)$$

$$= [\hat{k}\hat{x}\hat{k}^{-1}, \hat{k}\hat{p}_x\hat{k}^{-1}] = [\hat{x}, -\hat{p}_x] = -[\hat{x}, \hat{p}_x] = -i\hbar \quad (2.27)$$

pela equação acima notamos que \hat{k} é um operador anti-linear, $\hat{k}i = -i\hat{k}$

Um sistema quântico é dito invariante por reversão temporal se $[\hat{k}, \hat{H}] = 0$. Portanto,

$$\hat{k}\hat{H} = \hat{H}\hat{k} \quad (2.28)$$

$$\hat{k}\hat{H}\hat{k}^{-1} = \hat{H}. \quad (2.29)$$

Pela equação acima é fácil ver que o espectro do hamiltoniano não se altera via transformação do operador \hat{k} .

Aplicando o operador de reversão temporal na equação de Schrodinger obtemos

$$\hat{k} (i\hbar\partial_t + V(|\vec{r}|, t)) \psi(t) = \hat{k} \hat{H} \psi(t) \quad (2.30)$$

podemos utilizar a propriedade de comutação entre H e \hat{k} ,

$$(-i\hbar\partial_t + V(|\vec{r}|, t)) \hat{k} \psi(t) = \hat{H} \hat{k} \psi(t) \quad (2.31)$$

Invertendo o parâmetro tempo na equação acima, $t \rightarrow -t$

$$(i\hbar\partial_t + V(|\vec{r}|, -t)) \hat{k} \psi(-t) = \hat{H} \hat{k} \psi(-t) \quad (2.32)$$

Portanto se $\psi(t)$ é solução para equação de Schrodinger então $\hat{k} \psi(-t)$ também é, e o mesmo pode ser identificado como a solução reversa no tempo para equação

$$\psi(t)_{rev} = \hat{k} \psi(-t) \quad (2.33)$$

2.4.1.2 Simetria de Reversão Temporal e Espectro

O estudo da topologia nos sistemas quânticos aqui apresentados pode ser entendido como o estudo de transformações que podem levar um dado hamiltoniano H em um H' de forma contínua, isto é, se podemos deformar simetrias de nosso hamiltoniano de forma suave por um dado caminho de modo que obtemos um mapeamento $H \rightarrow H'$. Se esse mapeamento é possível podemos dizer que o hamiltonianos possuem a mesma topologia dado esta transformação.

Utilizando a tabela 1 de (Schnyder et al., 2008) podemos gerar matrizes randômicas, H' e H ambas tendo simetria de reversão temporal. Munidos dessas matrizes e do mapeamento

$$f(\alpha) = \alpha H' + (1 - \alpha)H,$$

onde $\alpha \in [0, 1]$, deformamos uma matriz na outra, a medida que alteramos o parâmetro α calculamos o espectro de autovalores¹²

2.4.2 Simetria de Subrede, Quiral

Seja ψ a função de onda tal que ela é autoestado do Hamiltoniano do sistema, H , sendo que os autovalores só dependem da variável cor, isto é

$$H \circ \psi(i, j) = E(cor, i) \cdot \psi(i, j)$$

o que nos permite definir o conjunto de autoestados do sistema como,

$$\Psi_H := \{\psi(i, j) | i \in \mathbb{Z}, cor \in \{1, -1\}\},$$

¹² Neste caso o número de estados abaixo do nível de fermi é o invariante topológico (36).

e o conjunto de autovalores associado ao conjunto de autoestados,

$$\mathcal{E}_{H,\psi} := \{E(\text{cor}, i) | E(\text{cor}, i)\},$$

Definimos o grupo de simetria do sistema como o conjunto de todas as funções, f , tal que a atuação da mesma em um autoestado do sistema leva a um autoestado do sistema, não necessariamente ao mesmo, mas que f atuando em todos os elementos do conjunto de todos os autoestados de H

$$f : \Psi_H \mapsto \Phi_H$$

tal que

$$\mathcal{E}_{H,\phi} = \mathcal{E}_{H,\psi}$$

A condição mais forte é que as funções f precisam comutar com os operador H ,

$$\begin{aligned} A \circ (H \circ \psi(i, j)) &= f \circ (E(\text{cor}, i) \cdot \psi(i, j)) \\ &= E(\text{cor}, i) \cdot (f \circ \psi(i, j)) \end{aligned} \quad (2.34)$$

Por simplicidade assumiremos primeiro que

$$H \circ (f \circ \psi(i, j)) = E(\text{cor}, i) \cdot (f \circ \psi(i, j)) \quad (2.35)$$

Igualando as duas equações anteriores temos que

$$H \circ (f \circ \psi(i, j)) = f \circ (H \circ \psi(i, j)) \quad (2.36)$$

$$(H \circ f) \circ \psi(i, j) = (f \circ H) \circ \psi(i, j) \quad (2.37)$$

Isso significa que as funções H e f comutam, podemos dizer também que os diagramas comutam-se entre si!

Agora a situação fica um pouco mais interessante quando supomos que a distribuição de autovalores também possui simetrias, então suponha que

$$E(i, \text{cor}) = -E(-i, \text{cor})$$

Nesse caso podemos supor agora um segundo conjunto de funções, G , tal que para todo $q \in Q$,

$$H \circ (q \circ \psi(i, j)) = E(-\text{cor}, i) \cdot q \circ \psi(i, j) = -E(\text{cor}, i) \cdot q \circ \psi(i, j) \quad (2.38)$$

Seguindo os passos anteriores é fácil ver que

$$H \circ (q \circ \psi(i, j)) = -q \circ (H \circ \psi(i, j)) \quad (2.39)$$

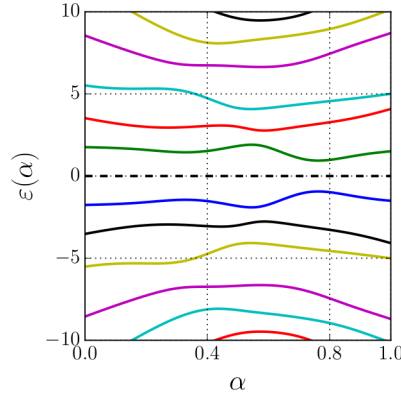
$$(H \circ q) \circ \psi(i, j) = (-q \circ H) \circ \psi(i, j) \quad (2.40)$$

$$(2.41)$$

Ou seja, se todo elemento de um grupo de funções é tal que anticomuta com o Hamiltoniano então temos um espectro simétrico de autovalores em relação ao 0, e o grupo G é um grupo de simetria! Esse grupo de simetria é chamado grupo quiral¹³.

Assim como no caso da simetria de reversão temporal podemos gerar duas matrizes pertencentes a classe $AIII$, tal que a deformação gera o gráfico abaixo

Figura 10 – Transformação classe de simetria $AIII$ para outra $AIII$



Fonte: Próprio autor

A deformação entre as matrizes pertencentes a classe $AIII$ demonstra um comportamento de repulsão a medida que os estados se aproximam do nível de Fermi.

A simetria quiral¹⁴ é de suma importância para o presente trabalho, (Schnyder et al., 2009) define a matriz de simetria quiral, C , se para o hamiltoniano H ,

$$\{H, C\} = 0, \quad CC^\dagger = 1, \quad C^2 = 1. \quad (2.42)$$

As condições acima implicam na já abordada simetria do espectro de autovalores com relação ao nível de Fermi. Matricialmente se o hamiltoniano possui simetria quiral, então ele pode ser posto na seguinte forma

$$H = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{A}^\dagger \\ \mathbf{A} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (2.43)$$

No anexo discutimos um pouco mais tal simetria e sua relação no modelo deduzido nessa dissertação.

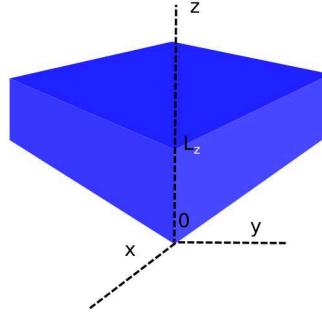
¹³ É importante notar que só faz sentido falar em simetria quiral quando consideramos todo o conjunto de autovalores, isso é, é uma simetria global. Enquanto que quando temos funções que comutam com o hamiltoniano podemos falar em simetrias locais e globais.

¹⁴ Não deve-se confundir a simetria quiral aqui apresentada com a simetria quiral da física de partículas, embora ambas tenham influências similares a última é mais restritiva.

2.5 Modelo Efetivo

Como dito na introdução do presente trabalho um dos objetivos do mesmo é desenvolver uma modelo discreto que possa ser utilizado para fortalecer ou invalidar a hipótese de Cho et al. sobre a presença ou ausência da fenomenologia Kondo no arranjo experimental feito pelos mesmos. Para tal tornou-se necessário obter um modelo efetivo que pudesse ser utilizado e discretizado.

Figura 11 – Representação do sistema de coordenadas e do sistema.



Fonte: Próprio autor

Supõe-se que ocorra confinamento apenas na dimensão z .

A equação abaixo apresenta o modelo proposto por Zhang et al. para descrever os estados de bulk próximo do ponto Γ para o Bi_2Se_3 ,

$$\begin{aligned} H_{3D} &= H_z + H_{xy} \\ H_z &= m_0 \gamma_{03} + A_z \gamma_{31} k_z \\ H_{xy} &= A_{xy} \gamma_{11} k_x + A_{xy} \gamma_{21} k_y \end{aligned}$$

onde

$$\gamma_{ij} = \sigma_i \otimes \sigma_j,$$

onde σ_i é a i -ésima matriz de Pauli. Na forma matricial temos

$$H_{3D} = \begin{pmatrix} \sigma_z m_0 + A_z \sigma_x k_z & A_{xy} k_- \\ A_{xy} k_+ & \sigma_z m_0 - A_z \sigma_x k_z \end{pmatrix}$$

onde $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$, e a base é formada por autovetores de orbital e spin tal que

$$H_{3D} \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z)$$

No nosso caso torna-se necessário projetar o hamiltoniano na base das superfícies, pois o intuito é modelar o sistema 3D como constituído por duas superfícies, a superior e a inferior tal que seja permitido acoplar o metal em uma de suas superfícies.

Assumimos que os autovetores são separáveis, isto é,

$$H_z = \begin{pmatrix} m_0 & A_z k_z & 0 & 0 \\ A_z k_z & -m_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_0 & -A_z k_z \\ 0 & 0 & -A_z k_z & -m_0 \end{pmatrix}$$

$$\Psi(x, y, z) = \psi(x, y)\phi(z),$$

tal que ϵ_z é autovalor de $\phi(z)$,

$$\begin{aligned} H_z \psi(x, y)\phi(z) &= \psi(x, y)H_z \phi(z) \\ &= \epsilon_z \psi(x, y)\phi(z). \end{aligned}$$

Desejamos obter a matriz, \mathcal{M} , cujo os autovalores sejam os vetores de onda k_z , podemos obter esse operador através dos seguintes passos:

$$\begin{aligned} H_z \phi(z) &= \epsilon_z \phi(z) \\ (m_0 \gamma_{03} + A_z \gamma_{31} k_z) \phi(z) &= \epsilon_z \phi(z) \\ (m_0 \gamma_{03} - \epsilon_z) \phi(z) &= -A_z \gamma_{31} k_z \phi(z) \\ -\frac{\gamma_{31}^{-1}}{A_z} (m_0 \gamma_{03} - \epsilon_z) \phi(z) &= k_z \phi(z) \\ \mathcal{M} \phi(z) &= k_z \phi(z). \end{aligned}$$

Diagonalizando \mathcal{M} obtemos o seguinte conjunto de autovalores (k_z)

$$\left\{ \frac{\sqrt{\epsilon_z^2 - m_0^2}}{A_z}, -\frac{\sqrt{\epsilon_z^2 - m_0^2}}{A_z}, \frac{\sqrt{\epsilon_z^2 - m_0^2}}{A_z}, -\frac{\sqrt{\epsilon_z^2 - m_0^2}}{A_z} \right\},$$

onde $m_0 \geq 0$.

Assumindo que $\epsilon_z = 0$ os autovalores tornam-se

$$\left\{ \frac{im_0}{A_z}, \frac{im_0}{A_z}, -\frac{im_0}{A_z}, -\frac{im_0}{A_z} \right\}.$$

Como todos os autovalores são complexos podemos propor um ansatz evanescente,

$$\phi(z) = \chi e^{ik_z z}. \quad (2.44)$$

dados as condições anteriores os autovetores da matrix \mathcal{M} são

$$\chi_j = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Então, supondo que cada superfície contribui com um estado evanescente temos que

$$\begin{aligned}\phi_{z_0}(z) &= \chi_{z_0} e^{-\lambda z} \\ \phi_{z_l}(z) &= \chi_{z_l} e^{-\lambda(z_l - z)}\end{aligned}$$

As soluções acima só fazem sentido se imaginarmos que cada superfície está isolada, mas podemos usar tais soluções para construir a solução para o sistema com as duas superfícies.

2.5.1 Condições de Contorno

Utilizando as condições propostas por (39) podemos avaliar o comportamento da função $\phi(z)$ próxima as interfaces através da utilização de um termo que confina as soluções em cada superfície, isto é feito utilizando um potencial degrau suave, $\tilde{\theta}(-z)$, sujeito a condição

$$\tilde{\theta}(-z) (1 - \tilde{\theta}(-z)) \approx \frac{A_z}{m_z} \delta(z).$$

2.5.1.1 Vizinhanças de $z = 0$

Seja $M_z(z) = m_z \tilde{\theta}(-z)$ o potencial responsável pelo confinamento em z . Temos que uma solução confinada na interface $z = 0$ é dada por

$$\phi(z) = (1 - \tilde{\theta}(-z)) \phi_0.$$

Como estamos abordando os autoestados do operador k_z ,

$$\begin{aligned}k_z \phi(z) &= -i \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \\ &= - \left(0 - \frac{\partial \tilde{\theta}(-z)}{\partial z} \right) \phi_0 \\ &\approx -i \phi_0 \delta(z).\end{aligned}$$

Utilizando o confinamento

$$\begin{aligned}M_z \phi(z) &= m_z \tilde{\theta}(-z) (1 - \tilde{\theta}(-z)) \phi_0 \\ &= m_z \phi_0 \tilde{\theta}(-z) (1 - \tilde{\theta}(-z)) \\ &\approx A_z \phi_0 \delta(z)\end{aligned}$$

Propõe-se o Hamiltoniano efetivo condicionado na superfície,

$$\tilde{H}_z = H_z + M_z(z) \gamma_{03},$$

tal que a equação de autovalores e autovetores retorna

$$\begin{aligned}\tilde{H}_z \phi(z) &= m_0 \gamma_{03} \phi(z) + A_z \gamma_{31} k_z \phi_z + M_z(z) \gamma_{30} \phi(z) \\ &= m_0 \gamma_{03} \phi(z) + A_z \gamma_{31} (-i \phi_0 \delta(z)) + A_z \gamma_{30} \phi_0 \delta(z)\end{aligned}$$

Utilizando o pressuposto anterior que $\varepsilon_z = 0$ e integrando a equação acima em uma vizinhança centrada em $z = 0$ temos que

$$\begin{aligned}\lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\eta}^{\eta} dz \tilde{H}_z \phi(z) &= 0 - i A_z \phi_0 \gamma_{31} + A_z \phi_0 \gamma_{30} \\ 0 &= (-i \gamma_{31} + \gamma_{30}) A_z \phi_0 \\ 0 &= \Gamma_0 A_z \phi_0.\end{aligned}$$

Portanto, obtemos nossa primeira condição de contorno,

$$\Gamma_0 \phi_0 = 0,$$

onde Γ_0 é a matriz de confinamento,

$$\Gamma_0 = \gamma_{30} - i \gamma_{31}$$

2.5.1.2 Vizinhanças de $z = l$

De forma análoga teremos para o caso $z = l$ obtêm-se a condição de contorno

$$\Gamma_l \phi_l = 0,$$

onde Γ_l é a matriz de confinamento em $z = l$ dada por

$$\Gamma_l = i \gamma_{31} + \gamma_{03}.$$

2.5.1.3 Estudando caso semi-infinito

Propõe-se que o estado em cada superfície pode ser descrito por uma combinação de autoestados dados pela equação 2.44

$$\phi_0(z) = \sum_{j=1}^2 c_j \chi_j e^{-\lambda_j z}$$

Calculando a função no ponto $z = 0$ temos

$$\phi_0(z = 0) = \sum_{j=1}^2 c_j \chi_j.$$

Aplicando o operador de confinamento na equação acima

$$\Gamma_0 \phi_0 = \sum_{j=1}^2 c_j \Gamma_0 \chi_j = 0$$

obtêm-se

$$\sum_{j=1}^2 c_j \Gamma_0 \chi_j = 0$$

onde χ_j é um autovetor descrito na equação 2.45.

A forma matricial de Γ_0 é

$$\Gamma_0 = \begin{pmatrix} \sigma_z - i \sigma_x & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\sigma_z + i \sigma_x \end{pmatrix} = \tau_z \otimes (\sigma_z - i \sigma_x)$$

tal que

$$c_2 \Gamma_0 \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = c_1 \Gamma_0 \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ i \\ 1 \end{pmatrix}.$$

A solução não trivial para a equação acima é $c_1 = 1(0)$ e $c_2 = 0(1)$.

Caso semi-infinito, $z = 0$

$$H_0 = H_z + M_{z=0}(z) \gamma_{03}$$

Caso Semi-infinito, $z = l$

$$H_l = H_z + M_{z=l}(z) \gamma_{03}$$

Podemos propor o modelo efetivo para o caso 3D como uma combinação das soluções para os casos semi-infinitos

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{3D} &= H_{xy} + \tilde{H}_z \\ &= H_{xy} + H_z + (M_{z=0}(z) + M_{z=l}(z)) \gamma_{03} \end{aligned}$$

A equação acima pode ser escrita como

$$\tilde{H}_z = H_0 + M_{z=l}(z) \gamma_{03}$$

ou

$$\tilde{H}_z = H_l + M_{z=0}(z) \gamma_{03}$$

O motivo de escrever H nas duas formas será mostrado a seguir pois definimos que $H_0(H_l)$ se anula na interface *superior(inferior)* ou seja

$$\tilde{H}_z = \begin{cases} H_0 \phi_j = \varepsilon_z \phi_j = 0 & , j = 1, 2 \\ H_l \phi_j = \varepsilon_z \phi_j = 0 & , j = 3, 4 \end{cases}$$

Com as condições descritas pelas equações acima podemos descrever o Hamiltoniano efetivo, H_{EFF} .

Bloco superior

$$\begin{aligned}
[H_{EFF}]_{12} &= \langle 1 | H_{xy} + \tilde{H}_z | 2 \rangle \\
&= \langle 1 | H_{xy} | 2 \rangle + \langle 1 | H_0 | 2 \rangle + \langle 1 | M_{z=l}(z) \gamma_{03} | 2 \rangle \\
&= \langle 1 | H_{xy} | 2 \rangle + 0 + \langle 1 | M_{z=l}(z) \gamma_{03} | 2 \rangle \\
&= [H_{xy}]_{12} + [M_{z=l}]_{12}
\end{aligned}$$

O último termo é calculado pela integral

$$\begin{aligned}
[M_{z=l}]_{12} &= \langle 1 | M_{z=l}(z) \gamma_{03} | 2 \rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_1^\dagger(z) M_{z=l}(z) \gamma_{03} \psi_2(z) \\
&= m_z \int_l^\infty dz \psi_1^\dagger(z) \gamma_{03} \psi_2(z).
\end{aligned}$$

Utilizando o resultado obtido anteriormente

$$\psi_j(z) = \chi_j e^{ik_j z},$$

demonstra-se que o último termo é nulo,

$$\begin{aligned}
[M_{z=l}]_{12} &= m_z \int_l^\infty dz \psi_1^\dagger(z) \gamma_{03} \psi_2(z) \\
&= m_z \int_l^\infty dz e^{-2\frac{m_0}{A_z} z} \chi_2^\dagger \gamma_{03} \chi_1 \\
&= m_z \int_l^\infty dz e^{-2\frac{m_0}{A_z} z} 0 = 0.
\end{aligned}$$

O primeiro termo é calculado de forma similar,

$$\begin{aligned}
[H_{xy}]_{12} &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_1^\dagger(z) H_{xy} \psi_2(z) \\
&= A_{xy} \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_1^\dagger(z) [\gamma_{11} k_x + \gamma_{21} k_y] \psi_2(z) \\
&= \frac{i A_{xy}^2 A_z}{2m_0 m_z} k_+
\end{aligned}$$

onde $k_\pm = k_x \pm ik_y$. No hamiltoniano efetivo os elementos que acoplam as superfícies apenas termos do tipo $i, j \mid \forall |i - j| = 2$ sobrevivem. Exemplo,

$$\begin{aligned}
\langle j | M(z) \gamma_{03} | 1 \rangle &= m_z \int_l^\infty dz \chi_3^\dagger \gamma_{03} \chi_1 e^{(\omega - z) \frac{m_z}{A_{xy}}} e^{i(i \frac{m_0}{A_{xy}} z)} \\
&= (-2) m_z e^{\omega \frac{m_z}{A_{xy}}} \int_l^\infty dz e^{-\frac{z}{A_{xy}} (m_0 + m_z)} \\
&= -2 \frac{m_z e^{-\frac{m_0}{A_{xy}}}}{m_z + m_0}
\end{aligned}$$

Tomando o limite na equação acima no qual $m_z \gg m_0$, temos

$$\langle j|M(z)\gamma_{03}|1\rangle = -2A_{xy}e^{-\frac{m_0}{A_{xy}}}.$$

Repetindo o processo, obtemos a matriz efetiva

$$H_{EFF} = \begin{pmatrix} 0 & i\hbar v_f k_+ & \Delta & 0 \\ -i\hbar v_f k_- & 0 & 0 & \Delta \\ \Delta & 0 & 0 & -i\hbar v_f k_+ \\ 0 & \Delta & i\hbar v_f k_- & 0 \end{pmatrix}$$

na equação acima, no limite que $m_z \gg m_0$ obtêm-se

$$v_f = \frac{A_z A_{xy}^2}{2\hbar m_0 m_z}$$

Devido ao acoplamento com um metal, podemos esperar que ocorra um acúmulo de carga na superfície de contato devido as diferenças entre os materiais, o que ocasionaria a formação de um campo elétrico na direção z .

$$H_{2D} = \varepsilon_0 + \hbar v_F(k_x \gamma_{zy} - k_y \gamma_{zx}) + F\gamma_{z0} + \Delta\gamma_{x0} + B\gamma_{0z}, \quad (2.46)$$

Desejamos que o leitor tenha um foco especial no termo $\Delta\gamma_{x0}$ na equação 2.46. Esse termo representa o acoplamento entre as superfícies e um estudo sobre as quebras de simetrias que tal termo causa é feito no apêndice, como é mostrado lá tal termo é responsável por uma quebra de simetria quiral. O fato que o modelo 3D já apresenta uma quebra de simetria quiral será utilizado posteriormente para escolher o método de discretização.

2.5.2 Condições de Contorno e equações de Dirac.

No caso não relativístico a solução de uma partícula confinada em uma caixa com altura infinita é conhecida. A mesma é obtida ao se assumir que as funções de onda se anulam nas paredes da caixa. Isso parece bastante razoável, mas no caso relativístico não podemos assumir o mesmo (Alonso, Vincenzo e Mondino, 1997). É possível demonstrar que caso a condição de anulamento nas paredes seja assumida em uma equação do tipo Dirac, então a única solução possível para tal equação é a trivial, o que não faz nenhum sentido físico. Portanto, ao analisar equações diferenciais do tipo Dirac devemos tomar cuidado ao impor as condições de contorno, seja na física de partículas ou na matéria condensada.

2.5.2.1 Partícula relativística em uma caixa unidimensional.

Para demonstrar a problemática das condições de contorno em equações do tipo Dirac iniciemos com o hamiltoniano relativístico para partícula livre,

$$H\vec{\psi} = E\vec{\psi} = (-i\hbar c\sigma_x \frac{d}{dx} + mc^2\beta)\vec{\psi}, \quad (2.47)$$

onde

$$\vec{\psi} = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

é o spinor.

A equação do tipo Dirac é uma equação que acopla as componentes de $\vec{\psi}$,

$$\begin{aligned} -i\hbar c \sigma_x \cdot \frac{d}{dx} \chi + mc^2 \beta \phi &= E \phi, \\ -i\hbar c \sigma_x \cdot \frac{d}{dx} \phi + mc^2 \beta \chi &= E \chi. \end{aligned}$$

Podemos isolar a componente inferior do spinor,

$$\chi = \frac{-i\hbar c \frac{d}{dx} \phi}{E - mc^2}$$

a equação acima permite encontrar a equação diferencial para ϕ ,

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix}, \quad (2.49)$$

onde $k^2 = (E^2 - (mc^2)^2)^{1/2}$.

2.5.2.2 Uma tentativa de solução com a condição de contorno errada.

Assumindo que $\phi_2 = 0$ e $\chi_1 = 0$, a solução mais geral é

$$\phi_1 = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

Utilizando a equação (2.49) e a solução acima obtêm-se

$$\chi_2 = \frac{\hbar c k}{E + mc^2} (A_1 e^{ikx} - B_1 e^{-ikx}).$$

Se ambas as componentes se anularem nas paredes, isto é, $\phi(x=0) = 0$ e $\chi(x=0) = 0$, obtêm-se o seguinte sistema linear

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= 0 \\ (A_1 - B_1)ik &= 0 \end{aligned}$$

A única solução possível para o sistema acima seria a solução trivial, $A_1 = B_1 = 0$, o que não faz sentido físico, isto é, a condição de contorno utilizada não representa um sistema físico.

Na literatura da matéria condensada é possível encontrar diversos trabalhos abordando os problemas das condições de contorno em equações do tipo Dirac (Ferreira e Loss, 2013).

No presente trabalho apresentamos como podemos satisfazer as condições de contorno do problema ao mesmo tempo que removemos os estados duplicados originados pela utilização de uma rede.

2.6 Discretização e problema da duplicação de fermions

Para efetuar os cálculos computacionais, tornou-se necessário discretizar nosso hamiltoniano utilizando a metodologia de diferenças finitas. Como dito na introdução do presente trabalho, tal discretização no contexto de isolantes topológicos traz consigo a problemática da duplicação de fermions.

Como exemplo do problema da duplicação de fermions(pdf) seja um hamiltoniano

$$-iv_F(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)\psi = H\psi(x, y), \quad (2.50)$$

onde $k_x(k_y)$ é o operador de vetor de onda na direção $x(y)$. Tal operador têm a seguinte forma

$$k_l = -i \frac{\partial}{\partial x^l}. \quad (2.51)$$

Para descrever o hamiltoniano (2.50) em uma rede¹⁵ pode-se aproximar a derivada por um elemento de diferença finita simétrico.

A aproximação da aplicação de k em função f é

$$k_l : f(x^0, \dots, x^l, \dots x^d) \rightarrow \frac{f(x^0, \dots, x^l + a, \dots x^d) - f(x^0, \dots, x^l - a, \dots x^d)}{2a}. \quad (2.52)$$

Usando a definição acima a equação (2.50) é expressa em uma rede discreta de espaçamento a , tendo a seguinte forma

$$\begin{aligned} & -i \frac{v_f}{2a} \sigma_x (\Psi_{x,y+a} - \Psi_{x,y-a}) \\ & + i \frac{v_f}{2a} \sigma_y (\Psi_{x+a,y} - \Psi_{x-a,y}) = E \Psi_{x,y}, \end{aligned} \quad (2.53)$$

onde foi usado $H\Psi_{x,y} = E\Psi_{x,y}$.

Assumindo sem perda de generalidade que

$$\Psi_{x,y} = \begin{pmatrix} \alpha_{x,y} \\ \beta_{x,y} \end{pmatrix}, \quad (2.54)$$

uma solução para a equação diferencial terá a forma

$$\begin{pmatrix} \alpha_{x,y} \\ \beta_{x,y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \beta_0 \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (2.55)$$

onde α_0, β_0 são escalares.

¹⁵ Sempre se assumirá que nossa rede tem espaçamento a .

Substituindo a solução proposta na equação para a rede discreta obtemos um conjunto de duas equações

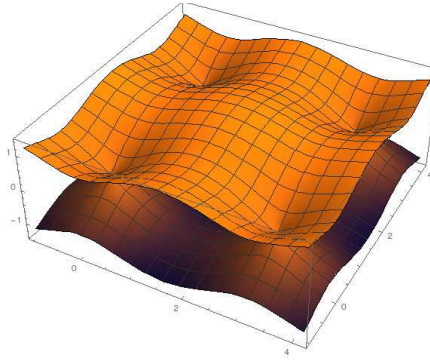
$$\begin{aligned} (\sin(k_y a) - i \sin(k_x a)) \beta_0 &= E \alpha_0 \\ (\sin(k_y a) + i \sin(k_x a)) \alpha_0 &= E \beta_0. \end{aligned} \quad (2.56)$$

As equações descritas em (2.56) definem uma relação entre a energia do sistema e os seus respectivos vetores de onda,

$$E = \pm \sqrt{\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y)}. \quad (2.57)$$

Note que a equação acima possui quatro pontos no espaço k no qual a energia se anula, esses pontos são apresentados na figura 12.

Figura 12 – Gráfico de Energia para um rede discreta bidimensional em função de k_x e k_y .



Fonte: Próprio autor

Note que os pontos $(0, 0)$, $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ e (π, π) presentes na zona de Briolluin dão origem a quatro cones o que entra em desacordo com o resultado do modelo contínuo.

A presença desses cones “fictícios” deriva da escolha de aproximar a derivada por uma diferença finita simétrica, apesar da afirmação ser verdadeira o Teorema de Nielsen-Ninomiya (41) garante que é impossível descrever férmions em uma rede tal que não ocorra a duplicação de “sabores” sem que alguma propriedade original do Hamiltoniano contínuo seja removida.

2.6.1 O teorema de Nielsen-Ninomiya

Como dito anteriormente, a presença dos falsos cones de Dirac não pode ser removida sem a perda de alguma propriedade do hamiltoniano original. A demonstração de tal impossibilidade ocorreu nos trabalhos de (Nielsen e Ninomiya, 1981) no qual, usando argumentos topológicos os autores conseguiram formular o teorema sobre a ausência de neutrinos em redes. Posteriormente (Karsten, 1981) apresenta uma nova prova do teorema de Nelson-Ninomiya utilizando se para isso de um resultado bem estabelecido na matemática, o teorema de Poincaré-Hopf, anteriormente abordado no presente trabalho.

Aqui demonstraremos o problema para uma rede bidimensional onde os estados são descritos por um Hamiltoniano bidimensional em contraste com o caso $4D$ relativístico de (Karsten, 1981).

Para iniciar a demonstração é necessário primeiro entender qual tipo de variedade os vetores de onda pertencem. Para isso tome como exemplo uma rede quadrada de espaçamento a e assumamos que o Hamiltoniano é independente do tempo¹⁶. Temos que a estrutura de bandas é um 2-torus, tal que a característica de Euler,

$$\begin{aligned}\chi(T^2) &= \chi(S^1 \times S^1) \\ &= \chi(S^1) \times \chi(S^1) \\ &= 2 - 2 = 0,\end{aligned}$$

é zero.

tal que $p \in T^2$, o mapeamento F é tal que

$$F : T^2 \rightarrow V : p \rightarrow F(p)$$

onde $F(p) \in V$

2.7 Contornando o problema da duplicação de fermions

Na seção 2.6 é apresentado o problema da duplicação de férmions. Nessa seção discute-se a problemática da discretização e da duplicação de férmions afirmando que para um Hamiltoniano similar ao de Dirac não é possível descrever férmions em uma rede sem que ocorra duplicação e nenhuma propriedade do hamiltoniano seja violada. Na literatura de física de partículas existem diversas alternativas para se contornar o problema da duplicação, entre elas podemos citar as técnicas de *staggered fermions* (Kogut e Susskind, 1975), *massas de Wilson* (Wilson, 1974), *twisted Wilson mass* (Janssen et al., 2016), *exact chiral fermions* e *kaplan fermions* (Kaplan e Tait, 2001), (Kaplan e Sun, 2012). Cada uma dessas técnicas viola alguma propriedade.

Dentre os exemplos de técnicas listados no parágrafo anterior na matéria condensada o uso de *staggered fermions* tem sido comum para modelagem do grafeno e recentemente a massa de Wilson tem sido utilizada para modelar isolantes topológicos. Entretanto, nessa última as massas de Wilson não parecem ter sido bem compreendidas na literatura, pois é comum que seja citado que o termo de Wilson remove a simetria de reversão temporal. Isso nem sempre é verdade, o termo de Wilson quebra quiralidade, e no caso de isolantes topológicos $3D$ (como mostrado anteriormente) o sistema já possui uma simetria quiral quebrada.

Nas seções seguintes faremos uma breve revisão de alguns métodos utilizados na literatura e posteriormente discutiremos a nossa solução.

¹⁶ Assim removemos mais uma dimensão do problema.

2.7.1 Potenciais localizados

(Seshadri e Sen, 2014) argumentam que é possível utilizar um modelo de rede onde potenciais localizados são escolhidos de modo que a esse potencial gaussiano evite o PDF.

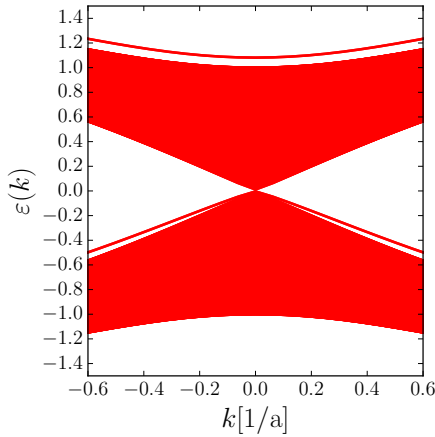
Um exemplo utilizado por Seshadri e Sen é o potencial descrito na equação abaixo

$$V_{n_y} = \frac{V_b}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(n_y - n_0)^2 / (2\sigma^2)}. \quad (2.58)$$

Segundo Seshadri e Sen ao adicionar o potencial descrito acima os estados duplicados, os quais estão distantes do ponto $k = 0$, não contribuirão de forma relevante para o transporte.

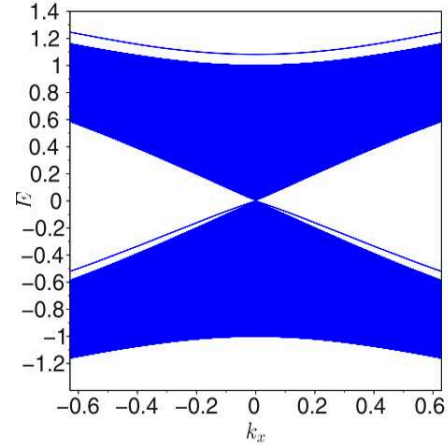
Utilizando o Hamiltoniano (2.50), o qual também é utilizado por Seshadri e Sen. Plotamos abaixo a estrutura de bandas para uma nanofita utilizando os mesmos parâmetros do autor.

Figura 13 – Estrutura de bandas para nanofita com potencial localizado. Comparação com resultados da literatura. da literatura.



Fonte: Próprio autor

Estrutura de bandas obtida via discretização para os mesmos parâmetros utilizados na plotagem da figura 2.(a) de (Seshadri e Sen, 2014). $N_y = 201$, $a = 1$, $\sigma = 2$, $V_b = \pi/4$, $y_0 = N_y/2$.

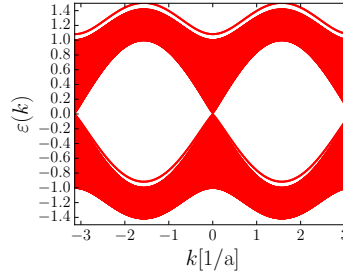


Fonte: (Seshadri e Sen, 2014).

Estrutura de bandas obtida via discretização para $N_y = 201$, $a = 1$, $\sigma = 2$, $V_b = \pi/4$, $y_0 = N_y/2$.

Como pode ser notado nos gráficos acima a banda de condução apresentada por Seshadri e Sen esta de acordo com o Hamiltoniano proposto pelo autor. Mas é importante notar que como fora dito por Seshadri e Sen os estados duplicados não são removidos, o que pode ser notado ao escolher uma região maior para o gráfico(o que não é mostrado no artigo original).

No trabalho de Seshadri e Sen o mesmo utiliza essa conjectura para modelar o transporte em isolantes topológicos onde existe a presença de uma impureza, utilizando para isso um modelo discreto, segundo a hipótese deste trabalho a impureza contribuirá com um termo de potencial do tipo apresentado na equação (2.58).

Figura 14 – Estrutura de Bandas utilizando o método de confinamento em k .

Fonte: Próprio autor

Como pode ser notado na figura os estados duplicados não são removidos.

Na secção de resultados discutiremos mais sobre a validade dessa conjectura, isto é, apenas um termo de potencial de localização é suficiente para remover os efeitos indesejáveis do PDF.

2.7.2 Massas de Wilson

Uma outra alternativa para remover os estados duplicados consiste em adicionar um termo de massa proporcional a k^2 de modo que os *doublers* ganham um termo de energia extra que é responsável por abrir o gap em torno de $k \approx \frac{\pi}{a}$ (Wilson, 1974) .

Para elucidar o efeito de tal termo tomemos como exemplo um sistema com simetria de translação no eixo x e tamanho finito ao longo de y , de modo que o Hamiltoniano desse sistema possa ser descrito pela equação abaixo

$$H = v_f \sigma_x \tau_z k_y - v_f \sigma_y \tau_z k_x + (k_x^2 + k_y^2) m_W \tau, \quad (2.59)$$

onde m_W é a massa de Wilson e a matriz τ será discutida posteriormente.

Os passos que serão apresentados abaixo mostram o efeito do termo massivo no espectro de autovalores do Hamiltoniano, demonstrando que o mesmo é responsável por abrir o gap em torno de $k \approx \frac{\pi}{a}$.

Primeiramente, propõe-se que as autofunções de H são separáveis,

$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) = E\phi(x)\varphi(y), \quad (2.60)$$

dividindo a equação acima por $\phi(x)\varphi(y)$ obtemos equações que não misturam termos k_x e k_y . Portanto, é permitido separar as expressões em k_x e k_y e igualar as expressões a uma constante, C ,

$$-v_f \sigma_y \tau_z k_x \phi(x) + m_W \tau k_x^2 \phi(x) = C \phi(x), \quad (2.61)$$

$$E\varphi(y) - v_f \sigma_y \tau_z k_y \varphi(y) - m_W \tau k_y^2 \varphi(y) = C \varphi(y). \quad (2.62)$$

Utilizando diferenças finitas com derivadas simétricas temos que para expressão com termos k_x ,

$$iv_F\sigma_y\tau_z k_x \frac{\phi(x+a) - \phi(x-a)}{2a} - m_W\tau \frac{\phi(x+a) + \phi(x-a) - 2\phi(x)}{4a^2} = C\phi(x). \quad (2.63)$$

Devido a simetria em translações em x podemos utilizar a relação

$$\phi(x \pm a) = e^{\pm ik_x a} \phi(x), \quad (2.64)$$

na expressão (2.63), o que permite escrever a mesma em termos de funções trigonométricas,

$$-v_F\sigma_y\tau_z k_x \frac{\text{sen}(k_x a)}{a} - m_W\tau \frac{\cos(k_x a) - 1}{2a^2} = C. \quad (2.65)$$

Utilizaremos a equação acima posteriormente. Seguindo passos semelhantes aos anteriores obteremos uma expressão para $\varphi(y)$ utilizando também derivadas simétricas,

$$E\sigma_0\tau_0\varphi(y) + iv_F\sigma_y\tau_z \frac{\varphi(y+a) - \varphi(y-a)}{2a} + m_W\tau \frac{\varphi(y+a) + \varphi(y-a) - \varphi(y)}{4a^2} - C\varphi(y) = 0. \quad (2.66)$$

A teoria de transformadas discretas de Fourier permite escrever uma função de período N_y ¹⁷ como (Arfken e Weber)

$$\varphi(y_n) = \frac{1}{N_y} \sum_{l=0}^{N-1} e^{i\tilde{k}_l n} \varphi(k_l), \quad (2.67)$$

onde, por simplicidade, k_l representa a l -ésima componente do momento ao longo de y . Também foi definido que

$$\tilde{k}_l = 2\pi a \frac{k_l}{N_y}.$$

Aplicando a equação (2.67) em (2.66) e utilizando a notação complexa para funções trigonométricas obtêm-se

$$\frac{1}{N_y} \sum_{l=0}^{N-1} \left[E\sigma_0\tau_0 - v_F\sigma_y\tau_z \frac{\text{sen}\tilde{k}_l}{a} + m_W\tau \frac{\cos\tilde{k}_l - 1}{2a^2} - C \right] e^{i\tilde{k}_l n} \varphi(k_l) = 0.$$

Substituindo C na equação acima pela expressão obtida em (2.65) obtêm-se

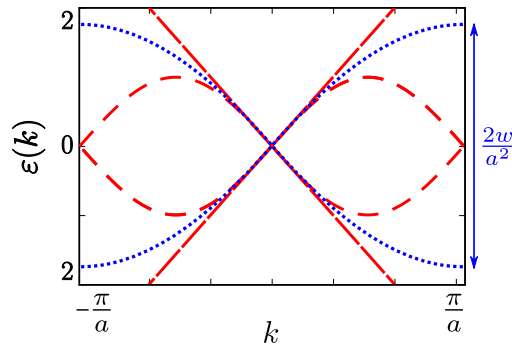
$$\frac{1}{N_y} \sum_{l=0}^{N-1} \left[E\sigma_0\tau_0 + m_W\tau \frac{\cos\tilde{k}_l + \cos k_x a - 2}{2a^2} - v_F\sigma_y\tau_z \frac{\text{sen}\tilde{k}_l - \text{sen}k_x a}{a} \right] e^{i\tilde{k}_l n} \varphi(k_l) = 0. \quad (2.68)$$

Podemos analisar a expressão para dois casos $k_x \approx 0$ e $k_x \approx \pi/a$. Mas note que para os primeiros modos de k_y , os termos em y contribuem com termos oscilantes, por isso estudemos o

¹⁷ N_y é o número de sítios ao longo de y

caso unidimensional mais simples, para tal basta notar que apenas a equação (2.65) é necessária, sendo C no caso unidimensional E . Podemos escolher uma das matrizes τ pertencentes a tupla $(\tau_x\sigma_0, \tau_0\sigma_z)$. Feito isso notemos que a expressão (2.65) para $k_x \approx a$ é tal que os *doublers* terão sua energia acrescida por um fator $2m_w/a^2$ (Bash, 1994). Para o caso bidimensional confinado em y não podemos obter de forma fácil e geral o termo de acréscimo de energia para os *doublers*. Entretanto, como mostrado na equação (2.68) \tilde{k}_l contribui com termos oscilantes, de modo que podemos supor com certa precisão que os *doublers* ganham um termo extra de energia entre o intervalo $[2m_w/a^2, 4m_w/a^2]$.

Figura 15 – Representação esquemática do efeito da adição da massa de Wilson para o caso unidimensional de uma cadeia com periodicidade a .



Fonte: Próprio autor

Em linhas tracejadas (vermelho) representa-se a estrutura de bandas para uma rede discreta sem adição do termo de Wilson. Em linha pontilhada azul mostra-se a estrutura de bandas para o mesmo sistema acrescido de uma massa de Wilson de valor w . As linhas diagonais representam as soluções esperadas para um Hamiltoniano apenas com termos lineares.

Convêm-se perguntar qual é o preço a ser pago ao se utilizar a massa de Wilson. Esta análise será apresentada na seção de Resultados. Em tal seção é demonstrado que a escolha da matriz τ pode ser feita para permitir que a simetria de reversão temporal seja preservada.

2.8 Implementações numéricas

Com o Hamiltoniano efetivo e a técnica de discretização dos fermions escolhidas é necessário escolher a técnica e tecnologia que será utilizada para calcular as propriedades dos sistemas. Durante o desenvolvimento do trabalho avaliamos três métodos: funções de Green recursivas, matriz de transferência e *matching* de funções de onda (kwant).

2.8.1 Funções de Green

O formalismo de funções de Green permite obter as propriedades de sistemas físicos quânticos sem que seja necessário resolver a equação de Schrodinger (Bruus e Flensberg, 2004).

Para cálculos de condutância via formalismo de funções de Green torna-se necessário calcular a função conhecida como propagador entre os reservatórios, G_{LR} . Em nossos estudos obtemos uma expressão recursiva para esse propagador, a qual para uma cadeia de N sítios o propagador do i -ésimo sítio ao fim da cadeia é dado por

$$G_{iN} = \Gamma(i, N-1)g_{ii}V_{i,N-1}G_{N-1,N} + G_{N,N} \prod_{j=i}^{N-1} g_{jj}V_{i,i+1} \prod_{j=2}^{N-1} \Gamma(j, N-1),$$

onde g_{ii} é a função de Green para o i -ésimo sítio isolado, V_{ij} é o termo do Hamiltoniano que acopla o i -ésimo sítio com o j -ésimo sítio e G_{NM} é conhecida como função de Green vestida¹⁸.

Utilizando a expressão anterior demonstra-se que

$$G_{0N} = G_{N,N} \prod_{j=i}^{N-1} g_{jj}V_{i,i+1} \prod_{j=1}^{N-2} \Gamma(j, N-1), \quad (2.69)$$

onde Γ é a seguinte função recursiva:

$$\Gamma(i, j) = (1 - g_{ii}|V_{i,i+1}|^2 g_{i+1,i+1} \Gamma(i+1, j))^{-1}. \quad (2.70)$$

A função acima é restrita pela condição

$$\Gamma(i, i) = 1.$$

Então, para determinar o propagador resta determinar as funções de Green vestidas, tal tarefa pode ser computacionalmente custosa caso o sistema possua muitos sítios. Uma alternativa para obter tais funções com menos custo computacional é conhecido como funções de Green recursivas (Lee e Fisher, Odashima, Prado e Vernek, Thouless e Kirkpatrick).

Embora as funções de Green e seu método recursivo pareça interessante ele esbarra em algumas dificuldades. Por exemplo, para uma geometria genérica (não tão simples como uma nanofita) é necessário projetar novos algoritmos de recursividade, além do que os métodos de funções de Green apresentam um maior consumo de memória quando comparadas com outros métodos.

2.8.2 Matriz de Espalhamento & Kwant

O Kwant é uma biblioteca python de código aberto sobre uma licença BSD-like desenvolvida por (Groth et al., 2014). Segundo os desenvolvedores tal biblioteca possui as seguintes vantagens

1. resolve problemas envolvendo regiões de espalhamento de forma eficiente e robusta;
2. permite a integração entre outras bibliotecas;
3. garante alta liberdade para o pesquisador construir diversos tipos de sistemas.

Para calcular as propriedades de transporte o kwant utiliza a teoria de matriz S e o formalismo de Landauer-Buttiker (Datta, 1997).

¹⁸ Para uma melhor compreensão de tal termo veja Odashima, Prado e Vernek e Bruus e Flensberg.

2.8.2.1 Formalismo de Landauer-Buttiker

No formalismo de Landauer-Buttiker os reservatórios são definidos por redes semi-infinitas periódicas. Tais reservatórios atuam como guias de onda. Devido a simetria de translação em uma dada direção teremos que as autofunções do operador de translação¹⁹

$$\phi_n(ja) = \prod_{i=1}^j T(a) \chi_n = (\lambda_n)^{ja} \chi_n, \quad (2.71)$$

Como dito anteriormente, nesse formalismo os reservatórios são semi-infinitos, de modo que j pode assumir qualquer valor inteiro positivo, então para garantir a condição de normalização, evitando funções de onda infinitas, é necessário que $|\lambda_n| \leq 1$, ou seja,

$$\phi_n(\infty) = \prod_{i=1}^{\infty} T(a) \chi_n = 0, \quad |\lambda_n| < 1, \quad (2.72)$$

o que é característica de uma solução evanescente, ou

$$\lambda_n = e^{ik_n}, \quad |\lambda_n| = 1 \quad (2.73)$$

que é uma solução do tipo onda plana.

Dado as condições acima descritas a equação a ser resolvida para um dado autoestado χ_n é a solução para equação abaixo

$$(H_L - V_L \lambda_n^{-1} + V_L^\dagger \lambda_n) \chi_n = E \chi_n, \quad (2.74)$$

onde V_L é a matriz de acoplamento dos sítios dos reservatórios e H_L é o Hamiltoniano que descreve os termos de one-site.

Para respeitar as condições dadas pelas duas equações acima, os estados espalhados nos reservatórios são descritos por funções de onda do tipo

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(i) \\ \vdots \\ \Psi_n(i) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1^{in}(i) \\ \vdots \\ \phi_n^{in}(i) \\ \vdots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S_{11} & \cdots & S_{1N_x} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{N_y 1} & \cdots & S_{N_y N_x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1^{out}(i) \\ \vdots \\ \phi_n^{out}(i) \\ \vdots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \tilde{S}_{11} & \cdots & \tilde{S}_{1N_x} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{S}_{N_y 1} & \cdots & \tilde{S}_{N_y N_x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1^{ev}(i) \\ \vdots \\ \phi_n^{ev}(i) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Onde S é a matriz de espalhamento que descreve a região responsável por espalhar as ondas oriundas dos reservatórios.

¹⁹ Isto é: o operador $T(a)$ que quando atua em uma dada função de onda, $\Psi(x)$, translada o argumento da função para $x + a$.

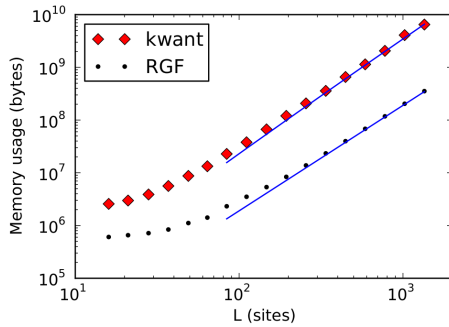
Neste formalismo, o Hamiltoniano pode ser descrito como

$$\hat{H}_{ij} = \sum_{a,b} H_{ia,jb} c_{ia}^\dagger c_{jb}, \quad (2.75)$$

onde i (j) corresponde ao i -ésimo (j -ésimo) sítio da rede, $\sum_{a,b}$ é uma soma sobre os orbitais de cada sítio²⁰, e c_{ia}^\dagger (c_{jb}) criam(aniquilam) uma partícula no sítio i (j) no orbital a (b).

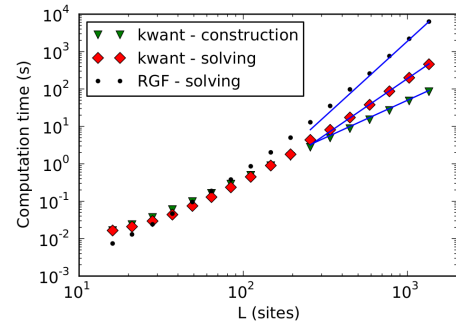
Como mostrado por (Groth et al., 2014) a metodologia utilizada pelo Kwant apresenta resultados superiores em relação ao formalismos de funções de Green recursivas. Os gráficos abaixo foram extraídos de (Groth et al., 2014) e demonstram este resultado.

Figura 16 – Comparação do custo computacional entre o formalismo utilizado pelo kwant e o formalismo de funções de Green recursivas.



Fonte: (Groth et al., 2014)

Consumo de memória em cálculos de condutância por tamanho da cadeia.



Fonte: (Groth et al., 2014)

Tempo computacional gasto para calcular a condutância de uma cadeia em função do número de sítios.

2.8.2.2 Propriedades locais

Para calcular propriedades locais tais como densidade, ou valores esperados, de sistemas fechados o kwant utiliza o formalismo usual de primeira quantização diagonalizando a hamiltoniana do sistema e obtendo os autovetores. Recentemente foi implementado o método conhecido como kpm, *kernel polynomial method* (Weiße et al., 2006), o qual permite calcular a densidade de estados, e consequentemente valores esperados de outros operadores, com um custo computacional muito inferior a metodologia de diagonalização da hamiltoniana.

2.9 Tecnologias utilizadas

Para realização dos cálculos foi utilizado a linguagem Python versão 3.5.2.

Python é uma linguagem de alto nível criada por Guido van Rossum e distribuída desde 1991 e a mesma encontra-se sobre uma licença BSD-style, a qual nos permite usar a linguagem sem restrição alguma. Dentre as vantagens dessa linguagem podemos destacar

²⁰ Graus de liberdade.

- legibilidade e expressividade (McConnell, 2009) (Peters, 2004) ,
- gerenciamento de memória automático,
- suporte a múltiplos paradigmas de programação, tais como orientação a objetos, programação funcional e metaprogramação.

Como desvantagens do Python podemos citar o desempenho do mesmo que é inferior ao C, mas graças as bibliotecas Numpy (NumFOCUS, 2017) e SciPy (Jones et al., 2001) , as quais realizam chamadas em C e Fortran, o desempenho de cálculos numéricos se aproximam das implementações em C (Walt, Colbert e Varoquaux, 2011) , (Puget, 2017) .

Outro problema relacionado a rotinas desenvolvidas em Python é que as mesmas geralmente são monoprocessadas. O Python permite uma implementação de execução em mais de um core através do pacote multiprocessing²¹ (Python, 2017) , enquanto uma abordagem multithreading²² para processamento em mais de um core esbarra nos problemas oriundos do GIL(Global Interpreter Lock) (TM, 2017) , (Python, 2017) presente no python. Para contornar esse problema compilamos o SciPy com OpenBLAS (Xianyi Wang Qian, 2017) , o qual permite que o SciPy realize cálculo de produtos matriciais utilizando todos os cores disponíveis do processador, também instalamos o MUMPS (Agullo Patrick Amestoy e Weisbecker, 2017) permitindo que o SciPy e Kwant utilize chamadas para solução de sistema lineares esparsos.

²¹ A abordagem de multiprocessamento apesar de ter a vantagem de permitir utilização de diversas CPUs evitando as limitações do GIL a mesma utiliza espaços de memória separados para cada processo, o que torna a comunicação entre eles quase inviável além do consumo extra de memória.

²² Multiprocessing não deve ser confundido com multithreading. Embora seja possível implementar multithreading no Python o GIL obrigará que apenas uma thread rode por vez, fazendo as threads alternarem entre si, o que acaba reduzindo o desempenho. Por isso a compilação do OpenBLAS se mostra interessante.

3 Resultados

Nesta seção apresentaremos o estudo do método de Wilson para remoção dos *doublers* aplicados a matéria condensada. Apresentaremos propriedades matemáticas do termo de Wilson e suas implicações físicas.

Posteriormente, apresentaremos aplicações utilizando os termos de Wilson utilizadas desta metodologia em diversos sistemas físicos comparando com resultados da literatura e/ou propondo soluções.

3.1 Modelo efetivo: Massa de Wilson, Simetrias e PDF

A inserção de um termo massivo proporcional a k^2 é uma conhecida metodologia para remoção de estados duplicados oriundos do PDF (problema da duplicação de fermions) em QCD (cromodinâmica quântica). O leitor pode encontrar todas as suas consequências e implicações físicas e/ou matemáticas em QCD na literatura científica. Embora existam similaridades entre QCD e matéria condensada, a correspondência não pode ser assumida de forma absoluta. Portanto, uma análise mais profunda sobre as massas de Wilson em matéria condensada precisa e, ainda não foi feita em nenhum outro trabalho na literatura.

Aqui apresentamos uma análise da inserção desse termo em Hamiltonianos responsáveis por descrever Isolantes Topológicos. Apesar de soluções com este termo em isolantes topológicos já terem sido sugeridas (Zhou et al., 2017) as mesmas partem de pressupostos errôneos ou incompletos. Por exemplo, (Zhou et al., 2017) argumenta que um termo de Wilson proporcional a σ_z não quebra a TRS, o que não é verdade, outros trabalhos tais como o feito por (Seshadri e Sen, 2014) sugerem por sua vez que a massa de Wilson necessariamente quebra TRS isto também não é verdade. Demonstramos que o termo de Wilson equivale a impor uma condição de contorno de parede rígida no sistema, isto é, podemos escolher uma matriz associada ao termo de Wilson que é a mesma matriz necessária para confinar os estados em uma dada região, de modo que a simetria quebrada pelo termo de Wilson seja justamente a simetria necessária que precisa ser quebrada para que os estados fiquem confinados, tal simetria não necessariamente é a TRS.

3.1.1 TRS e Quiralidade

A TRS exerce um papel extremamente importante para a fenomenologia dos isolantes topológicos, mas como é sugerido por (Seshadri e Sen, 2014) e (Zhou et al., 2017) um termo de Wilson implica em uma quebra da TRS, de modo que a física de sistemas modelados por esse ferramental matemático torna-se distante da realidade física. O que será mostrado é que essa hipótese não é sempre verdadeira, isto é, o termo de Wilson não necessariamente quebra a TRS.

Na física de partículas é conhecido que o termo de Wilson leva a uma quebra da simetria quiral, onde o operador associado com tal simetria é obtido através de um produtório de matrizes γ , mas na matéria condensada tal simetria é mais geral, e um sistema pode ter mais de uma simetria quiral. Basicamente, dado a Hamiltoniana de um sistema, H , a mesma apresenta simetria quiral segundo a atuação de um operador C se (Schnyder et al., 2008)

$$\{H, C\} = 0, \quad CC^\dagger = 1, \quad C^2 = 1. \quad (3.1)$$

Sugerimos que o algoritmo para adição de um termo de Wilson¹ consiste em exaurir as simetrias quirais do sistema, e posteriormente escolher a simetria quiral para ser quebrada, sendo que essa seja a simetria quebrada pelo confinamento.

Na seção (2.5) deduzimos um modelo efetivo para estados de superfície de um isolante topológico 3D. Tal Hamiltoniano de forma mais geral é

$$H = \varepsilon_0 + \hbar v_F(k_x \gamma_{zy} - k_y \gamma_{zx}) + F \gamma_{z0} + \Delta \gamma_{x0} + B \gamma_{0z}, \quad (3.2)$$

onde F é o termo de assimetria devido ao acúmulo de cargas nas superfícies (ou por campo elétrico externo) inferior e superior, Δ é o termo de acoplamento entre as superfícies e B é o campo magnético.

Para o Hamiltoniano anterior exaurimos as simetrias quirais possíveis, sendo elas: $C_1 = \gamma_{0z}$, $C_2 = \gamma_{x0}$, $C_3 = \gamma_{y0}$, e $C_4 = \gamma_{zz}$. Tais simetrias obedecem as seguintes relações de anti-comutação

$$\{C_1, H - \varepsilon_0\} = 2B + 2\Delta Q_1 + 2FC_4, \quad (3.3)$$

$$\{C_2, H - \varepsilon_0\} = 2BQ_1 + 2\Delta, \quad (3.4)$$

$$\{C_3, H - \varepsilon_0\} = 2BQ_2, \quad (3.5)$$

$$\{C_4, H - \varepsilon_0\} = 2BQ_3 + 2FC_1, \quad (3.6)$$

onde Q_1 , Q_2 e Q_3 são,

$$Q_1 = \gamma_{xz}, \quad (3.7)$$

$$Q_2 = \gamma_{yz}, \quad (3.8)$$

$$Q_3 = \gamma_{z0}, \quad (3.9)$$

e representam as correntes conservadas oriundas do produtos de operações.

Analisaremos apenas massas de Wilson proporcionais a $\gamma_{x0}(C_2)$ e $\gamma_{0z}(C_1)$. Pois, como foi mostrado em (2.5) o termo $\Delta \gamma_{x0}$ surge naturalmente em um isolante topológico 3D e analisaremos C_1 pois o mesmo leva ao efeito de quebra de TRS.

Para analisar as implicações da inserção dessas massas estudaremos um sistema em forma de disco de raio igual a $50nm$ e parâmetro de discretização $a = 1nm$. Os outros parâmetros do sistema são:

¹ Isso caso a TRS não seja quebrada no modelo contínuo.

Tabela 1 – Parâmetros para sistema em forma de disco com ausência de campo elétrico.

v_F	F	m_W	B	Δ
$479nm/ps$	$0meV$	$-500meV$	0	$-5meV$

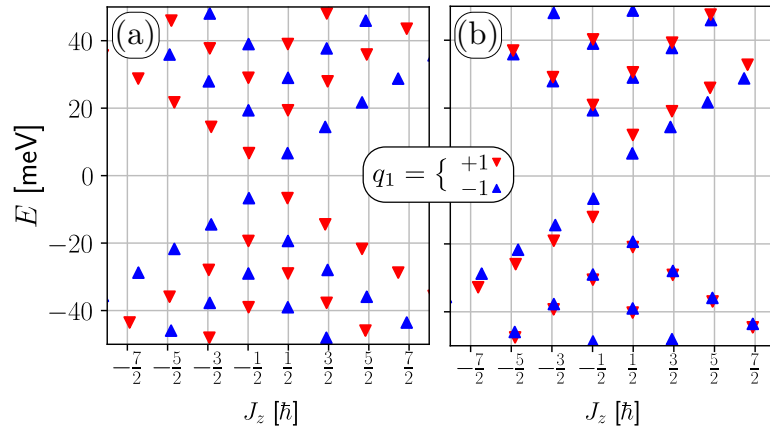
onde m_W é o escalar da massa de Wilson isto é o termo de Wilson a ser inserido no Hamiltoniano é $m_W C_1$ ou $m_W C_2$.

Na figura (17) apresentamos a energia em função do momento angular, J_z ,

$$J_z = \frac{\hbar}{2} \gamma_{0z} + \gamma_{00} L_z, \quad (3.10)$$

e da carga quiral definida por $q_{1z} = \gamma_{xz}$.

Figura 17 – Comparação entre quebras de simetria ocasionada por diferentes tipos de massas de Wilson.



Fonte: (Resende et al., 2017)

Energia em função do momento angular (J_z) e dos autovalores de quiralidade Π_1 . No gráfico (b) o termo de Wilson é feito proporcional a γ_{0z} , note que nesse caso a TRS é quebrada. No gráfico (a) o termo de Wilson é feito proporcional a γ_{x0} , note que a TRS é preservada.

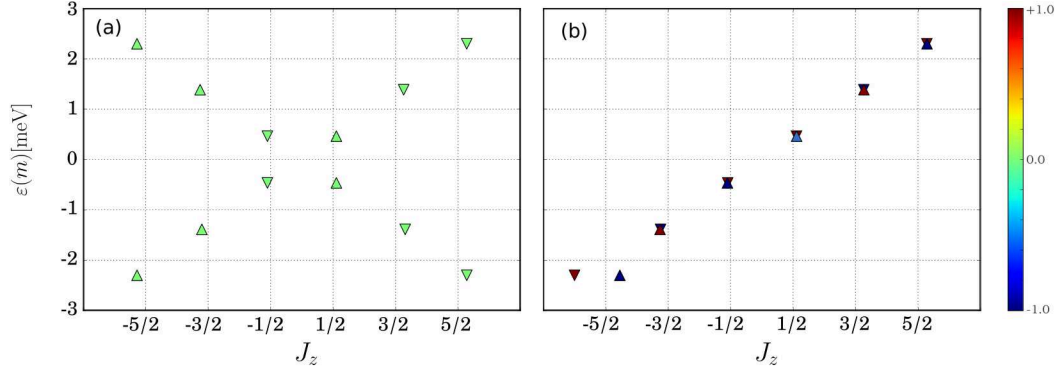
Como é mostrado na figura (17) o termo de Wilson proporcional a C_2 não quebra TRS ou q_{1z} , mas quebra C_2 e C_1 . De modo que não é possível achar uma base comum para H e Q_3 (veja figura (18)(a)). Enquanto o termo de Wilson proporcional a C_1 quebra TRS e não quebra q_{1z} , apesar de ser possível achar uma base comum para H e Q_3 (veja figura (18)(b)). O importante é notar que para um sistema real Q_3 não é um bom número quântico, isto é, para um sistema real sempre haverá a existência de um termo ΔC_2 no Hamiltoniano, isto é, sempre haverá acoplamento entre as superfícies.

Na figura 18 os parâmetros são

Tabela 2 – Parâmetros para sistema em forma de disco com ausência de campo elétrico e termo de acoplamento entre superfícies.

$\hbar v_F$	F	m_W	B	Δ
$140nm/ps$	$0meV$	$20meV$	0	$0meV$

Figura 18 – Comparação entre quebras de simetria ocasionada por diferentes tipos de massas de Wilson.



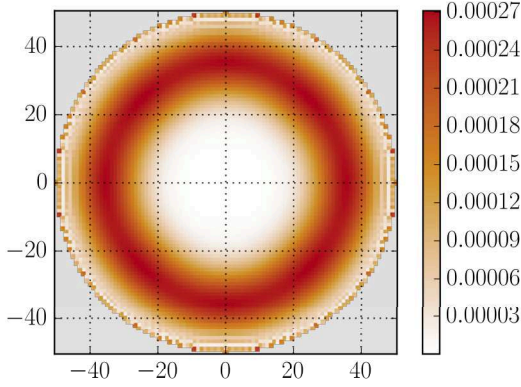
Fonte: Próprio autor

Energia em função do momento angular (J_z) e dos autovalores de quiralidade Q_1 e Q_3 . Nos gráficos (a) e (b) os triângulos indicam os autovalores de Q_1 sendo que triângulos apontando para baixo(cima) significando autovalor $+1(-1)$. As cores de ambos os gráficos indicam os autovalores de Q_3 . No gráfico (b) o termo de Wilson é feito proporcional a γ_{0z} , note que nesse caso a TRS é quebrada, a pesar de Q_3 manter-se como um bom número quântico para o sistema. No gráfico (a) o termo de Wilson é feito proporcional a γ_{x0} , note que embora a TRS ser preservada o sistema perde a simetria associada a C_2 de modo que Q_3 deixa de ser um bom número quântico, isso ocorre pois o termo de Wilson passa a misturar os estados de superfície.

Na figura (18) nota-se que os autoestados ($|J_z| \geq 3/2$) não estão quantizados, associamos tal desvio com o fato que devido a discretização da rede os estados de borda são representados por poucos pontos na rede discreta, veja a figura (19). Portanto, é necessário aumentar a precisão da rede diminuindo o termo a e ajustar de forma mais fina a massa de Wilson.

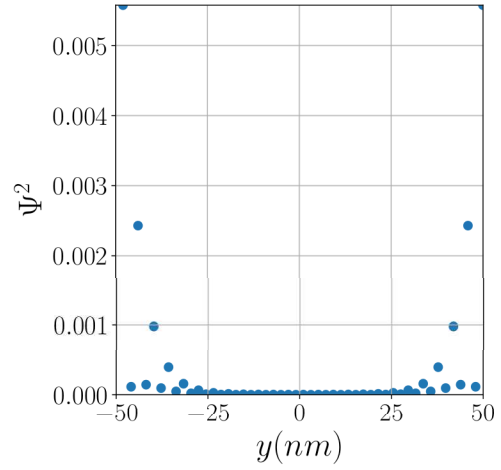
Notamos que o termo Δ acarreta no alargamento dos estados de borda, veja a figura (19).

Figura 19 – Densidade de estados para o disco



Fonte: Próprio autor.

Densidade de estados para um disco de $50nm$ de raio, parâmetro de rede $1nm$, $F = 0$, $\Delta = 5meV$, $\hbar v_F = 92meV$.



Fonte: Próprio autor.

Densidade de probabilidade em função de y para $x = 0$ para o primeiro autoestado. Note que a largura dos estados de borda é pequena, tal largura é acrescida ao se aumentar o termo Δ .

Para tornar mais claro reforçemos que a escolha da matriz de quebra de simetria feito pelo termo de Wilson pode ser escolhido para quebrar a simetria de reversão temporal, por exemplo em semimetais de Weyl sujeitos a tensão temos que o mesmo não possui TRS, logo um termo de Wilson proporcional a σ_z já é suficiente para remoção dos *doublers*.

Adotando o hamiltoniano para o semimetal de Weyl (Sharma, Goswami e Tewari, 2017)

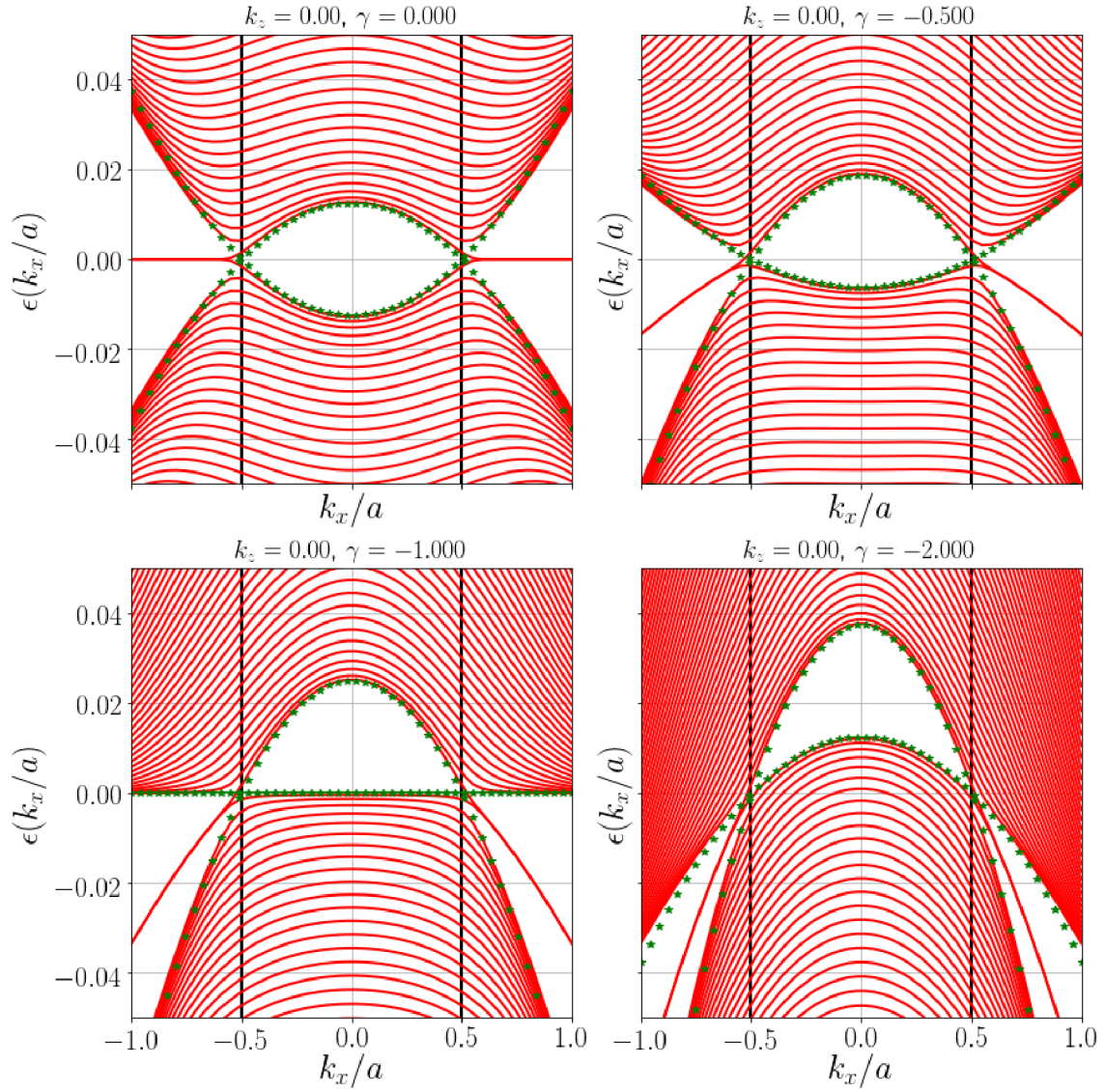
$$H^I(k) = (k_y^2 + k_z^2) \frac{m\sigma_x}{2} + (k_x^2 - k_0^2) t \frac{\sigma_x}{2} - 2t(k_y\sigma_y - k_z\sigma_z) \quad (3.11)$$

temos que um Hamiltoniano desse tipo sujeito a uma tensão pode ser descrito por

$$H^{II} = H^I + \frac{-2t\gamma}{2}(k_x^2 - k_0^2)\sigma_0, \quad (3.12)$$

onde γ é um parâmetro real e tem como efeito “curvar” os cones de Dirac.

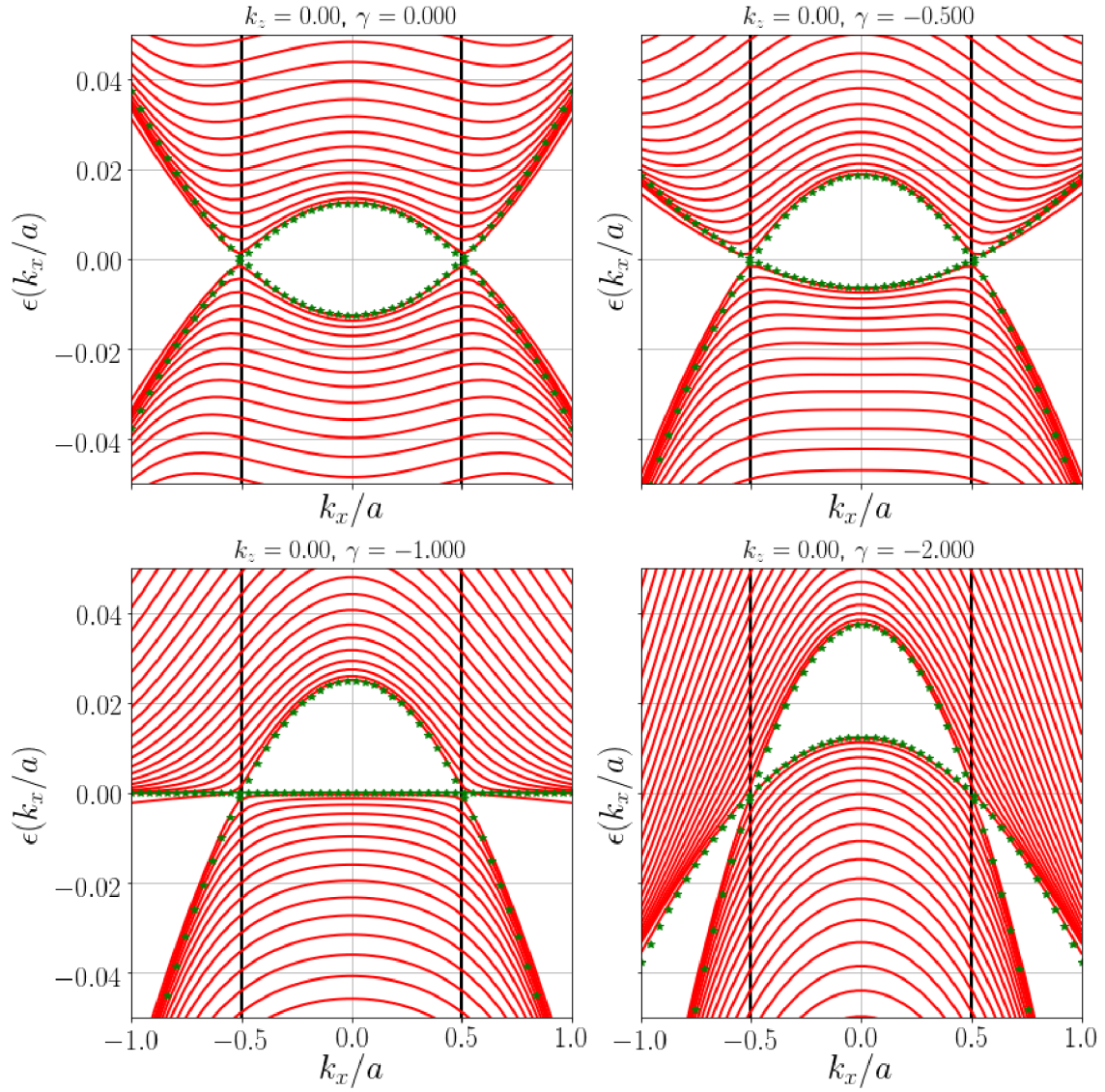
Figura 20 – Estrutura de Bandas para semimetais de Weyl com o problema da duplicação de férmions.



Fonte: Próprio autor.

Estrutura de bandas para um semimetal de Weyl para diversos valores de “tild”. Em verde tracejado é apresentado os autovalores do hamiltoniano contínuo, em vermelho temos a estrutura de bandas obtida-se discretizando o hamiltoniano em y . Todos os parâmetros são apresentados na tabela 3 sendo que a massa de Wilson é tomada como **nula**. Como pode ser notado nesse caso a duplicação de fermions se faz presente, só que com um comportamento não tão trivial como o apresentado no caso dos isolante topológicos, como semimetais de Weyl não foi o foco principal deste trabalho esse comportamento não foi estudado.

Figura 21 – Estrutura de Bandas para semimetais de Weyl sem o problema da duplicação de férmions.



Fonte: Próprio autor.

Estrutura de bandas para um semimetal de Weyl para diversos valores de “tild”. Em verde tracejado é apresentado os autovalores do hamiltoniano contínuo, em vermelho temos a estrutura de bandas obtida-se discretizando o hamiltoniano de acrescido de um termo de Wilson. Parâmetros apresentados na tabela 3.

Uma discretização no eixo y trará como efeito a contribuição dos *doublers*, para contornar esse problema podemos adicionar um termo de Wilson $m_W \sigma_z$, adotando o parâmetro de rede como unitário e utilizando o seguinte conjunto de parâmetros

Tabela 3 – Parâmetros para um semimetal de Weyl sujeito a tensão.

a	k_z	k_0	t	m	γ	m_W
1	0	.5	-0.05	0.15	0.4	0.4

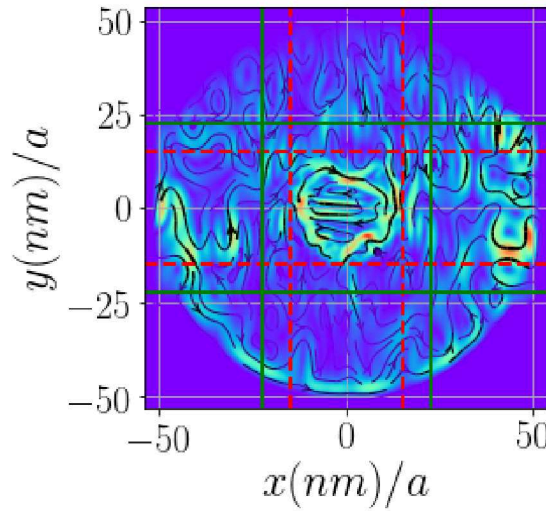
obtem-se a figura 21, onde pode ser notado que o hamiltoniano adicionado do termo de Wilson descreve com suficientemente precisão os cones com “tild”.

O parâmetro γ foi feito constante na equação (3.12) para demonstrar o efeito de uma deformação constante, obviamente tal deformação em um sistema finito decresce com a distância ao ponto de aplicação de tensão. Portanto, podemos com tratar o termo γ como

$$\gamma(r) = \sqrt{\frac{r}{r_h}},$$

onde r_h é conhecido como raio de Schwarzschild. Tomando os mesmos parâmetros utilizados para o gráfico anterior e tomando $r_h = 15nm$ na figura 22 é apresentando a corrente propagante em um disco de raio $50nm$ acoplado a um reservatório descrito pelos parâmetros descritos na tabela 3 com $\gamma = 0$.

Figura 22 – Estados propagantes em um semimetal de Weyl sujeito a tensão



Fonte: Próprio autor

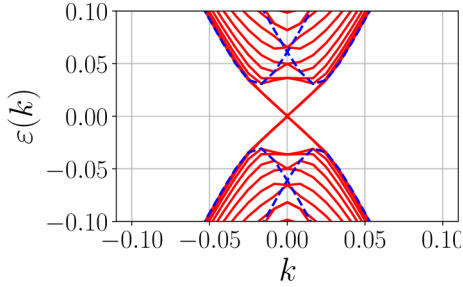
3.2 Relação entre acoplamento da superfície e termo de Wilson

Se nosso modelo estiver correto, o mesmo deve fornecer resultados similares com os apresentados na literatura que não utilizam discretização, ou que utilizem outra projeção. Nessa

seção além de abordamos a relação entre o termo Δ e m_w na equação (2.46) comparamos nosso resultado com os obtidos por (Shan, Lu e Shen, 2010) .

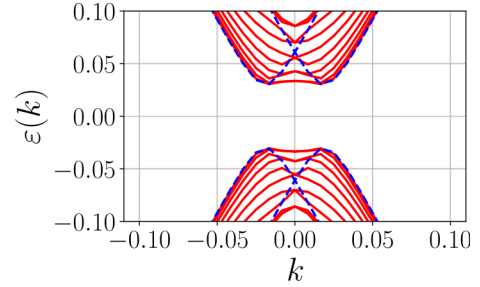
Apresentamos na figura 23 estrutura de bandas obtidas pelo nosso modelo usando os parâmetros da tabela 2 (com quatro *quintuple-layers*) no trabalho (Shan, Lu e Shen, 2010) .

Figura 23 – Comparação de estrutura de bandas e relação com o termo Δ .



Fonte: Próprio autor.

$$\Delta = 0.03 eV.$$

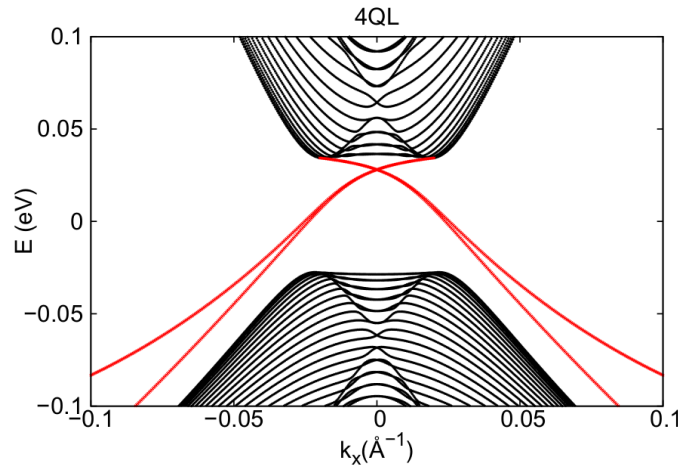


Fonte: Próprio autor.

$$\Delta = -0.03 eV.$$

Estrutura de Bandas obtida com os parâmetros da tabela 2 de (Shan, Lu e Shen, 2010) discretizada com 501 pontos e um tamanho de 1000\AA e utilizando uma massa de Wilson, $m_W = 0.2 eV/\text{\AA}^2$. Parâmetros: $v_f = 4250\text{\AA}/ps$, $V = 0.053 eV$. Note que quando a massa de Wilson e o termo Δ (acoplamento entre as superfícies) têm que possuir sinais iguais para que ocorra a formação do estado de borda.

Figura 24 – Estrutura de bandas extraída do trabalho de (Shan, Lu e Shen, 2010) .



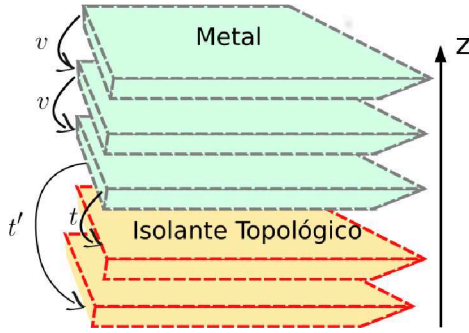
Fonte: (Shan, Lu e Shen, 2010)

Estrutura de bandas obtida por (Shan, Lu e Shen, 2010) utilizando o mesmo conjunto de parâmetros para gerar a figura 23 diferenciando pela presença dos termos quadráticos. Notamos que existe uma certa similaridade entre os modelos sendo que a banda de valência de Shan, Lu e Shen(2) é mais alargada, comportamento que pode ser recuperado ao se incluir tais termos no nosso hamiltoniano.

3.3 Modelo Efetivo: termo de assimetria, campo elétrico

Na equação (2.46) propomos que um termo, F , ocasionado por um campo elétrico, cuja origem é devido ao acúmulo de carga na superfície superior do isolante topológico em contato com a superfície metálica. Podemos provar tal afirmação criando um sistema 3D infinito nas dimensões x , y , como apresentado na figura (25) e acoplando a superfície inferior do metal com uma acoplamento $t' < t$.

Figura 25 – Representação esquemática de um sistema 3D finito em z formado por um isolante topológico em contato com um metal.



Fonte: Próprio autor

Utilizamos o kwant para gerar a estrutura de bandas do sistema representado pela figura (25). A parte metálica constitui-se de 10 camadas na direção z . Modelamos o metal através do Hamiltoniano

$$H = \epsilon_0 \tau_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2,$$

onde $\epsilon_0 = 0 \text{ meV}$, $\hbar^2/2m = 40 \text{ meV}^2$.

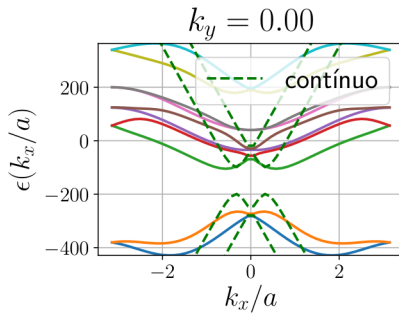
Para modelar o isolante topológico utilizamos a equação (2.46) com o seguinte conjunto de parâmetros

Tabela 4 – Parâmetros utilizados para simulação do sistema 3D e posteriormente extração dos termos de acoplamento do Hamiltoniano.

Δ	m_W	ϵ_0	v_F	a	t
50 meV	80 meV	-70 meV	300 meV/ps	1 nm	5 meVnm^2

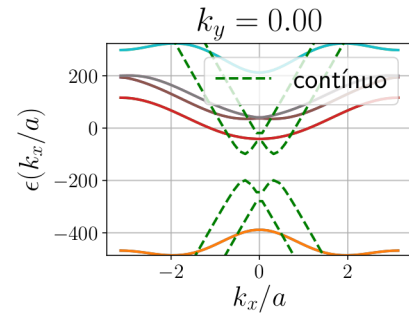
² A partir de resultados da literatura sobre a massa efetiva do titânio metálico se estimou os parâmetros do Hamiltoniano para o titânio.

Figura 26 – Demonstração da causa da assimetria no espectro do isolante topológico



Fonte: Próprio autor

Estrutura de bandas para o sistema (25) com $t' = \frac{t}{100}$. Note que os cones se deslocam provocando o que Shan, Lu e Shen denomina *Structure Inversion Asymmetry* (SIA). Em tracejado apresentamos o resultado do modelo contínuo, sem discretização.



Fonte: Próprio autor

Estrutura de bandas para o sistema (25) com $t' = t$. Note a ausência do fenômeno SIA. Em tracejado apresentamos o resultado do modelo contínuo, sem discretização.

Os resultados e o sistema auxiliar acima descritos nos permitem extrair o parâmetro t e t' de estruturas de bandas obtidas via teoria do funcional da densidade (DFT), de modo que munidos de t e t' podemos simular o aparato experimental construído por (Cho et al., 2016).

3.4 Possíveis estados Kondo em isolantes topológicos.

Como dito na introdução do presente trabalho um dos objetivos do mesmo é desenvolver um modelo discreto que possa ser utilizado para fortalecer ou invalidar a hipótese de (Cho et al., 2016) sobre a presença ou ausência da fenomenologia Kondo no arranjo experimental feito pelos mesmos. Para tal foi necessário simular o sistema via DFT para calcular as propriedades dos filmes de Bi_2Se_3 isolados e a interfaces de Bi_2Se_3 com Ti.

Usando o Hamiltoniano efetivo descrito na equação (2.46) e os resultados obtidos via DFT, um ajuste dos autovalores de (2.46) obteve-se os seguintes conjunto de parâmetros:

Para o Bi_2Se_3

Tabela 5 – Parâmetros extraídos via DFT para o hamiltoniano do Bi_2Se_3 .

ϵ_0	v_F	F	Δ
-12meV	479nm/ps	0	≈ 0

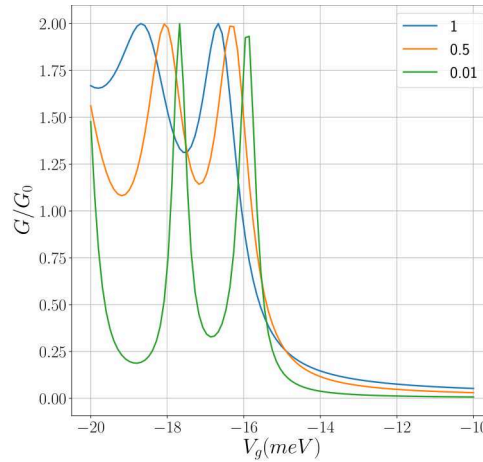
Para o $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$

Tabela 6 – Parâmetros extraídos via DFT para o hamiltoniano do $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$.

ϵ_0	v_F	F	Δ
-150meV	338nm/ps	95meV	≈ 0

A primeira alternativa seria modelar o sistema assim como descrito na imagem (2) o qual representa de forma fiel o experimento de Cho et al.(1). Embora isso possa ser feito e foi realizado utilizando um sistema auxiliar, tal que a metodologia descrita na seção (2) possa ser utilizada para encontrar os parâmetros de acoplamento entre o metal e o isolante que resultam na estrutura de bandas obtida pelo DFT, modelar um sistema 3D com um parâmetro de discretização pequeno é extremamente custoso computacionalmente.

Figura 27 – Condutância em função do potencial de porta e do acoplamento.



Fonte: Próprio autor

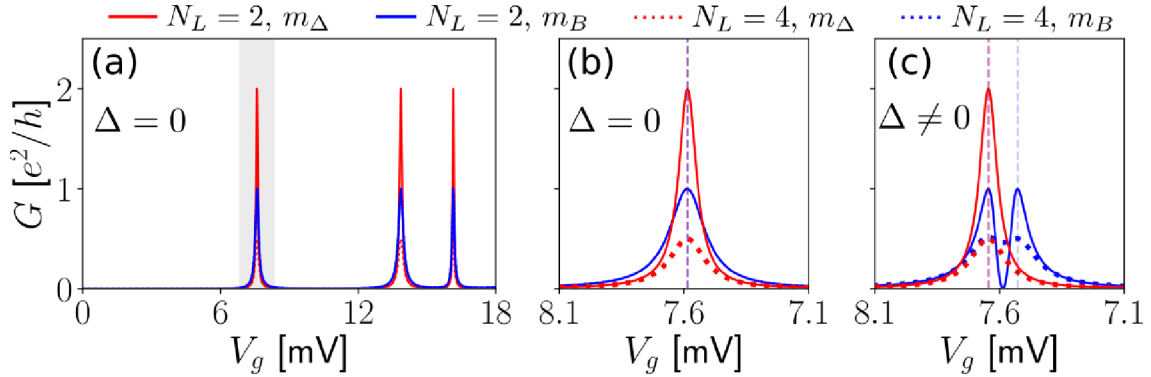
Condutância, G , por condutância fundamental G_0 em função do potencial de porta, V_g , para diversos fatores de atenuação, $k_x \mapsto tk_x$, em cores.

Uma outra alternativa seria dividir o sistema em uma região de espalhamento constituída por um isolante topológico descrito pelo conjunto de parâmetros do Bi_2Se_3 acoplado a reservatórios descritos pelos parâmetros $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$. Mas essa abordagem falha, pois os reservatórios injetam os portadores de carga em ambas as superfícies da região de espalhamento com a mesma probabilidade, o fluxo de carga em cada superfície será a mesma. Uma maneira de contornar isso é “amenizar” o acoplamento na direção de simetria do reservatório na superfície inferior, sendo que o gráfico da condutância para essa abordagem é plotado na figura 27 em função do potencial de porta, V_g , e do fator de atenuação (em cores)³, note que o fator de atenuação apenas implica no estreitamento dos picos da condutância.

No gráfico 27 também é notado que os picos atingem a condutância referente a dois canais, o que é um ingrediente fundamental para que a fenomenologia Kondo possa emergir.

³ Atenuação significa a diferença entre os acoplamentos t e t' . Quanto maior atenuação mais fracamente a superfície inferior do isolante topológico se acopla com a superfície do Titânio.

Figura 28 – Condutância em função do potencial de porta da matriz de quebra de simetria e do acoplamento entre os reservatórios.

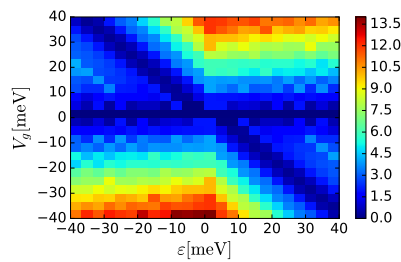


Fonte: (Resende et al., 2017)

Condutância ao longo da nanofita do isolante topológico em função do potencial de porta e da matriz de quebra de simetria. (a) $\Delta = 0$. O pico centrado em $V_g \sim 7.6$ mV e mostrado em detalhes nos painéis (b) para $\Delta = 0$, e (c) para $\Delta = 0.1$ meV. A linha vermelha(azul) corresponde a um confinamento tipo $\Delta(B)$, e as linhas solidas(tracejadas) referem-se a um modelo com $N_L = 2(4)$ terminais

Na figura 28 mostramos que uma escolha ruim para a matriz de quebra de simetria pode acarretar em consequências severas para a física do problema. No painel (c) note que o termo com quebra de simetria de reversão temporal acarretou em um *splitting* do pico da condutância.

Figura 29 – Condutância para nanofita em função do potencial de porta e da energia dos modos propagantes



Fonte: Próprio autor

O comportamento das linhas horizontais na condutância é uma assinatura do fenômeno do tunelamento Klein (Klein, 1929)

Na figura 29 utilizando os parâmetros obtidos via *DFT* apresenta-se a condutância em função do potencial de porta, V_G , aplicado na nanofita e da energia do modo propagante, ϵ . Como pode ser notado a invariância da condutância nas linhas horizontais é uma assinatura da presença do tunelamento Klein (Klein, 1929) significando que um estado propagante não sofre confinamento

apenas com a alteração do potencial, o que entra em contraste com o caso de sistemas que não são descritos pela equação de Dirac.

3.5 Modelo efetivo: aplicação em sistemas $2D$ com ou sem impurezas.

Neste trabalho demonstramos que para a modelagem de isolantes topológicos $3D$ podemos encontrar uma simetria que é quebrada pelo próprio sistema físico, de modo que podemos inserir um termo de Wilson que também leve a quebra de tal simetria. Portanto, permitindo uma modelagem matemática em uma rede discreta da fenomenologia de um sistema contínuo.

Na secção (2.7.1) afirmamos que apenas a utilização de potencias dependentes da posição não fornecem uma boa descrição de elétrons confinados na superfícies de isolantes topológicos, ao contrário do que é conjecturado por (Seshadri e Sen, 2014) .

Os gráficos que serão apresentados nesta secção objetivam convencer o leitor sobre nossa afirmação. Para gerar tais gráficos utilizamos dois hamiltonianos: o proposto por Seshadri e Sen,

$$H_S(x, y) = -i\hbar v_F(\sigma_x \partial_y - \sigma_y \partial_x) + V_b(x, y), \quad (3.13)$$

e o Hamiltoniano gerado pelo nosso modelo

$$H_\omega(x, y) = -i\hbar v_F \tau_z (\sigma_x \partial_y - \sigma_y \partial_x) + V_b(x, y) + \tau_x \sigma_0 (m_\omega k^2 + \Delta_0), \quad (3.14)$$

onde

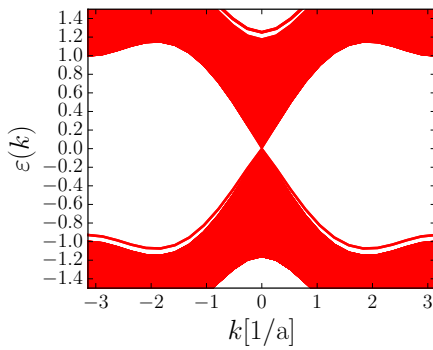
$$V_b(x, y) = \frac{V_b}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-(y-y_0)^2 - (x-x_0)^2 / 2\sigma_0^2}. \quad (3.15)$$

Para gerar todos os gráficos apresentados abaixo foi utilizado o seguinte conjunto de parâmetros

Tabela 7 – Parâmetros extraídos do trabalho de (Seshadri e Sen, 2014) .

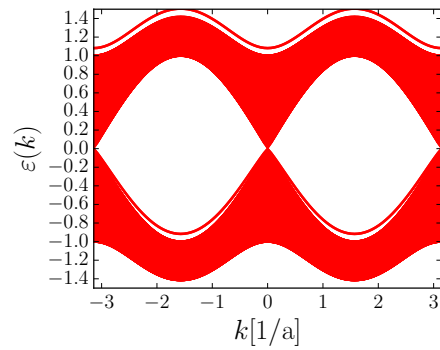
$\hbar v_F$	σ	m_W	a	Δ_0
1	2	20	1	0.5

Figura 30 – Comparação com adição termo de Wilson e dimensão extra com resultado sem termo de Wilson.



Fonte: Próprio autor.

Estrutura de Bandas obtida para a equação (3.14). Notamos que adição de um termo de Willson com um acoplamento mínimo remove a duplicação de férmions.

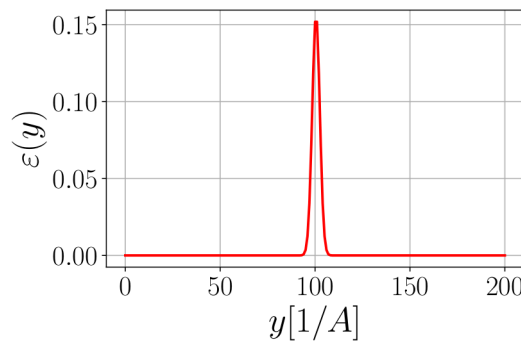


Fonte: Próprio autor.

Estrutura de Bandas obtida para a equação (3.13). Mesmo com a adição do termo de potencial a duplicação de férmions ainda ocorre, o que também já havia sido dito por Seshadri e Sen.

Os gráficos apresentados na figura 30 modelam isolantes topológicos 3D semi-infinitos com simetria de translação ao longo do eixo x . De modo que foi feito $N_y = 201, x = x_0 = 0$, os demais parâmetros são dados pela tabela 7.

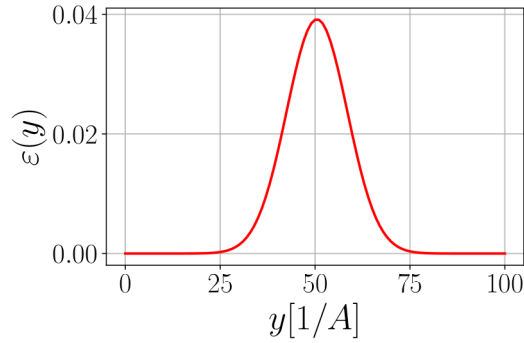
Figura 31 – Potencial da impureza utilizado para gerar as figuras 33 e 30.



Fonte: Próprio autor

Potencial, $V_b(x, y)$, para $\sigma = 2, V_b = \pi/4, y_0 = 100$.

Figura 32 – Potencial da impureza utilizado para gerar a figura 36.



Fonte: Próprio autor

Potencial, $V_b(x, y)$, para $\sigma = 8$, $V_b = \pi/4$, $y_0 = 50$.

Como é demonstrado nosso modelo descreve qualitativamente bem isolantes topológicos para todos os valores de k , nos quais devido a impurezas existe um potencial de confinamento dado por $V_b(0, y)$.

Na figura 33 restringimos novamente a região para comparar os resultados dos modelos para valores de k pequeno.

3.5.1 Transporte eletrônico: comparação entre os modelos.

Nesta secção apresentamos a comparação entre o transporte eletrônico obtido por nosso modelo e o modelo de Seshadri e Sen.

Utilizaremos um metal que seja descrito por⁴

$$H = \epsilon_0 \sigma_0 + \sigma_0 t \nabla^2, \quad (3.16)$$

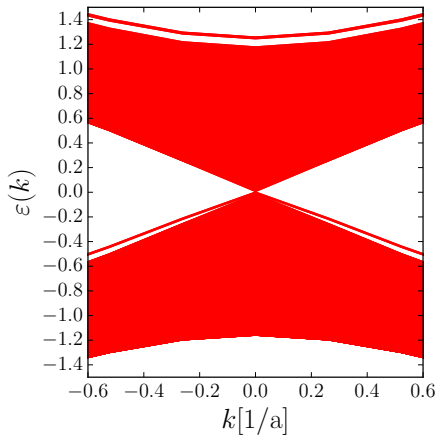
para ser utilizado no modelo de Seshadri e Sen, e seja descrito por

$$H = \epsilon_0 \tau_0 \sigma_0 + \tau_0 \sigma_0 t \nabla^2, \quad (3.17)$$

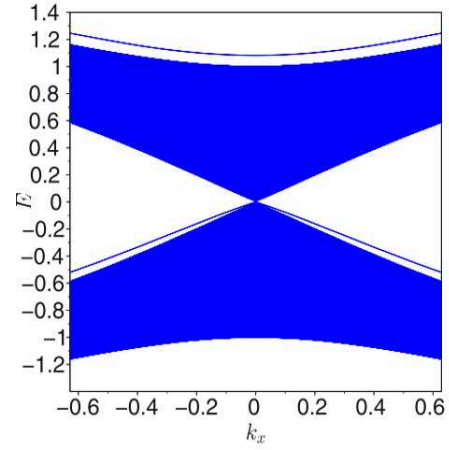
para ser utilizado no modelo proposto neste trabalho. Em ambos os casos faremos $\epsilon_0 = 3$ e $t = -4$, tal que a estrutura de bandas desse metal retorna a figura (34).

⁴ Obviamente o argumento de potências localizados não vale para quando o sistema é semi-infinito ou infinito em alguma direção é periódico. Portanto não é possível modelar um reservatório topológico sem que esse apresente resultados péssimos.

Figura 33 – Comparação com adição termo de Wilson e dimensão extra com resultado de Seshadri e Sen para k pequeno.



Fonte: Próprio autor.

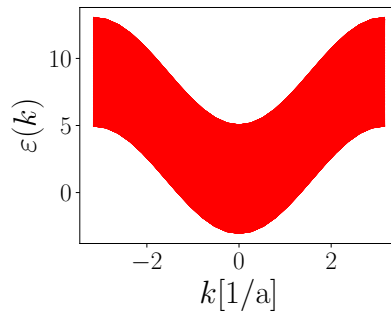


Fonte: Próprio autor.

Estrutura de Bandas obtida para a equação (3.14). Notamos que para k pequeno os cones são bem descritos, isto é, são aproximadamente lineares. Também notamos que os estados internos aos cones ficam preenchidos, tal preenchimento ocorre devido ao termo Δ_0 não nulo. Notamos em cones são tais que $\varepsilon(\pm 0.6)$ nesse modelo é igual aos valores de $\varepsilon(\pm 0.6)$ do resultado de Seshadri e Sen.

Estrutura de Bandas obtida para a equação (3.13). Notamos que o gráfico dado pelo modelo de Seshadri e Sen corrobora com o nosso modelo para k pequeno, mas a desvantagem do modelo de Seshadri e Sen é que o mesmo não remove a duplicação de férmions.

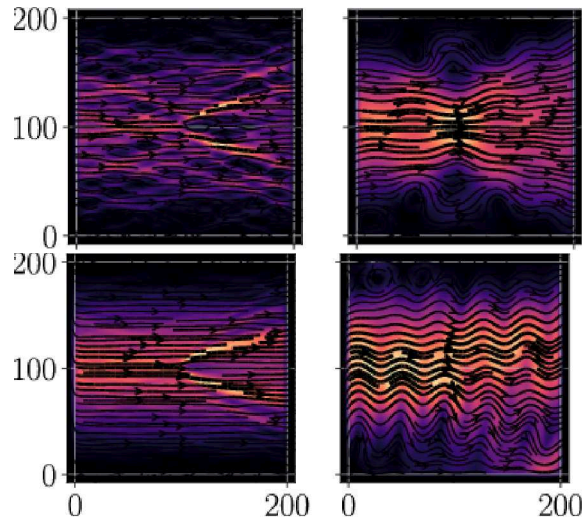
Figura 34 – Estrutura de bandas para o metal que foi acoplado nos isolantes topológicos.



Fonte: Próprio autor

Estrutura de bandas para uma nanofita descrita por um Hamiltoniano do tipo metálico.

Figura 35 – Correntes em uma nanofita dopada com uma impureza(figura (31) potencial estreito). Reservatório metálico e nanofita é um isolante topológico.

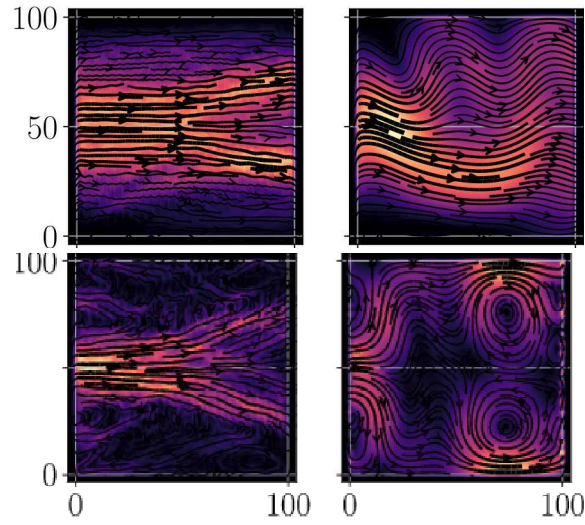


Fonte: Próprio autor.

Ambas as figuras foram calculadas com $E = 0.8$ (esquerdas) e $E = 0.08$ (direitas), $N_x = N_y = 200$, para primeiro modo. As duas figuras do topo são descritas através da modelagem de (3) e as duas de baixo são descritas por nossa modelagem. Todos os resultados foram obtidos através de reservatórios descritos pelas equações (3.16) e (3.17). Note que os resultados são de certa forma similares, apesar do número maior de estruturas no modelo de Seshadri e Sen.

A figura 35 mostra os resultados de certa forma similares entre nosso modelo e o modelo de Seshadri e Sen, apesar do número maior de estruturas no modelo de Seshadri e Sen. Podemos mostrar que o resultado de Seshadri e Sen começa a multiplicar o número de estruturas a medida que o potencial torna-se menos localizado, como apresentado na figura 36.

Figura 36 – Correntes em uma nanofita dopada com uma impureza (figura (36) potencial largo). Reservatório metálico e nanofita é um isolante topológico.



Fonte: Próprio autor.

Ambas as figuras foram calculadas com $E = 0.8$ (esquerdas) e $E = 0.08$ (direitas), $N_x = N_y = 200$, para primeiro modo. As duas figuras do topo são descritas através da modelagem de Seshadri e Sen e as duas de baixo são descritas por nossa modelagem. Todos os resultados foram obtidos através de reservatórios descritos pela equações (3.16) e (3.17). Comparando com a figura 35 notamos mesmo com a presença de um potencial mais largo os resultados para nosso modelo preservam as estruturas, enquanto no modelo de Seshadri e Sen vórtices e padrões de interferências surgem.

4 Conclusões

No presente trabalho demonstramos que a abordagem de massas de Wilson além de eliminar os estados duplicados oriundos da discretização de Hamiltonianos do tipo Dirac a mesma abordagem permite controlar as condições de contorno de paredes rígidas. Em contraste com a física de altas energias onde a quebra de simetria ocasionada pela adição do termo de Wilson, e consequentemente o confinamento gerado não são desejados. Portanto, para sistemas de estados sólidos confinados, a problemática ocasionada pela remoção da duplicação de fermions é irrelevante.

Na literatura científica é consenso que o termo de Wilson necessariamente quebra a simetria de reversão temporal, notamos no presente trabalho que essa afirmação nem sempre é verdadeira, assim como na física de altas energias a única restrição é que o termo de Wilson quebre uma simetria quiral.

Como resultado prático usamos nossa abordagem para calcular as propriedades de transporte de nanofitas de Bi_2Se_3 . Demonstramos que a escolha de um termo de quebra de simetria “errado” pode acarretar em percas de informações necessárias para a física do problema.

Como trabalhos futuros sugerimos o estudo de semimetais de Weyl sujeitos a tensões, pois recentemente foi demonstrado que transições entre semimetais de Weyl do tipo-I e II comportam análogos a física de buracos negros (Volovik, 2017) . Destacando os recentes resultados experimentais da astronomia sobre a fusão de sistemas binários de buracos negros e estrelas de nêutrons o estudo de análogos em matéria condensada pode ser deverás interessante.

Também sugerimos que trabalhos focados mais nas implicações do termo de Wilson nas estruturas das equações de Dirac e Hamiltoniano poderá fornecer uma melhor compreensão sobre a relação entre simetrias e o confinamento.

5 Anexos

5.1 Simetria Quiral

Dado uma hamiltoniana de um sistema, H , a mesma apresenta simetria quiral segundo a atuação de um operador C se (Schnyder et al., 2009)

$$\{H, C\} = 0, \quad CC^\dagger = 1, \quad C^2 = 1. \quad (5.1)$$

De modo que para toda tupla de autovalores e autovetores (ε, ψ) de H existe uma outra tupla $(-\varepsilon, \phi)$. Demonstramos essa afirmação abaixo, usando a propriedade de anticomutação e unitariedade relacionadas a C e H

$$H\psi = \varepsilon\psi \quad (5.2)$$

$$HCC\psi = \varepsilon\psi \quad (5.3)$$

$$-CHC\psi = \varepsilon\psi \quad (5.4)$$

$$HC\psi = -\varepsilon C\psi \quad (5.5)$$

$$H\phi = -\varepsilon\phi. \quad (5.6)$$

Uma hamiltoniana que respeita as relações dadas na equação 5.1 possui uma forma matricial do tipo (Akhmerov, 2011)

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{T} \\ \mathbf{T}^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Tendo essas propriedades em mente, convêm-se estudar a chiralidade da Hamiltoniana deduzida.

5.1.1 Quiralidade e modelo efetivo

O hamiltoniano do modelo efetivo pode possuir quatro tipos distintos de simetrias quirais, são elas

$$C_1 = \tau_0 \otimes \sigma_3, \quad (5.8)$$

$$C_2 = \tau_1 \otimes \sigma_0, \quad (5.9)$$

$$C_3 = \tau_2 \otimes \sigma_0, \quad (5.10)$$

$$C_4 = \tau_z \otimes \sigma_z. \quad (5.11)$$

Os operadores descritos acima respeitam as seguintes regras de anticomutação para um hamiltoniano descrito pela equação 2.46,

$$\{C_1, H - \varepsilon_0\} = 2B + 2\Delta Q_1 + 2FC_4, \quad (5.12)$$

$$\{C_2, H - \varepsilon_0\} = 2BQ_1 + 2\Delta, \quad (5.13)$$

$$\{C_3, H - \varepsilon_0\} = 2BQ_2, \quad (5.14)$$

$$\{C_4, H - \varepsilon_0\} = 2BQ_3 + 2FC_1, \quad (5.15)$$

Como mostrado nas equações acima é possível que para um dado conjunto de parâmetros o sistema possua mais de uma simetria quiral. Portanto, como apontado por (Schnyder et al., 2009) a cada duas operações de simetria quiral podemos associar um operador hermitiniano relacionado com o produto dessas operações de quiralidade. De modo que o observável relacionado com esse operador se conserva, então é permitido definir uma corrente de quiralidade que se conserva no tempo.

5.1.1.1 Conservação de correntes

Dado duas operações de simetria do tipo C podemos construir um operador cujo observável associado é conservado. Definimos tal operador como o produto das operações C , por exemplo seja

$$Q_{14} = C_4 C_1, \quad (5.16)$$

tal que $Q_{14}(Q_{14})^\dagger = I_4$. Por simplicidade mapearemos $(C_1/2, C_4/2, Q_{14}/2) \rightarrow (\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \mathcal{A}_3)$, de modo que é fácil ver que esses operadores mapeados repetam a regra de anticomutação

$$\{\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j\} = \mathcal{A}_k \quad (5.17)$$

Na secção discutimos as implicações dessas relações de anticomutação fechadas, mas por enquanto voltemos a discussão sobre a conservação de correntes. Nessa definição o comutador de \mathcal{A}_3 e H é nulo apenas quando $\Delta = 0$,

$$[H, \mathcal{A}_3] = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\Delta \\ \Delta & \mathbf{0} \end{pmatrix} = -i\Delta\sigma_y \otimes \sigma_0, \quad (5.18)$$

onde $\Delta = \Delta I_2$, e I_2 é a matriz identidade de dimensão 2. Como é apresentado pela comutador de H com \mathcal{A}_3 e como é conhecido como resultado básico da mecânica quântica podemos associar que o observável relacionado a \mathcal{A}_3 se conserva no caso $\Delta = 0$. Feito isso podemos nos indagar sobre os algebrismos associados a \mathcal{A}_3 , isto é, podemos definir agora operadores que intercalam autoestados de \mathcal{A}_3

5.1.1.2 Operadores

Começamos definindo um vetor escrito na base comum de H e \mathcal{A}_3 , $|\varepsilon, c\rangle$, de modo que as duas relações abaixo são respeitadas

$$H|e, c\rangle = \varepsilon |\varepsilon, c\rangle \quad (5.19)$$

$$\mathcal{A}_3|\varepsilon, c\rangle = c|\varepsilon, c\rangle, \quad (5.20)$$

onde ε e c são escalares. Utilizando as de correntes quirais podemos definir as seguintes relações

$$\mathcal{A}_3\mathcal{A}_1|\varepsilon, c\rangle = (\mathcal{A}_2 - \mathcal{A}_1\mathcal{A}_3)|\varepsilon, c\rangle, \quad (5.21)$$

$$\mathcal{A}_3\mathcal{A}_2|\varepsilon, c\rangle = (\mathcal{A}_1 - \mathcal{A}_2\mathcal{A}_3)|\varepsilon, c\rangle, \quad (5.22)$$

tendo conhecimento da equação 5.20 temos o sistema de equações descritos abaixo

$$\mathcal{A}_3\mathcal{A}_1|\varepsilon, c\rangle = (\mathcal{A}_2 - \mathcal{A}_1c)|\varepsilon, c\rangle, \quad (5.23)$$

$$\mathcal{A}_3\mathcal{A}_2|\varepsilon, c\rangle = (\mathcal{A}_1 - \mathcal{A}_2c)|\varepsilon, c\rangle. \quad (5.24)$$

Ao somar as duas equações acima podemos definir um operador , $\mathcal{A}_- = -(\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2)$

$$-\mathcal{A}_3(\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2)|\varepsilon, c\rangle = -(1+c)(\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2)|\varepsilon, c\rangle, \quad (5.25)$$

$$\mathcal{A}_3\mathcal{A}_-|\varepsilon, c\rangle = (1+c)\mathcal{A}_-|\varepsilon, c\rangle \quad (5.26)$$

De forma análoga, a subtração das equações descritas em 5.24 permite definir um operador , $\mathcal{A}_+ = -\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2$, tal que

$$\mathcal{A}_3(-\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2)|\varepsilon, c\rangle = (1+c)(-\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2)|\varepsilon, c\rangle, \quad (5.27)$$

$$\mathcal{A}_3\mathcal{A}_+|\varepsilon, c\rangle = (1+c)\mathcal{A}_+|\varepsilon, c\rangle \quad (5.28)$$

5.1.1.3 Quebra de simetria quiral

Supondo um hamiltoniano dado pela equação(referenciar equação modelo efetivo) introduzimos um termo massivo ΔQ_{14} . De modo que a simetria de subrede associada a C_2 e Q_{14} é quebrada. Como dito anteriormente a cada conjunto de tuplas de duas a duas simetrias de rede é possível construir um operador que comuta com H . Portanto a inserção de um termo proporcional a C_3 quebrará a corrente associada aos observáveis associados aos operadores C_1C_2 , iC_1C_3 , C_2C_4 , iC_3C_4 Notemos que

$$[H, C_1C_2] = -2i\Delta C_4, \quad (5.29)$$

onde como mostrado anteriormente iC_1C_2 formam um conjunto de autovalores $(-1, -1, 1, 1)$ Podemos construir os operadores de projeção

$$P_{12}^- = \frac{1}{2}(\mathbb{I} - C_1C_2), \quad (5.30)$$

$$P_{12}^+ = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + C_1C_2), \quad (5.31)$$

tal que seja $H|\varepsilon\rangle = \varepsilon|e\rangle$ autoestado de H , com H não comuta com C_1C_2 , $|\varepsilon\rangle$ não é autoestado de C_1C_2 . temos que

$$C_1C_2|+\rangle = C_1C_2P_{12}^+|\varepsilon\rangle = +1P_{12}^+|\varepsilon\rangle, \quad (5.32)$$

$$C_1C_2|-\rangle = C_1C_2P_{12}^-|\varepsilon\rangle = -1P_{12}^+|\varepsilon\rangle, \quad (5.33)$$

de modo que um autoestado de H pode ser decomposto em uma base formada por $|\pm\rangle$. Portanto, cada autoestado de H acopla estados do operador C_1C_2 ,

$$\langle -|H|+\rangle = -\frac{\Delta^2}{2\sqrt{\Delta^2 + k_x^2 + k_y^2}}, \quad (5.34)$$

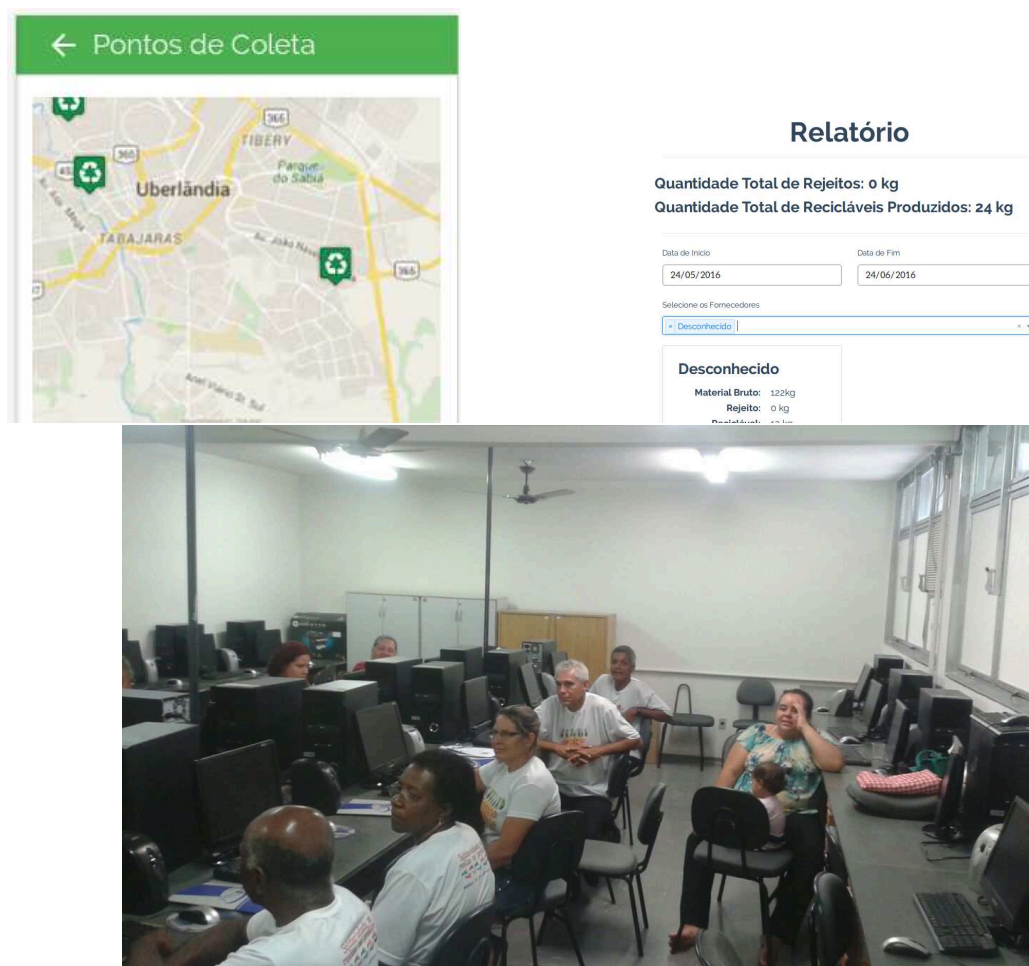
De modo que temos que o termo de abertura de gap, e consequentemente o termo de Willson pode ser associado com uma taxa em que um dado vetor de estado transita entre autoestados distintos de C_1C_2 . De forma análoga obteríamos os mesmos termos de hopping para as demais grandezas. Pela equação (5.34) notamos que na ausência de um termo Δ dependente de k (ex: Willson) a taxa de transição diminui com o aumento de k_x e k_y . É interessante realizar uma analogia com a física de partículas neste momento, isto é, quanto mais rápido um elétron se propaga mais devagar o relógio interno do elétron fica, de modo que as taxas de transição entre quiralidades do elétron diminuem, o que é um fenômeno análogo que pode ser observado (5.34).

Notamos que é possível definir uma álgebra em relação a anti-comutação entre dois operadores de quiralidade e a corrente associada aos mesmos. Esse tipo de álgebra e suas propriedades foi descrito por (Ostrovskii e Sil'vestrov, 1992). No trabalho de (Arik e Kayserilioglu, 2003) propões que existem aplicações interessantes em sistemas físicos (Genest et al., 2016). Tal álgebra de anticomutadores é um caso especial da álgebra de Bannai-Ito, como apontado por (Bie et al., 2015). Como exemplo podemos definir a algebra definida pelo conjunto:

$$\{-C_1/2, -C_2/2, C_{12}/2\}.$$

5.2 Produção: pesquisa & extensão

Figura 37 – Registro de tecnologia social.



Fonte: Próprio autor.



INPI INSTITUTO
NACIONAL
DA PROPRIEDADE
INDUSTRIAL

REPÚBLICA FEDERATIVA DO BRASIL
MINISTÉRIO DA INDÚSTRIA, COMÉRCIO EXTERIOR E SERVIÇOS
INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL
DIRETORIA DE PATENTES, PROGRAMAS DE COMPUTADOR E TOPOGRAFIA DE CIRCUITOS INTEGRADOS

CERTIFICADO DE REGISTRO DE PROGRAMA DE COMPUTADOR

Processo: BR 51 2016 001156-4

O INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL expede o presente Certificado de Registro de Programa de Computador, **válido por 50 anos** a partir de 1º de janeiro subsequente à data de criação indicada, em conformidade com o parágrafo 2º, artigo 2º da Lei Nº 9.609, de 19 de Fevereiro de 1998, e arts. 1º e 2º do Decreto 2.556 de 20 de Abril de 1998.

Título: **SISTEMA DE TECNOLOGIA SOCIAL APLICADO AO GERENCIAMENTO DE COLETA SELETIVA**

Criação: 02 de junho de 2016

Titular(es): UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA (25.648.387/0001-18)

Autor(es): BRUNO MESSIAS FARIAS DE RESENDE (094.147.236-17)
CRISTIANE BETANHO (182.328.728-02)
REGIS MICHEL DOS SANTOS SOUSA (373.009.988-44)
SAULO COUTINHO DE FARIA (996.178.031-00)

Linguagem: JAVA SCRIPT, PYTHON

Aplicação: AD-03, AD-08

Tipo Prog.: AT-06, GI-01, GI-04, GI-06

DOCUMENTAÇÃO TÉCNICA EM DEPÓSITO SOB SIGILO ATÉ 30/08/2026.

Os Direitos Patrimoniais relativos ao programa de computador objeto do presente registro foram cedidos dos Criadores para o Titular, na data de 02 de agosto de 2016, conforme documentação

A exclusividade de comercialização deste programa de computador não tem a abrangência relativa à exclusividade de fornecimento estatuída pelo art.25, I, da Lei nº8.666, de 21 de Junho de 1993, para fins de inexigibilidade de licitação para compras pelo poder público.
Expedido em 04 de abril de 2017

Assinado digitalmente por:

Julio Cesar Castelo Branco Reis Moreira

Diretor de Patentes, Programas de Computador e Topografia de Circuitos Integrados

Confinement and fermion doubling problem in Dirac-like Hamiltonians

B. M. de Resende, F. Crasto de Lima, R. H. Miwa, E. Vernek, and G. J. Ferreira
Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG 38400-902, Brazil
 (Dated: October 24, 2017)

We investigate the interplay between confinement and the fermion doubling problem in Dirac-like Hamiltonians. Individually, both features are well known. First, simple electrostatic gates do not confine electrons due to the Klein tunneling. Second, a typical lattice discretization of the first-order derivative $k \rightarrow -i\partial_x$ skips the central point and allow spurious low-energy, highly oscillating solutions known as fermion doublers. While a no-go theorem states that the doublers cannot be eliminated without artificially breaking a symmetry, here we show that the symmetry broken by the Wilson's mass approach is equivalent to the enforcement of hard-wall boundary conditions, thus making the no-go theorem irrelevant when confinement is foreseen. We illustrate our arguments by calculating the following: (i) the band structure and transport properties across thin films of the topological insulator Bi_2Se_3 , for which we use *ab-initio* density functional theory calculations to justify the model; and (ii) the band structure of zigzag graphene nanoribbons.

Topological insulators (TIs) constitute a class of materials that exhibit the ubiquitous property of being an insulator in their bulk, while presenting metallic states on their edges or surfaces [1–4]. The key ingredient for the underlying physics of the TIs is a strong spin-orbit interaction, which generically leads to a Dirac-like spectrum. At low energy, the effective Hamiltonians for the edge/surface states are linear in the momentum, yielding a massless Dirac spectrum. The resulting helical band structure is topologically protected against backscattering, thus providing perfect conducting channels that are potentially useful for future electronic devices [5, 6], quantum computation [7], and optical applications [8].

The numerical approach to investigate the properties (e.g., transport, dynamics, confinement) [9–11] of these systems often requires a lattice discretization of the Hamiltonian. Unfortunately, standard finite difference descriptions of the first-order derivatives of linear in momentum $\hbar k$ Hamiltonians are infected by the fermion doubling problem (FDP). This yields spurious low-energy states, as exemplified in Fig. 1(a). Even though the energy dispersion is well described by the discrete Hamiltonian at small k , the doublers appearing for large k will affect the transport and dynamics of the system. There are many ways to eliminate the doublers [12, 13], e.g., staggered fermions [14–17], Wilson's mass [18–21], non-local discretizations [22–24], and extra artificial dimensions [25–28]. Each of them presents its own advantages and disadvantages. There is, however, a common and seemingly unsolvable problem: As required by the Nielsen-Ninomiya theorem (NNT) [29, 30], all these approaches introduce a symmetry breaking or nonlocality.

The k -linear models also display the Klein tunneling “paradox” [31, 32], which states that simple electrostatic barriers are transparent and cannot confine massless electrons. This is a consequence of the constant Fermi velocity of the linear dispersion, which allows perfect matching of the injected and transmitted waves. Consequently, to attain confinement, one needs to either open a gap by breaking a symmetry in the outer region [21, 33–38], or

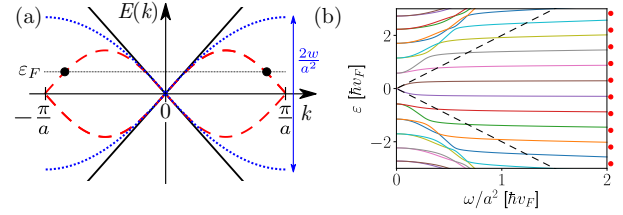


Figure 1. (a) In a discrete lattice with spacing a , the linear dispersion $\varepsilon = \pm \hbar v_F k$ of the continuous model (solid black line) is replaced by $\varepsilon = \pm \hbar v_F (2a)^{-1} \sin(ka)$ (dashed red line), yielding the “doublers” at the Fermi energy ε_F (black dots). A finite Wilson’s mass term $\propto w k^2$ eliminates the doublers by opening a gap at $k = \pm \pi/a$ (dotted blue line). (b) Quantized energies of the linear spectrum due to hard-wall confinement as a function of the Wilson mass w . The numerical solutions (solid lines) approach the exact solutions (red dots) in the range $|\varepsilon| < 2w/a^2$ (black dashed lines). For $w \rightarrow 0$ the numerical solutions merge to form the doublers.

invoke finite-size effects [39].

In this Rapid Communication we ask whether it is possible to eliminate the FDP in a finite system by breaking the same symmetry that provides the confinement. The answer is yes. The short argument is as follows: Since the symmetry is already broken by the confinement, there is no harm in introducing a Wilson’s mass that breaks the same symmetry. More interestingly, here we show that the Wilson’s mass not only eliminates the doublers, but also defines the type of hard-wall confinement that is imposed by vanishing boundary conditions. To present this argument, we start with a simple unidimensional model that captures its essence. Here, we solve the linear Hamiltonian with vanishing flux hard-wall boundaries [35, 37], and compare it with the solutions obtained by introducing a parabolic Wilson’s mass term $\propto w k^2$ and vanishing wave-function hard-wall boundaries. We find that the solutions match for a small, but finite, Wilson’s mass w , while for $w \rightarrow 0$, one recovers the spurious doublers.

Next, we discuss the surface states of the three-dimensional (3D) topological insulator Bi_2Se_3 as a proto-

type model to illustrate our findings. Here, we consider two different forms of the Wilson's mass term to show that it can either break time-reversal symmetry (TRS), as in Refs. [21, 37, 38], or a sublattice chiral symmetry. Its consequences for the energy levels and degeneracies of a quantum dot, and the transport properties across a ribbon are discussed. We use a modified version of the effective Hamiltonian for the Bi₂Se₃ from Refs. 40 and 41 fitted to first-principles calculations from the VASP code [42, 43]. The effective model is then implemented numerically using the KWANT code [44]. Additionally, we briefly present the case of zigzag graphene nanoribbons, which is a challenging case for effective models [17].

Fermion doubling. To establish our arguments, let us first consider a simple one-dimensional Dirac-like model given by the Hamiltonian $H_\xi = \hbar v_F \mathcal{M}_\xi k$, where v_F is the Fermi velocity, k is the momentum along a generic coordinate ξ , and \mathcal{M}_ξ is a unitary Hermitian matrix. The exact energy spectrum of H_ξ is $\varepsilon = \pm \hbar v_F k$, which is the Dirac cone illustrated in Fig. 1(a). However, if one desires to find the spectrum numerically via finite differences, the momentum $\hbar k = -i\hbar \partial_\xi$ takes a discrete form. To keep H Hermitian, one typically chooses the symmetric finite difference approach, leading to an expression that skips the central point, i.e., $\partial_\xi \psi(\xi_j) \approx [\psi(\xi_{j+1}) - \psi(\xi_{j-1})]/2a$, where the integer j labels the points in the discrete lattice of spacing a . Consequently, it allows for low-energy, highly oscillating states of a topological origin [29, 30], thus yielding the doublers shown in Fig. 1(a).

Wilson's mass. Here, we choose the Wilson's mass approach [18–21] to eliminate the doublers. The idea is to introduce a parabolic correction $H_W = w \mathcal{M}_c k^2$ to $H_\xi \rightarrow H_\xi + H_W$. For small k , the linear terms dominate and H_W does not significantly affect the band structure. However, this term eliminates the doublers as its discretization couples all three points j , and $j \pm 1$, thus opening a gap $2w/a^2$ at $k = \pm \pi/a$, as shown in Fig. 1(a). The penalty for using H_W is that it breaks a chiral symmetry of the linear H_ξ . Next, we argue that this penalty is irrelevant if one chooses \mathcal{M}_c to be the same unitary matrix that defines the hard-wall confinement.

Hard-wall boundary conditions. The hard-wall boundary condition for H_ξ (without H_W) is imposed by the limit $\alpha \rightarrow \infty$ of the confining potential $H_C = \alpha \mathcal{M}_c \Theta(|\xi| - \xi_0)$, where $\Theta(\xi)$ is the Heaviside step function defining the walls at $\xi = \pm \xi_0$. The unitary matrix \mathcal{M}_c must break a symmetry of H_ξ to open a gap 2α in the outer region ($|\xi| > \xi_0$). At the interface, the spinor is discontinuous [33, 34], and integrating $H_\xi \psi = \varepsilon \psi$ across the interface we obtain the boundary condition [35, 37]

$$\left(\pm i \mathcal{M}_\xi + \mathcal{M}_c \right) \psi(\xi_0) = 0, \quad (1)$$

where the matrices $(\pm i \mathcal{M}_\xi + \mathcal{M}_c)$ are singular, thus allowing nontrivial solutions. Notice that we have used the same matrix \mathcal{M}_c to define here this boundary condition for linear H_ξ , and above to introduce the Wilson's mass parabolic term H_W . This assures that both approaches will break the same symmetry of H_ξ .

In contrast to Eq. (1), the Wilson's mass model $H_\xi + H_W$ allows trivial vanishing boundary conditions $\psi(\pm \xi_0) = 0$. Therefore, now we have two different approaches to apply a hard-wall confinement. Moreover, our choice of a simple H_ξ allows for analytical solutions (up to a transcendental equation) for the boundary condition from Eq. (1), thus avoiding the discretization and the FDP all together. In Fig. 1(b) we compare these solutions with a numerical finite difference model for $H_\xi + H_W$ with vanishing boundary conditions as a function of the Wilson's mass w . For $w \rightarrow 0$, pairs of eigenstates merge to form the degenerate doublers, but are split for finite w . An appropriate value for w can be chosen such that the energy window of interest lies within the Wilson's mass gap $2w/a^2$ [see Fig. 1(a)], and preserves the dominance of the linear term over the parabolic correction, which yields $\frac{1}{2}a^2|\varepsilon| < w < (\hbar v_F)^2/|\varepsilon|$ [43].

Bi₂Se₃ thin films. Next, we apply our approach to model thin films of the topological insulator Bi₂Se₃. Bulk Bi₂Se₃ is composed of van der Waals interacting quintuplelayers (QLs). Each QL is formed by an alternation of covalent bonded hexagonal monolayers of Se-Bi-Se-Bi-Se. The effective Hamiltonian for both the bulk and its surface states are well known [37, 40, 41]. Here, we choose to write it on the basis of surface states of semi-infinite solutions from the top (T) and bottom (B) surfaces, i.e., $\{\varphi_{T\uparrow}(\mathbf{r}), \varphi_{T\downarrow}(\mathbf{r}), \varphi_{B\uparrow}(\mathbf{r}), \varphi_{B\downarrow}(\mathbf{r})\}$, where $\{\uparrow, \downarrow\}$ refers to the spin along z . Up to linear order in $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ the Hamiltonian reads [43]

$$H = \varepsilon_0 + \hbar v_F (k_x \gamma_{3y} - k_y \gamma_{3x}) + F \gamma_{30} + \Delta \gamma_{10} + B \gamma_{0z}, \quad (2)$$

where $\gamma_{ij} = \tau_i \otimes \sigma_j$, σ and τ are $\text{su}(2)$ operators acting on spin and surface subspaces, ε_0 is the energy reference, F represents the intensity of a structural inversion asymmetry (SIA) field, Δ is the hybridization coupling between the surfaces, and B is a generic Zeeman field. We extract these parameters from DFT simulations [43, 45]. For a pristine Bi₂Se₃ stacking of seven QLs, the Dirac bands are well defined and we find $v_F = 479$ nm/ps [46], $\varepsilon_0 = -12$ meV, $F = \Delta \approx 0$. Additionally, in the Supplemental Material we analyze the band structure of Bi₂Se₃ contacted by a Ti metallic lead. At this interface, a charge transfer yields a bias field $F \approx 95$ meV and a shift of the Dirac cones $\varepsilon_0 \approx -150$ meV. Moreover, these are coupled to metallic bands near the Fermi level, which will allow us to use the wide-band approximation later on.

A finite F splits the Dirac cones from the top and bottom surfaces without opening a gap, while Δ opens a gap hybridizing the surfaces, and B opens a gap by breaking TRS. Therefore, there are two possible Wilson mass terms that can be added to H to eliminate the doublers and define the types of hard-wall boundary conditions. These are

$$H_B = m_B \frac{a^2}{4} k^2 \gamma_{0z}, \quad \text{and} \quad H_\Delta = m_\Delta \frac{a^2}{4} k^2 \gamma_{10}. \quad (3)$$

Hereafter we will refer to m_B and m_Δ as the Wilson masses for a B -type and Δ -type hard-wall confinements.

These break the same symmetries as B and Δ . Similarly to the range of w above, the appropriate range for $m_{B/\Delta}$ is $|\varepsilon|/2 < |m_{B/\Delta}| < (2\hbar v_F/a)^2/|\varepsilon|$ [43].

Chiral symmetries. A chiral symmetry [47–49] is defined by an operator \mathcal{P} that anticommutes with H . Consequently, it assures that for every eigenstate of H with energy ε , there is a chiral partner with energy $-\varepsilon$. For the Bi_2Se_3 H above, we find four candidate operators for chiral symmetries that obey

$$\{\mathcal{P}_{0z}, H - \varepsilon_0\} = 2B + 2\Delta\gamma_{1z} + 2F\gamma_{3z}, \quad (4)$$

$$\{\mathcal{P}_{10}, H - \varepsilon_0\} = 2B\gamma_{1z} + 2\Delta, \quad (5)$$

$$\{\mathcal{P}_{20}, H - \varepsilon_0\} = 2B\gamma_{2z}, \quad (6)$$

$$\{\mathcal{P}_{3z}, H - \varepsilon_0\} = 2B\gamma_{30} + 2F\gamma_{0z}, \quad (7)$$

where $\mathcal{P}_{ij} \equiv \gamma_{ij}$. For simplicity, we omit the Wilson masses m_B and m_Δ , but their contributions follow the B and Δ terms above. In accordance with the NNT [29, 30], a finite m_B or m_Δ breaks some chiral symmetries. Particularly, $m_B \neq 0$ breaks them all. However, we find that combining the \mathcal{P} operators above with the TRS operator $\mathcal{T} = -i\gamma_{0y}\mathcal{K}$ (\mathcal{K} is complex conjugation) as $\mathcal{P}'_j = \mathcal{P}_j\mathcal{T}$, one obtains similar anticommutation relations independent of B [43].

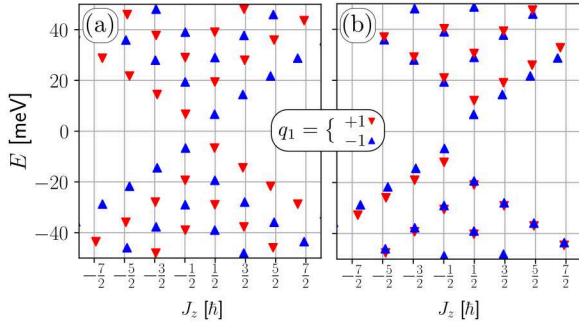


Figure 2. Spectrum of a circular Bi_2Se_3 thin-film quantum dot as a function of the total angular momentum j_z . The up- (blue) and down-pointing (red) triangles refer to the chiral charge $q_{1z} = \pm 1$. (a) For the Δ -type confinement both the chirality ($\varepsilon_{j_z, -q_{1z}} = -\varepsilon_{j_z, q_{1z}}$) and TRS ($\varepsilon_{-j_z, -q_{1z}} = \varepsilon_{j_z, q_{1z}}$) are preserved. (b) The B -type confinement breaks both chiral and TRS, but preserves their product ($\varepsilon_{-j_z, q_{1z}} = -\varepsilon_{j_z, q_{1z}}$).

Circular dot. To illustrate the Δ - and B -type confining potentials and the chiral symmetries, we consider a circular quantum dot of radius R on a Bi_2Se_3 thin film modeled by H in Eq. (2) and the Wilson masses in Eq. (3). For this geometry, the z -component $J_z = L_z + S_z$ of the total angular momentum is conserved [37], which allows us to label the states by its eigenvalues $j_z = (m + \frac{1}{2})\hbar$, where m is an integer. The discrete spectrum of this quantum dot for Δ -type ($m_\Delta = -500$ meV) and B -type ($m_B = -500$ meV) confining potentials are shown in Fig. 2 as a function of j_z . For simplicity, in both cases, $\varepsilon_0 = F = B = 0$, $\Delta = -5$ meV, and $v_F = 479$ nm/ps.

The eigenvalues are obtained using a square lattice in which the sites are connected only for $r \leq R = 50$ nm, and $N = 100$ sites along the diagonal.

For the Δ -type confinement shown in Fig. 2(a), \mathcal{P}_{20} and \mathcal{P}_{3z} are chiral symmetries. These combine to define the chiral charge $\mathcal{Q}_{1z} = -i\mathcal{P}_{20}\mathcal{P}_{3z} = \gamma_{1z}$, such that $[\mathcal{Q}_{1z}, H] = 0$. Together with j_z , the eigenvalues $q_{1z} = \pm 1$ of \mathcal{Q}_{1z} are used to label the eigenenergies as $\varepsilon_{n, j_z, q_{1z}}$, where n is an extra index that labels the different solutions with the same j_z and q_{1z} . Since $\{\mathcal{P}, H\} = 0$, $[\mathcal{P}, J_z] = 0$ and $\{\mathcal{P}_j, \mathcal{Q}_{1z}\} = 0$, every state with energy $\varepsilon_{n, j_z, q_{1z}}$ has a chiral partner with energy $\varepsilon_{n, j_z, -q_{1z}} = -\varepsilon_{n, j_z, q_{1z}}$. Similarly, the TRS produces the Kramer partners with energies $\varepsilon_{n, -j_z, -q_{1z}} = \varepsilon_{n, j_z, q_{1z}}$. Combined, these two symmetries produce the X-shaped spectrum of Fig. 2(a). In contrast, Fig. 2(b) shows the spectrum for the B -type confinement, for which the chiral symmetries \mathcal{P} and TRS are broken. Here, the time-reversal chiralities \mathcal{P}'_{20} and \mathcal{P}'_{3z} are preserved. These combine to give the same chiral charge \mathcal{Q}_{1z} . However, now $\{\mathcal{P}', J_z\} = 0$ and $[\mathcal{P}', \mathcal{Q}_{1z}] = 0$. Consequently, a state with energy $\varepsilon_{n, j_z, q_{1z}}$ has a time-reversal chiral partner with energy $\varepsilon_{n, -j_z, q_{1z}} = -\varepsilon_{n, j_z, q_{1z}}$, yielding the single linear branch and the shifted bands in Fig. 2(b). The agreement between these exact relations and the numerical results in Fig. 2 show that our approach does eliminate the doublers without any harm to the chiralities that remain in the presence of confinement.

Conductance across a ribbon device. As another example of our main result, let us now calculate the conductance across the Bi_2Se_3 surface. We consider a geometry that was recently realized experimentally [50], where the leads are contacted with metal electrodes, while the scattering region is pristine Bi_2Se_3 . The conductance peaks reflect the degeneracy of the states, which are directly affected by the symmetry breaking discussed previously. In the leads, the hybridization between the topmost QLS Bi_2Se_3 and the metal [51] puts the chemical potential within an energy window composed of Bi_2Se_3 surface and Ti states [43]. Therefore, we can judiciously assume that the effect of the leads is essentially to broaden the discrete Fabry-Perot resonances in the confined central region. Within this simplified description, we introduce the self-energies $\Sigma_\ell^j(E)$ with $\ell = L, R$ (for left and right) and $j = T, B$ (for top and bottom), which in the wide-band limit are $\Sigma_\ell^j(E) = -i\tilde{\Sigma}_\ell^j(E_F)\Theta(D - |E - E_F|)$; see Fig. 3(a). Here, $\tilde{\Sigma}_\ell^j(E_F)$ is a real quantity giving the broadening of the sites interfacing the ℓ th TI lead, and D is some suitable cutoff energy. This rather crude simplification is very suitable for numerical simulations of realistically sizable systems. Nonetheless, it gives qualitatively plausible results for the conductance as compared to those obtained with a complete model.

For the scattering region we consider square surfaces of pristine Bi_2Se_3 of side $W = 100$ nm, discretized into a 20×20 site grid. A two-terminal case ($N_L = 2$) is built with the top left and right ($\ell = L$ and R) leads with symmetric broadening $\tilde{\Sigma}_\ell^T = 1$ meV. Moreover, despite the

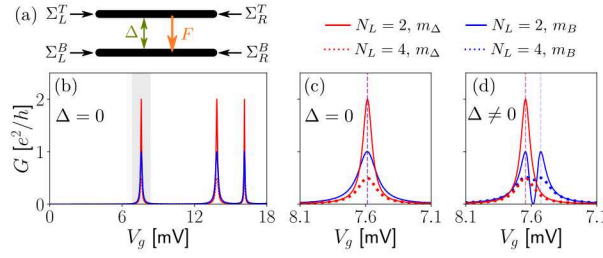


Figure 3. (a) Illustration of the top and bottom Bi_2Se_3 surfaces coupled by Δ , biased by F , and contacted by effective leads introduced by the self-energies Σ_ℓ^j . (b) Conductance vs V_g for $\Delta = 0$. The $V_g \sim 7.6$ mV peak is shown in detail in (c) for $\Delta = 0$, and (d) for $\Delta = 0.1$ meV. Red (blue) lines correspond to Δ -type (B -type) confinement, and solid (dashed) lines refer to the $N_L = 2$ (4) terminal model.

reduced coupling to the metal contact, a four-terminal ($N_L = 4$) case is also considered with $\Sigma_\ell^B = 1$ meV. Figure 3(b) shows the conductance G versus gate voltage V_g for $\Delta = 0$, $N_L = 2(4)$ as solid (dashed) lines, and both Δ -type (blue lines, $m_\Delta = -100$ meV) and B -type (red lines, $m_B = -100$ meV) confinements. Figures 3(c) and 3(d) zoom to show details of the $V_g \sim 7.6$ mV peaks. For the $N_L = 2$ case with the Δ -type confinement, we observe that the peaks reach $2G_0$, where the factor 2 results from the TR pair of degenerate states (symmetric and antisymmetric combinations of the top and bottom surface states) that contribute as independent conducting channels. These peaks are not substantially affected by the presence of small $\Delta \neq 0$, as we see in Fig. 3(d). In contrast, for the B -type confinement the conductance peaks reach only G_0 in Fig. 3, for $\Delta = 0$. Indeed, here TRS is broken and one would already expect a single conducting channel. More interestingly, a finite $\Delta = 0.1$ meV splits this peak, showing $G = 0$ in the middle. This can be understood in terms of the \mathcal{P}' chiral symmetries and the conserved chiral charge \mathcal{Q}_1 , which assures that for $\Delta = 0$, every state located in one surface has a degenerate partner in the other surface [43]. A finite Δ couples these partners, producing two coherent channels that interfere destructively ($G = 0$) for some particular value of V_g . For $N_L = 4$, the conductance is still calculated between the top terminals (dashed lines in Fig. 3). Overall, this yields a decrease of G whenever the top and bottom surfaces are coupled (Δ -type confinement or $\Delta \neq 0$). In this situation, the channels involving the bottom surface states are broadened by the bottom contacts, therefore they act as incoherent channels, destroying the perfect inference.

Zigzag graphene nanoribbon. As a final application of our proposal, we present the band structure of a zigzag graphene nanoribbon around its K point in Fig. 4. This is a particularly interesting case as it allows us to compare the numerical results directly with well known analytical solutions [52–55], which are shown as black solid lines in Fig. 4(c). For the numerical approach we

start with graphene's effective model around K , $H_K = \hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{K})$, where \mathbf{k} is measured from the origin at $\bar{\Gamma}$ in Fig. 4(b), and $k_y \rightarrow -i\partial_y$ is discretized into $N = 100$ sites. Around K' one obtains $H_{K'}$ replacing $\sigma_y \rightarrow -\sigma_y$ and $\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K}'$, which compose our block-diagonal $H_0 = H_K \oplus H_{K'}$. To regularize the boundary conditions for the zigzag nanoribbon we consider a Wilson mass term $H_Z = m_z \frac{a^2}{4} k_y^2 (\tau_x \otimes \sigma_y)$, where τ_x couples the K and K' subspaces, and m_z is chosen within the range set by the inequalities discussed previously. The agreement between the numerical band structure and the exact solution shown in Fig. 4(c) is patent, which illustrates the effectiveness of our approach.

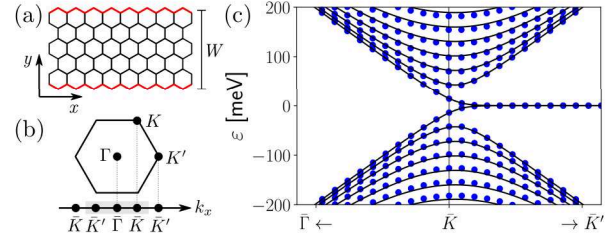


Figure 4. (a) A graphene nanoribbon with zigzag terminations and width W . (b) The first Brillouin zone of bulk graphene and its projection (shaded area) along the nanoribbon's k_x . (c) Band structure around \bar{K} for a $W \approx 71$ nm ribbon comparing the analytical solution (black solid lines) and our numerical approach with a Wilson mass (blue dots).

Conclusions. We have shown that the Wilson mass not only eliminates the doublers in Dirac-like Hamiltonians, but also allows us to control the hard-wall boundary conditions. This contrasts with the high-energy physics, where neither the broken symmetry nor confinement are desirable. Therefore, for confined solid state systems, the NNT is easily bypassed. Interestingly, these effects were overlooked in models that already include the parabolic terms [11, 21, 56, 57]. Indeed, in the Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) model [56], for instance, the term $-Bk^2\sigma_z$ plays the role of the Wilson mass, with the Pauli matrix σ_z acting on the E_1/H_1 subspace, yielding a Dirac mass-type hard wall [57]. In contrast, graphene models are usually restricted to the linear terms, which limits its use. Here, we have seen that a zigzag termination can be well modeled by incorporating an appropriate Wilson's mass. For the armchair case, one can directly combine Ref. [35] with our approach.

Applying our model to model Bi_2Se_3 quantum dots, we have shown that numerical results satisfy all symmetry constraints that are compatible with the chosen type of confinement. Particularly, the Δ -type confinement is compatible with thin films [11], yielding noninteracting conductance peaks $G = 2 e^2/h$, which is a necessary ingredient for the Kondo regime suggested in Ref. 50. As a final remark, notice that Ref. 21 considers only a B -type mass, which breaks TRS, and the confinement properties are not discussed. Therefore, our model generalizes and

improves their results.

The authors acknowledge the financial support from the Brazilian Agencies CNPq, CAPES, and FAPEMIG.

- ¹ B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 106802 (2006).
- ² M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- ³ M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- ⁴ X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- ⁵ M. Götze, T. Paananen, G. Reiss, and T. Dahm, *Phys. Rev. Appl.* **2**, 054010 (2014).
- ⁶ M. Götze, M. Joppe, and T. Dahm, *Sci. Rep.* **6**, 36070 (2016).
- ⁷ H. P. Paudel and M. N. Leuenberger, *Phys. Rev. B* **88**, 085316 (2013).
- ⁸ A. L. Yeats, Y. Pan, A. Richardella, P. J. Mintun, N. Samarth, and D. D. Awschalom, *Sci. Adv.* **1**, e1500640 (2015).
- ⁹ Y. S. Kim, M. Brahlek, N. Bansal, E. Edrey, G. A. Kapilevich, K. Iida, M. Tanimura, Y. Horibe, S.-W. Cheong, and S. Oh, *Phys. Rev. B* **84**, 073109 (2011).
- ¹⁰ S. K. Mishra, S. Satpathy, and O. Jepsen, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 461 (1997).
- ¹¹ L. Hao, P. Thalmeier, and T. K. Lee, *Phys. Rev. B* **84**, 235303 (2011).
- ¹² T. DeGrand, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **152**, 1 (2007).
- ¹³ S. Chandrasekharan and U.-J. Wiese, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **53**, 373 (2004).
- ¹⁴ L. Susskind, *Phys. Rev. D* **16**, 3031 (1977).
- ¹⁵ R. Stacey, *Phys. Rev. D* **26**, 468 (1982).
- ¹⁶ J. Tworzydło, C. W. Groth, and C. W. J. Beenakker, *Phys. Rev. B* **78**, 235438 (2008).
- ¹⁷ A. R. Hernández and C. H. Lewenkopf, *Phys. Rev. B* **86**, 155439 (2012).
- ¹⁸ K. G. Wilson, *Phys. Rev. D* **10**, 2445 (1974).
- ¹⁹ J. B. Kogut and L. Susskind, *Phys. Rev. D* **11**, 395 (1975).
- ²⁰ A. Bermudez, L. Mazza, M. Rizzi, N. Goldman, M. Lewenstein, and M. A. Martin-Delgado, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 190404 (2010).
- ²¹ Y.-F. Zhou, H. Jiang, X. C. Xie, and Q.-F. Sun, *Phys. Rev. B* **95**, 245137 (2017).
- ²² B. Svetitsky, S. D. Drell, H. R. Quinn, and M. Weinstein, *Phys. Rev. D* **22**, 490 (1980).
- ²³ H. R. Quinn and M. Weinstein, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2617 (1986).
- ²⁴ J. P. Costella, [arXiv:hep-lat/0207008](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0207008). [arXiv:hep-lat/0207015](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0207015).
- ²⁵ D. B. Kaplan, *Phys. Lett. B* **288**, 342 (1992).
- ²⁶ D. B. Kaplan and S. Sun, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 181807 (2012).
- ²⁷ M. Creutz, [arXiv:hep-lat/9410008](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9410008). *Nucl. Phys. B* **42**, 56 (1995).
- ²⁸ M. Creutz and I. Horvath, *Nucl. Phys. B* **34**, 583 (1994).
- ²⁹ H. B. Nielsen and M. Ninomiya, *Phys. Lett. B* **105**, 219 (1981); *Nucl. Phys. B* **185**, 20 (1981).
- ³⁰ L. H. Karsten, *Phys. Lett. B* **104**, 315 (1981).
- ³¹ O. Klein, *Z. Phys.* **53**, 157 (1929).
- ³² M. Katsnelson, K. Novoselov, and A. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- ³³ M. V. Berry and R. J. Mondragon, *Proc. R. Soc. Lond., Ser. A* **412**, 53 (1987).
- ³⁴ V. Alonso, S. D. Vincenzo, and L. Mondino, *Eur. J. Phys.* **18**, 315 (1997).
- ³⁵ E. McCann and V. I. Fal'ko, *J. Phys. Condens. Mat.* **16**, 2371 (2004).
- ³⁶ C. Ertler, M. Raith, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **89**, 075432 (2014).
- ³⁷ G. J. Ferreira and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 106802 (2013).
- ³⁸ A. L. Yeats, P. J. Mintun, Y. Pan, A. Richardella, B. B. Buckley, N. Samarth, and D. D. Awschalom, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **114** (2017).
- ³⁹ G. J. Ferreira, M. N. Leuenberger, D. Loss, and J. C. Egues, *Phys. Rev. B* **84**, 125453 (2011).
- ⁴⁰ H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Nat. Phys.* **5**, 438 (2009).
- ⁴¹ W.-Y. Shan, H.-Z. Lu, and S.-Q. Shen, *New J. Phys.* **12**, 043048 (2010).
- ⁴² G. Kresse and J. Furthmüller, *Comput. Mater. Sci.* **6**, 15 (1996).
- ⁴³ See Supplemental Material at <http://link.aps.org/supplemental/00.0000/xxxxxxxxxx.000.000000> for additional details, which includes Refs. 58–63.
- ⁴⁴ C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, *New J. Phys.* **16**, 063065 (2014).
- ⁴⁵ T. Förster, P. Krüger, and M. Rohlfing, *Phys. Rev. B* **92**, 201404 (2015).
- ⁴⁶ Y. Zhang, K. He, C.-Z. Chang, C.-L. Song, L.-L. Wang, X. Chen, J.-F. Jia, Z. Fang, X. Dai, W.-Y. Shan, S.-Q. Shen, Q. Niu, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, *Nat. Phys.* **6**, 584 (2010).
- ⁴⁷ A. Altland and M. R. Zirnbauer, *Phys. Rev. B* **55**, 1142 (1997).
- ⁴⁸ D. Bernard and A. LeClair, *J. Phys. A Math. Gen.* **35**, 2555 (2002).
- ⁴⁹ A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008).
- ⁵⁰ S. Cho, R. Zhong, J. A. Schneeloch, G. Gu, and N. Mason, *Sci. Rep.* **6**, 21767 (2016).
- ⁵¹ I. S. S. de Oliveira, W. L. Scopel, and R. H. Miwa, *J. Phys. Condens. Mat.* **29**, 045302 (2017).
- ⁵² K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- ⁵³ L. Brey and H. A. Fertig, *Phys. Rev. B* **73**, 195408 (2006).
- ⁵⁴ L. Brey and H. A. Fertig, *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006).
- ⁵⁵ A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- ⁵⁶ B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- ⁵⁷ P. Michetti, P. Penteado, J. C. Egues, and P. Recher, *Semicond. Sci. Technol.* **27**, 124007 (2012).
- ⁵⁸ J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).

- ⁵⁹ H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
- ⁶⁰ P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
- ⁶¹ K. Lee, E. D. Murray, L. Kong, B. I. Lundqvist, and D. C. Langreth, *Phys. Rev. B* **82**, 081101 (2010).
- ⁶² Z.-G. Mei, S.-L. Shang, Y. Wang, and Z.-K. Liu, *Phys. Rev. B* **80**, 104116 (2009).
- ⁶³ E. Zhao, C. Zhang, and M. Lababidi, *Phys. Rev. B* **82**, 205331 (2010).

Supplemental Material for: Confinement and Fermion Doubling Problem in **Dirac-like Hamiltonians**

B. M. de Resende, F. Crasto de Lima, R. H. Miwa, E. Vernek, and G. J. Ferreira
Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG 38400-902, Brazil
(Dated: October 24, 2017)

I. DFT MODEL AND RESULTS

The calculations were performed based on the DFT approach, as implemented in the VASP code [S1]. The exchange correlation term was described using the GGA approach in the form proposed by Perdew, Burke and Ernzerhof (PBE) [S2]. The Kohn-Sham orbitals are expanded in a plane wave basis set with an energy cutoff of 400 eV. The 2D Brillouin Zone (BZ) is sampled according to the Monkhorst-Pack method [S3], using a $8 \times 8 \times 1$ mesh. The electron-ion interactions are taken into account using the Projector Augmented Wave (PAW) method [S4]. All geometries have been relaxed until atomic forces were lower than 0.025 eV/\AA . The van der Waals interactions (vdW-DF2 [S5]) were included to correctly describe the system. In all cases, we have considered a vacuum region of at least 24 \AA to avoid periodic-image interactions.

The metal/topological-insulator interface, $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$ [S6], was modeled by considering a Ti- ω hexagonal slab of 14 atomic layers stacked over the hexagonal Bi_2Se_3 (001) surface, which in turn is described by a slab composed by 7 quintuple layers (QLs), Fig. S1(a). At low temperatures ($\sim 16 \text{ mK}$) the ω phase of Ti is the most stable [S7], with a lattice parameter $a = 4.57 \text{ \AA}$ [S7]. This remains true despite the $\sim 8\%$ compression needed to accommodate the lattice parameter $a = 4.21 \text{ \AA}$ of Bi_2Se_3 .

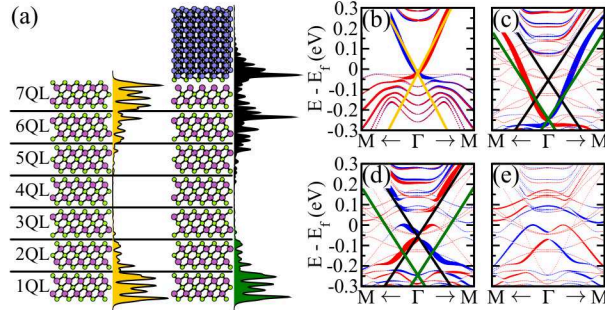


Figure S1. (a) Structural geometry and local DOS of Bi_2Se_3 ($\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$) in the left (right) for E near the Dirac points. Purple, green and blue circles are for Bi, Se and Ti atoms. Spin projected band structure ($|\langle \#QL | n, \mathbf{k} \rangle|^2$) with red (blue) dots labeling $\text{sign}(\langle S_y \rangle) = +1$ (-1) for (b) Bi_2Se_3 7QL, (c) $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$ 1QL, (d) $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$ 6QL, (e) $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$ 7QL. The lines in (b)-(d) are fits to the surface states model, Eq. (??), with the color code matching the DOS in panel (a).

The band structure of pristine Bi_2Se_3 near Γ shows

the Dirac-like energy dispersion for states localized into the topmost QL (7QL), as seen in Fig. S1(b), for which we find $v_F = 479 \text{ nm/ps}$, $\varepsilon_0 = -12 \text{ meV}$, $F = \Delta \approx 0$. There, the dot size represents its localization into the surface, while the color refers to the spin up (blue) and down (red) projections, which evidences its helical nature. The bottommost QL is degenerate with this one, but with opposite spin projections. It is known that a better description of the surface states below the Fermi level for Bi_2Se_3 requires a GW calculation [S8], which is computationally expensive. However, despite Bi_2Se_3 surface states below the Fermi energy been imperfectly described by DFT, the states above the Fermi energy are correctly described [S8]. In this way by fitting the *ab initio* band structure with the model Eq. (??) for the states within $E > E_f$ we obtain a Fermi velocity of 479 nm/ps , which is only $\sim 6\%$ greater than the experimental observation [S9].

We find quite a different picture upon the formation of the $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$ interface. At the equilibrium geometry, the topmost Se atoms of $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$ break the bond with Bi to attach covalently to the metal surface, Fig. S1(a). We can see this scenario by the increase of the Bi-Se bond length $d_{\text{BiSe}} = 2.86 \rightarrow 3.40 \text{ \AA}$ at the interface region, followed by the formation Se-Ti chemical bonds, with $d_{\text{SeTi}} = 2.63 \text{ \AA}$ close to the sum of their covalent radius (2.52 \AA). Such change in the Bi_2Se_3 surface impacts the electronic structure of the topological states. Indeed, charge transfers at the $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$ interface create a SIA field ($F = 95 \text{ meV}$, and $\varepsilon_0 = -150 \text{ meV}$) that splits the degenerate Dirac bands. The states of the 1QL are mostly unaffected ($\Delta \approx 0$), Fig. S1(c), since their coupling to the metal is negligible. On the other hand, the states of the topmost QLs hybridize with the metal, Fig. S1(d), spreading-out the density of states (DOS) peak of the pristine case from the 7QL into the metal and the 6QL, Fig. S1(a). The spin-polarized Dirac dispersion is now located in 6QL, Fig. S1(d)-(e), but shows small gaps due to the hybridization with the metal bands. Nonetheless, we can still define a Dirac-like dispersion near the Fermi level, where the coupling to the metal is weak [S10]. In this case we find $v_F = 338 \text{ nm/ps}$.

In Fig. S2 we present the Projected Density of States (PDOS) for the leads $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{Ti}$. We can see that the 1QL orbitals (black line) maintain a quasi constant Density of States (DOS) in the range $-0.2 < E < 0.05 \text{ eV}$, which is consistent with the preservation of the linearly dispersive band. Figure S2(b) shows the PDOS close to the Fermi energy, where the PDOS from the 6QL and 7QL display smooth fluctuations. Such a picture

of PDOS near the Fermi energy are in accordance with the wide band limit approximation used in the section *Conductance across a ribbon device* of the main text.

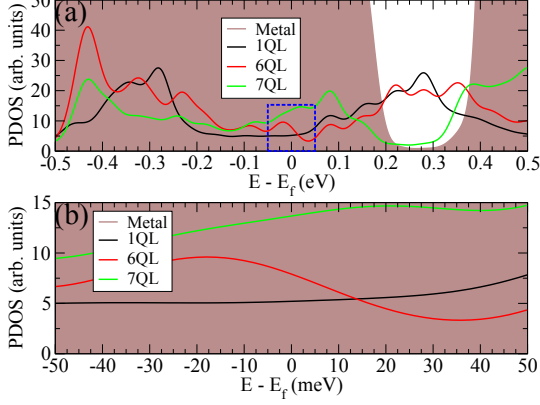


Figure S2. (a) Projected density of states of Bi₂Se₃/Ti into the Metal (brown), 1QL (black), 6QL (red) and 7QL (green) orbitals. (b) Dashed blue rectangle of (a).

II. EFFECTIVE MODEL FOR SURFACE STATES

Near the Γ point, the states around the Fermi energy of Bi₂Se₃ are described by two Bi and Se hybridized p_z orbitals $\{|p_z^{1+}; \uparrow\rangle, |p_z^{2-}; \uparrow\rangle, |p_z^{1+}; \downarrow\rangle, |p_z^{2-}; \downarrow\rangle\}$, where the sign \pm defines the parity under inversion, $\{1, 2\}$ correspond to the hybridization of two Bi and Se p_z orbitals in the unit cell, and $\nu = \{\uparrow, \downarrow\}$ is the z component of the spin. Onto this basis, the bulk Hamiltonian acquires the form

$$H = \begin{pmatrix} C + M & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & C - M & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & C + M & A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & A_1 k_z & C - M \end{pmatrix}, \quad (\text{S1})$$

where C , M , A_1 , A_2 are the symmetry allowed finite parameters up to linear order in $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$, and $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. For simplicity, let us consider $C = 0$.

For $k_x = k_y = 0$, the Schrödinger equation $H\psi = \varepsilon_0\psi$ splits into two blocks that can be easily solved for $k_z^{(\pm)} = iq_{\pm} = \pm iA_1^{-1}\sqrt{M^2 - \varepsilon_0^2}$, where we keep the eigenenergy ε_0 as a parameter to be defined by the boundary conditions. The four eigenstates associated with q_{\pm} are $\psi_{\pm, \nu}(z) = \phi_{\pm, \nu}e^{-q_{\pm}z}$, with

$$\phi_{\pm, \uparrow} = \begin{pmatrix} \pm(\varepsilon_0 + M) \\ \sqrt{\varepsilon_0^2 - M^2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi_{\pm, \downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mp(\varepsilon_0 + M) \\ \sqrt{\varepsilon_0^2 - M^2} \end{pmatrix}. \quad (\text{S2})$$

Next, let us use this basis to obtain the $z = 0$ surface states on the semi-infinite domain $z \geq 0$. The hard-wall boundary condition $(i\mathcal{M}_{\hat{n}} + \mathcal{M}_c)\psi(0) = 0$ (see Eq. (??)) for a confinement given by the M terms of Eq. (S1) is set by

$$\mathcal{M}_{\hat{n}} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{S3})$$

$$\mathcal{M}_c = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{S4})$$

For the $\psi_{\pm, \nu}(z)$ basis, this boundary condition can only be satisfied for $\varepsilon_0 = 0$, thus $q_{\pm} = \pm|M|/A_1$ defines surface states with penetration lengths $\ell = A_1/|M|$. Since we are looking for semi-infinite surface states at the $z = 0$ interface, the solutions must vanish at $z \rightarrow \infty$, which selects the q_+ states as the only physical solutions. The general solution for the $z = 0$ surface reads

$$\psi_0(z) = e^{-z/\ell} \left[c_1 \begin{pmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} \right], \quad (\text{S5})$$

where c_1 and c_2 are arbitrary coefficients.

The same procedure can be applied to obtain the $z = L$ surface state solutions in the domain $z \leq L$. Here the normal to the interface has the opposite sign from the $z = 0$ solution, hence $\mathcal{M}_{\hat{n}} \rightarrow -\mathcal{M}_{\hat{n}}$. The confinement matrix \mathcal{M}_c remains the same. In this case, the general solution reads

$$\psi_L(z) = e^{(z-L)/\ell} \left[c_3 \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_4 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad (\text{S6})$$

where c_3 and c_4 are arbitrary coefficients.

Combining $\psi_0(z)$ and $\psi_L(z)$ to form an approximate fourfold basis for a thin film on the domain $0 \leq z \leq L$, we project the full H from Eq. (S1) to obtain our effective Hamiltonian [Eq. (??)],

$$H = \varepsilon_0 + \hbar v_F(k_x \gamma_{3y} - k_y \gamma_{3x}) + F \gamma_{30} + \Delta \gamma_{10} + B \gamma_{0z}, \quad (\text{S7})$$

where $\hbar v_F = A_2$, Δ is an hybridization term that connects c_1 to c_4 and c_2 to c_3 via the confinement potentials, F is a diagonal structural inversion asymmetry (SIA) term that may arise either from an external electric field, or due to internal polarization fields as in the interface between Bi₂Se₃ and the metallic lead. The $\mathfrak{su}(2)$ operators $\boldsymbol{\sigma}$ and $\boldsymbol{\tau}$ are introduced to simplify the notation as

$\gamma_{ij} = \tau_i \otimes \sigma_j$. These act, respectively, on the spin space spanned by the (c_1, c_3) up (\uparrow) states and (c_2, c_4) down (\downarrow) states, and the top/bottom surfaces spanned by the (c_1, c_2) states ($z = 0$) and (c_3, c_4) states ($z = L$).

III. WILSON'S MASS RANGE

In order to use the Wilson's mass approach to eliminate the doublers, one must choose the value of the Wilson's mass appropriately. A too small value will not eliminate the doublers, while a too large value will deform the low energy spectrum. In this section we establish the approximate lower and upper limits for the Wilson's masses used in the main text.

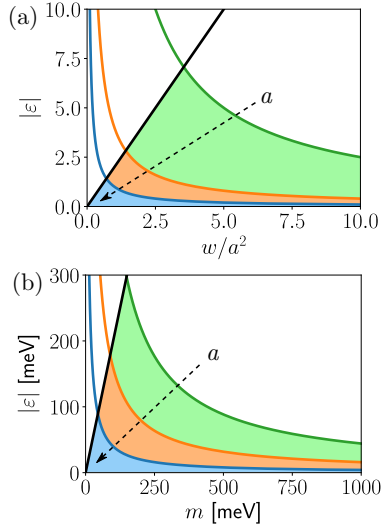


Figure S3. Range of appropriate values of the Wilson mass (shaded areas) for different energies $|\varepsilon|$ and discrete lattice step a . (a) For the unidimensional model the range of a is set by Eq. (S10), here we set $\hbar v_F = 1$ and $a = \{0.2, 0.5, 1\}$ (following the arrow). (b) For Bi_2Se_3 the range for the Wilson masses $m = m_B$ or m_Δ are set by Eq. (S13), with $a = \{3, 5, 10\}$ nm, and $v_F = 479$ nm/ps.

Let us start with the simple unidimensional case defined by $H_\xi + H_W$, where

$$H_\xi = \hbar v_F \mathcal{M}_\xi k, \quad (\text{S8})$$

$$H_W = w \mathcal{M}_c k^2, \quad (\text{S9})$$

where \mathcal{M}_ξ and \mathcal{M}_c are unitary matrices, k is the momentum along an arbitrary coordinate ξ , v_F is the Fermi velocity, and w is Wilson's mass. In a discrete lattice of spacing a , the spectrum of $H_\xi + H_W$ has a gap $\Delta\varepsilon = 2w/a^2$ at $|k| = \pi/a$, as shown in Fig. ??(a). This energy dispersion approaches the exact linear solution $\varepsilon(k) = \pm \hbar v_F k$ of H_ξ only for $|\varepsilon| \ll \Delta\varepsilon$. This establishes the lower bound $w \gg \frac{1}{2}a^2|\varepsilon|$. Next, the upper

bound is obtained by requiring H_W to be a small perturbation to H_ξ is in low energy range. That is, we want $|H_\xi| \gg |H_W|$ for small ε and k . In this limit we can use $|\varepsilon| \approx \hbar v_F k$ to eliminate k from the inequation and obtain $w \ll (\hbar v_F)^2/|\varepsilon|$. Combining these we obtain the range

$$\frac{1}{2}|\varepsilon| \ll \frac{w}{a^2} \ll \left(\frac{\hbar v_F}{a}\right)^2 \frac{1}{|\varepsilon|}. \quad (\text{S10})$$

In Fig. ??(b) of the main text, the dashed lines correspond to the lower bound rewritten as $|\varepsilon| < 2w/a^2$, while the upper bound does not show up in the range of the figure. In Fig. S3(a) we plot this inequation for different values of a .

Now let us discuss the range for m_B or m_Δ for the Bi_2Se_3 surface states from Eqs. (??) and (??). For simplicity, consider $\varepsilon_0 = F = \Delta = B = 0$ without lack of generality, such that

$$H = \hbar v_F (k_x \gamma_{3y} - k_y \gamma_{3x}), \quad (\text{S11})$$

$$H_m = m \frac{a^2}{4} k^2 \gamma_m, \quad (\text{S12})$$

where $(m, \gamma_m) = (m_B, \gamma_{0z})$ for the B -type confinement, or $(m, \gamma_m) = (m_\Delta, \gamma_{10})$ for the Δ -type confinement. All γ_{ij} matrices are unitary, and $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. The factor $a^2/4$ is included so that the mass m have energy units, and labels the gap at $|k_x|$ or $|k_y| = \pi/a$ as $\Delta\varepsilon = 2m$. Equivalently to the previous case, we want to focus on energies $\varepsilon \ll \Delta\varepsilon$, which give us the lower bound $m \gg |\varepsilon|/2$. The upper bound is then obtained requiring $|H| \gg |H_m|$, i.e. $|\varepsilon| \gg |H_m|$. The intensity $|H_m| \approx m a^2 k^2/4$, and we can use $|\varepsilon| \approx \hbar v_F |k|$ to replace k^2 and obtain $m \ll 4(\hbar v_F/a)^2/|\varepsilon|$. Combining the inequations we get the range

$$\frac{1}{2}|\varepsilon| \ll m \ll \left(\frac{2\hbar v_F}{a}\right)^2 \frac{1}{|\varepsilon|}, \quad (\text{S13})$$

which only differs from Eq. (S10) by the factor 2 in $\hbar v_F$, which is a consequence of the first case being a one dimensional model, while the current one is 2D. This range is illustrated in Fig. S3(b) for the Bi_2Se_3 parameters.

IV. SYMMETRIES

Let us discuss the symmetries of our model Hamiltonian H from Eq. (??) and Eq. (S7) for the Bi_2Se_3 surface states. For simplicity, we omit the Wilson mass terms $m_{B/\Delta}$ from Eq. (??) since, regarding the symmetries below, these terms play the same role as the Zeeman field B and surface coupling Δ terms.

The time-reversal operator is $\mathcal{T} = e^{-i\frac{\pi}{2}\gamma_{0y}}\mathcal{K} = -i\gamma_{0y}\mathcal{K}$, where \mathcal{K} is the complex conjugation. For the Bi_2Se_3 Hamiltonian, $[H, \mathcal{T}] = -2B\gamma_{0x}\mathcal{K}$. Therefore only

a finite Zeeman term B breaks time-reversal symmetry (TRS) as expected.

A chiral symmetry operator \mathcal{P} is a unitary operator that obeys

$$\{\mathcal{P}, H\} = 0, \quad \mathcal{P}\mathcal{P}^\dagger = 1, \quad \mathcal{P}^2 = 1, \quad (\text{S14})$$

where $\{\mathcal{P}, H\} = \mathcal{P}H + H\mathcal{P}$ is the anti-commutator. The chirality yields a symmetry in the energy spectrum. Given an eigenstate ϕ with energy ε , there must also exist another eigenstate $\varphi = \mathcal{P}\phi$ with energy $-\varepsilon$. Additionally, if H admits two chiral symmetries \mathcal{P} and \mathcal{P}' , one can define a conserved chiral charge $\mathcal{Q} = \mathcal{P}\mathcal{P}'$ such that it commutes with H , i.e. $[\mathcal{Q}, H] = \mathcal{Q}H - H\mathcal{Q} = 0$. Therefore, the eigenvalues q of \mathcal{Q} can be used to classify the eigenstates and block-diagonalize H .

Here we find four candidates for chiral operators: $\mathcal{P}_{0z} = \gamma_{0z}$, $\mathcal{P}_{10} = \gamma_{10}$, $\mathcal{P}_{20} = \gamma_{20}$, and $\mathcal{P}_{3z} = \gamma_{3z}$. These obey

$$\{\mathcal{P}_{0z}, H - \varepsilon_0\} = 2B + 2\Delta\gamma_{1z} + 2F\gamma_{3z}, \quad (\text{S15})$$

$$\{\mathcal{P}_{10}, H - \varepsilon_0\} = 2B\gamma_{1z} + 2\Delta, \quad (\text{S16})$$

$$\{\mathcal{P}_{20}, H - \varepsilon_0\} = 2B\gamma_{2z}, \quad (\text{S17})$$

$$\{\mathcal{P}_{3z}, H - \varepsilon_0\} = 2B\gamma_{30} + 2F\gamma_{0z}, \quad (\text{S18})$$

where the rigid shift ε_0 only affects the energy symmetry point. Notice that a finite B (or m_B) breaks all chiralities above. Which of these operators represent chiral symmetries of H depend on which terms (B , F , and Δ) are zero. Additionally, these chiral operators transform by TRS as

$$\{\mathcal{P}_{0z}, \mathcal{T}\} = 0, \quad (\text{S19})$$

$$[\mathcal{P}_{10}, \mathcal{T}] = 0, \quad (\text{S20})$$

$$\{\mathcal{P}_{20}, \mathcal{T}\} = 0, \quad (\text{S21})$$

$$\{\mathcal{P}_{3z}, \mathcal{T}\} = 0. \quad (\text{S22})$$

A. Chiralities

In the main text, Fig. ??(a) show the energy spectrum for a circular quantum dot with Δ -type hard-wall confinement and $B = F = 0$. In this case \mathcal{P}_{20} and \mathcal{P}_{3z} are chiral symmetries of H . Additionally, TRS and the total angular momentum J_z are preserved. This allow us to define a chiral charge $\mathcal{Q}_{1z} = -i\mathcal{P}_{20}\mathcal{P}_{3z} = \gamma_{1z}$, whose eigenvalues are $q_{1z} = \pm 1$. Both chiralities commute with J_z , $[\mathcal{P}_{20}, J_z] = [\mathcal{P}_{3z}, J_z] = 0$, and anti-commute with \mathcal{Q}_{1z} , $\{\mathcal{P}_{20}, \mathcal{Q}_{1z}\} = \{\mathcal{P}_{3z}, \mathcal{Q}_{1z}\} = 0$. Consequently, a state $|j_z, q_{1z}\rangle$ with energy $\varepsilon_{j_z, q_{1z}}$ has a chiral partner $|j_z, -q_{1z}\rangle$ with energy $\varepsilon_{j_z, -q_{1z}} = -\varepsilon_{j_z, q_{1z}}$, the same angular momentum j_z and opposite chirality $-q_{1z}$. The TRS anti-commutes with both J_z and \mathcal{Q}_{1z} , i.e. $\{\mathcal{T}, J_z\} = \{\mathcal{T}, \mathcal{Q}_{1z}\} = 0$. Therefore, the Kramer partner of $|j_z, q_{1z}\rangle$

is the state $|j_z, -q_{1z}\rangle$ with energy $\varepsilon_{-j_z, -q_{1z}} = \varepsilon_{j_z, q_{1z}}$. These partners are illustrated in Fig. S4(a).

In contrast with the case above, the energy spectrum in Fig. ??(b) refers to a circular quantum dot with a B -type hard-wall confinement. Here, the finite Wilson mass m_B breaks both TRS and all chiral symmetries above. However, the product $\mathcal{P}'_j = \mathcal{P}_j\mathcal{T}$ of each \mathcal{P}_j above with the time-reversal operator \mathcal{T} is preserved. We refer to these as “time-reversal chiralities”, which obey

$$\mathcal{P}'_j \mathcal{P}'_j{}^\dagger = 1, \quad \mathcal{P}'_j{}^2 = \mp 1, \quad (\text{S23})$$

where the sign \mp on the second expression refer to the cases where $[\mathcal{P}_j, \mathcal{T}] = 0$, or $\{\mathcal{P}_j, \mathcal{T}\} = 0$, respectively. Notice that if \mathcal{P}_j commutes (anti-commutes) with \mathcal{T} , then \mathcal{P}'_j anti-commutes (commutes) with \mathcal{T} . From the four chiral candidates \mathcal{P}_j above, only \mathcal{P}_{10} commutes with \mathcal{T} , yielding $\mathcal{P}'_{10}{}^2 = -1$, which does not fall into the chiral classification [S11–S13]. The three other \mathcal{P}'_j are candidates for chiral operators. For completeness, we write the anti-commutation of all four \mathcal{P}'_j with H as

$$\{\mathcal{P}'_{0z}, H - \varepsilon_0\} = (-2\Delta\gamma_{1x} - 2F\gamma_{3x})\mathcal{K}, \quad (\text{S24})$$

$$\{\mathcal{P}'_{10}, H - \varepsilon_0\} = (-2i\Delta\gamma_{0y})\mathcal{K}, \quad (\text{S25})$$

$$\{\mathcal{P}'_{20}, H - \varepsilon_0\} = 0, \quad (\text{S26})$$

$$\{\mathcal{P}'_{3z}, H - \varepsilon_0\} = (-2F\gamma_{0x})\mathcal{K}. \quad (\text{S27})$$

Interestingly, these anti-commutators do not depend upon B , and \mathcal{P}'_{20} is always a chiral operator, independent of the model parameters.

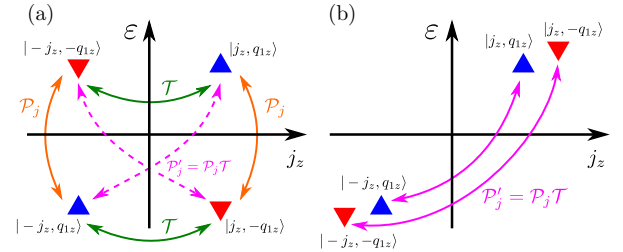


Figure S4. Energy-angular momentum diagram of the eigenstates of the cylindrical dot. The up (down) triangles label the chiral charges $q_{1z} = \pm 1$ as in Fig. ?? of the main text. (a) For the Δ -type confinement at least one chiral symmetry \mathcal{P}_j and TRS \mathcal{T} are present. As indicated in the diagram, the chiral operators \mathcal{P}_j transform the states flipping their chiral charge and energy, but preserve the total angular momentum j_z , while TRS connects the Kramer partners. (b) For the B -type confinement both TRS and the \mathcal{P}_j symmetries are broken, but their product $\mathcal{P}'_j = \mathcal{P}_j\mathcal{T}$ is preserved as a “time-reversal chiral” symmetry that connects states preserving their charge, but flipping both j_z and energy. In (a) the \mathcal{P}'_j is also present, since its components are preserved symmetries as well.

For the case of Fig. ??(a) we have $F = 0$, $m_\Delta = 0$, $\Delta \neq 0$ and $m_B \neq 0$. Therefore, the chiral operators are

\mathcal{P}'_{20} and \mathcal{P}'_{3z} . These combine to define the same chiral charge as before, i.e. $\mathcal{Q}_{1z} = -i\mathcal{P}'_{20}\mathcal{P}'_{3z} = \gamma_{1z}$. However, now they anti-commute with J_z , $\{\mathcal{P}'_{20}, J_z\} = \{\mathcal{P}'_{3z}, J_z\} = 0$, and commute with \mathcal{Q}_{1z} , $[\mathcal{P}'_{20}, \mathcal{Q}_{1z}] = [\mathcal{P}'_{3z}, \mathcal{Q}_{1z}] = 0$. Consequently, the state $|j_z, q_{1z}\rangle$ with energy $\varepsilon_{j_z, q_{1z}}$ has a chiral partner $|-j_z, q_{1z}\rangle$ with energy $\varepsilon_{-j_z, q_{1z}} = -\varepsilon_{j_z, q_{1z}}$ and the same charge, as illustrated in Fig. S4(b). Since TRS is broken by m_B , there's no Kramer partners in this case.

B. Surface localization

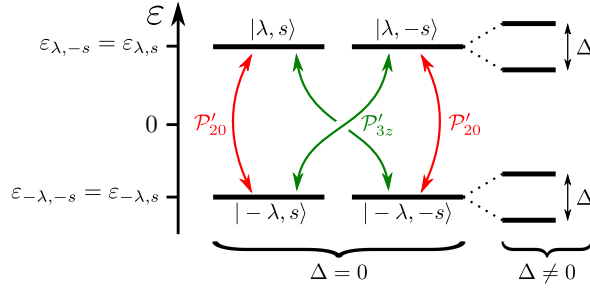


Figure S5. Energy diagram of the eigenstates $|\lambda, s\rangle$, where $\lambda = \pm 1$ labels the energy sign and s are the eigenvalues of the surface operator $S = \gamma_{30}$, with $s = +1(-1)$ for the top (bottom) surface. On the left, for $\Delta = 0$, the chirality \mathcal{P}'_{20} transform the states flipping the sign of λ in a fixed surface s , while \mathcal{P}'_{3z} flips both λ and the surface s . On the right a finite Δ hybridizes the surfaces, thus splitting the degenerate levels.

Apart from J_z , all other symmetries discussed above

for the cylindrical quantum dot holds for the transport properties discussion that follows Fig. ?? in the main text. Additionally, since there Δ is either zero or small, it is interesting to discuss the localization of the surface states. For such, let us define the surface operator $S = \gamma_{30}$, whose eigenvalues $s = \pm 1$ refer to the top and bottom surfaces. Evidently, s is a good quantum number only if Δ (and m_Δ) are zero, otherwise

$$[H, S] = 2i\Delta\gamma_{20}. \quad (\text{S28})$$

Let us consider the B -type confinement and $[H, S] = 0$. Since TRS is broken by m_B , the relevant chiralities are \mathcal{P}'_{20} and \mathcal{P}'_{3z} , thus yielding the conserved charge \mathcal{Q}_{1z} , i.e. $[H, \mathcal{Q}_{1z}] = 0$. However, since $\{S, \mathcal{Q}_{1z}\} = 0$, there are no common basis between H , \mathcal{Q}_{1z} , and S . In the previous discussion regarding the chiral symmetries on the cylindrical quantum dot we have used a common basis between H , \mathcal{Q}_{1z} and J_z . Instead, hereafter we shall consider a common basis between H and S , which we label as $|\lambda, s\rangle$, where $s = \pm 1$ is the surface eigenvalue, and $\lambda = \pm 1$ will distinguish the chiral partners. Interestingly, we find $[\mathcal{P}'_{20}, S] = 0$ and $\{\mathcal{P}'_{3z}, S\} = 0$, which tell us that each $|\lambda, s\rangle$ have two chiral partners: (i) $|\lambda, s\rangle = \mathcal{P}'_{20} |\lambda, s\rangle$ in the same surface, but with energy $\varepsilon_{-\lambda, s} = -\varepsilon_{\lambda, s}$; and (ii) $|\lambda, -s\rangle = \mathcal{P}'_{3z} |\lambda, s\rangle$ in the opposite surface and energy $\varepsilon_{-\lambda, -s} = -\varepsilon_{\lambda, s}$. Moreover, combining these two symmetries, the relation $\{S, \mathcal{Q}_{1z}\} = 0$ give us a fourth state, which we dub as a “charge” partner given by $|\lambda, -s\rangle = \mathcal{Q}_{1z} |\lambda, s\rangle$ in opposite surface and degenerate in energy, i.e. $\varepsilon_{\lambda, -s} = +\varepsilon_{\lambda, s}$. These transformations are illustrated in Fig. S5. For a small, but finite Δ , the degenerate eigenstates hybridize and split as seen in Fig. ??(b) in the main text.

-
- [S1] G. Kresse and J. Furthmüller, *Comput. Mater. Sci.* **6**, 15 (1996).
 - [S2] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
 - [S3] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
 - [S4] P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
 - [S5] K. Lee, E. D. Murray, L. Kong, B. I. Lundqvist, and D. C. Langreth, *Phys. Rev. B* **82**, 081101 (2010).
 - [S6] S. Cho, R. Zhong, J. A. Schneeloch, G. Gu, and N. Mason, *Sci. Rep.* **6**, 21767 (2016).
 - [S7] Z.-G. Mei, S.-L. Shang, Y. Wang, and Z.-K. Liu, *Phys. Rev. B* **80**, 104116 (2009).
 - [S8] T. Förster, P. Krüger, and M. Rohlfing, *Phys. Rev. B* **92**, 201404 (2015).
 - [S9] Y. Zhang, K. He, C.-Z. Chang, C.-L. Song, L.-L. Wang, X. Chen, J.-F. Jia, Z. Fang, X. Dai, W.-Y. Shan, S.-Q. Shen, Q. Niu, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, *Nat Phys* **6**, 584 (2010).
 - [S10] E. Zhao, C. Zhang, and M. Lababidi, *Phys. Rev. B* **82**, 205331 (2010).
 - [S11] A. Altland and M. R. Zirnbauer, *Phys. Rev. B* **55**, 1142 (1997).
 - [S12] D. Bernard and A. LeClair, *J. Phys. A Math. Gen.* **35**, 2555 (2002).
 - [S13] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008).

Referências

- 1 CHO, S. et al. Kondo-like zero-bias conductance anomaly in a three-dimensional topological insulator nanowire. *Nature Publishing Group*, Nature Publishing Group, n. October 2015, p. 1–27, 2016. ISSN 2045-2322.
- 2 SHAN, W. Y.; LU, H. Z.; SHEN, S. Q. Effective continuous model for surface states and thin films of three-dimensional topological insulators. *New Journal of Physics*, v. 12, 2010. ISSN 13672630.
- 3 SESHADRI, R.; SEN, D. Confining Dirac electrons on a topological insulator surface using potentials and a magnetic field. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, v. 89, n. 23, p. 1–11, 2014. ISSN 1550235X.
- 4 VOLOVIK, G. E. *The universe in a helium droplet*. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2003. v. 117.
- 5 ANDERSON, P. W. Plasmons, gauge invariance, and mass. *Physical Review*, APS, v. 130, n. 1, p. 439, 1963.
- 6 PAWLAK, R. et al. Probing atomic structure and majorana wavefunctions in mono-atomic fe-chains on superconducting Pb-surface. *arXiv preprint arXiv:1505.06078*, 2015.
- 7 CREUTZ, M. Emergent spin. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 342, p. 21–30, 2014.
- 8 The Royal Swedish Academy of Sciences. Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2016, Topological phase transitions and topological phases of matter. *The Royal Swedish Academy of Sciences*, v. 50005, 2016.
- 9 UNRUH, W. G. Maintaining coherence in quantum computers. *Physical Review A*, APS, v. 51, n. 2, p. 992, 1995.
- 10 OGBURN, R. W.; PRESKILL, J. Topological quantum computation. In: *Quantum computing and quantum communications*. [S.l.]: Springer, 1999. p. 341–356.
- 11 KOUWENHOVEN, L.; GLAZMAN, L. Revival of the kondo effect. *Physics world*, IOP Publishing, v. 14, n. 1, p. 33, 2001.
- 12 GOLDHABER-GORDON, D. et al. Kondo physics in a single electron transistor. *arXiv preprint cond-mat/9707311*, 1997.
- 13 CRONENWETT, S. M.; OOSTERKAMP, T. H.; KOUWENHOVEN, L. P. A tunable kondo effect in quantum dots. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 281, n. 5376, p. 540–544, 1998.
- 14 FEYNMAN, R. *The Feynman lectures on physics*. New York: Basic Books, a member of the Perseus Books Group, 2011. v. 1. ISBN 978-0-465-02414-8. Disponível em: <http://www.feynmanlectures.caltech.edu/I_52.html>.
- 15 JOSHI, A. *Elements of Group Theory for Physicists*. [S.l.]: New Age International Pvt Ltd Publishers, 2008. ISBN 812240975X.

- 16 WILSON, A. H. The theory of electronic semi-conductors. *Proceedings of the Royal Society of London.*, JSTOR, v. 133, n. 822, p. 458–491, 1931. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/133/822/458>>.
- 17 BLOCH, F. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. *Zeitschrift for Physik*, Springer Nature, v. 52, n. 7-8, p. 555–600, jul. 1929.
- 18 LANDAU, L. D. On the theory of phase transitions. i. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, v. 11, p. 19, 1937. Disponível em: <<http://www.ujp.bitp.kiev.ua/files/journals/53/si/53SI08p.pdf>>.
- 19 SALINAS, S. R. *Introdução a física estatística*. [S.l.]: Edusp, 1997.
- 20 INUI, T.; TANABE, Y.; ONODERA, Y. *Group Theory and Its Applications in Physics*. [S.l.]: Springer Berlin Heidelberg, 1990.
- 21 NAKAHARA, M. *Geometry, topology and physics*. [S.l.]: CRC Press, 2003.
- 22 POINCARÉ, H. *Sur les propriétés des fonctions définies par les équations aux différences partielles*. [S.l.]: Gauthier-Villars, 1879.
- 23 HOPF, H. Vektorfelder inn-dimensionalen mannigfaltigkeiten. *Mathematische Annalen*, Springer, v. 96, n. 1, p. 225–249, 1927.
- 24 KARSTEN, L. H. Lattice fermions in euclidean space-time. *Phys. Lett. B*, v. 104, p. 315, 1981.
- 25 THE Geometry of an Art. Springer New York, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007%2F978-0-387-48946-9>>.
- 26 GALLIER, J. *Geometric methods and applications: for computer science and engineering*. [S.l.]: Springer Science Business Media, 2011. v. 38.
- 27 AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 115, p. 485–491, ago. 1959.
- 28 BERRY, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. In: THE ROYAL SOCIETY. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. [S.l.], 1984. v. 392, n. 1802, p. 45–57.
- 29 LYRE, H. Berry phase and quantum structure. n. 1, p. 1–14, 2014.
- 30 GRIGORENKO, A. N. Geometry of projective Hilbert space. *Phys. Rev. A*, v. 46, n. 11, p. 7292–7294, 1992. ISSN 10502947.
- 31 PENROSE, R.; JORGENSEN. The road to reality a complete guide to the laws of the universe. Springer, 2006.
- 32 J. Anandan Aharonov Y. Geometric quantum phase and angles. *Phys. Rev. D*, v. 38, n. 6, p. 1863–1870, 1988.
- 33 HALDANE, F. D. M. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 61, p. 2015–2018, Oct 1988. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2015>>.

- 34 WIGNER, E. P. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions. *The Annals of Mathematics*, JSTOR, v. 62, n. 3, p. 548, nov 1955.
- 35 SCHNYDER, A. P. et al. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 78, p. 195125, Nov 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.195125>>.
- 36 KITAEV, A. Periodic table for topological insulators and superconductors. In: *AIP. AIP Conference Proceedings*. [S.l.], 2009. v. 1134, n. 1, p. 22–30.
- 37 SCHNYDER, A. P. et al. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. 2009.
- 38 ZHANG, H. et al. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single dirac cone on the surface. *Nature physics*, Nature Publishing Group, v. 5, n. 6, p. 438, 2009.
- 39 FERREIRA, G. J.; LOSS, D. Magnetically defined qubits on 3D topological insulators. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 111, n. 10, p. 106802, 2013.
- 40 ALONSO, V.; VINCENZO, S. D.; MONDINO, L. On the boundary conditions for the dirac equation. *European Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 18, n. 5, p. 315–320, sep 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0143-0807%2F18%2F5%2F001>>.
- 41 NIELSEN, H. B.; NINOMIYA, M. Absence of neutrinos on a lattice:(i). proof by homotopy theory. *Nuclear Physics B*, Elsevier, v. 185, n. 1, p. 20–40, 1981.
- 42 KOGUT, J.; SUSSKIND, L. Hamiltonian formulation of wilson's lattice gauge theories. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 11, p. 395–408, Jan 1975. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.11.395>>.
- 43 WILSON, K. G. Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 10, p. 2445–2459, Oct 1974. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.10.2445>>.
- 44 JANSSEN, O. et al. Phase diagram of dynamical twisted-mass wilson fermions at finite isospin chemical potential. *Physical Review D*, APS, v. 93, n. 9, p. 094502, 2016.
- 45 KAPLAN, D. E.; TAIT, T. M. New tools for fermion masses from extra dimensions. *Journal of High Energy Physics*, IOP Publishing, v. 2001, n. 11, p. 051, 2001.
- 46 KAPLAN, D. B.; SUN, S. Spacetime as a topological insulator: Mechanism for the origin of the fermion generations. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 108, p. 181807, May 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.181807>>.
- 47 ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Mathematical methods for physicists*. [S.l.]: AAPT, 1999.
- 48 BASH, E. CHIRAL SYMMETRY AND LATTICE GAUGE THEORY. v. 1, p. 1–18, 1994. ISSN 1098-6596.
- 49 BRUUS, H.; FLENSBERG, K. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction (Oxford Graduate Texts)*. Oxford University Press, 2004. ISBN 0198566336. Disponível em: <<https://www.amazon.com/Many-Body-Quantum-Theory-Condensed-Physics/dp/0198566336?SubscriptionId=0JYN1NVW651KCA56C102&tag=techkie-20&linkCode=xm2&camp=2025&creative=165953&creativeASIN=0198566336>>.

- 50 ODASHIMA, M. M.; PRADO, B. G.; VERNEK, E. Pedagogical introduction to equilibrium green's functions: condensed-matter examples with numerical implementations. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, SciELO Brasil, v. 39, n. 1, 2017.
- 51 LEE, P. A.; FISHER, D. S. Anderson localization in two dimensions. *Physical Review Letters*, APS, v. 47, n. 12, p. 882, 1981.
- 52 THOULESS, D.; KIRKPATRICK, S. Conductivity of the disordered linear chain. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 14, n. 3, p. 235, 1981.
- 53 GROTH, C. W. et al. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 16, n. 6, p. 063065, 2014.
- 54 DATTA, S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. [S.l.]: Cambridge university press, 1997.
- 55 WEISSE, A. et al. The kernel polynomial method. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 78, p. 275–306, Mar 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.275>>.
- 56 MCCONNELL, S. *Code Complete, Second Edition*. Redmond, WA, USA: Microsoft Press, 2009. ISBN 0735636974, 9780735636972.
- 57 PETERS, T. Pep 20—the zen of python. *Python Enhancement Proposal*, 2004.
- 58 NUMFOCUS. *Python NumPy*. 2017. <<http://www.numpy.org/>>. Accessed: 2017-06-06.
- 59 JONES, E. et al. *SciPy: Open source scientific tools for Python*. 2001. Accessed: 2017-06-06. Disponível em: <<http://www.scipy.org/>>.
- 60 WALT, S. v. d.; COLBERT, S. C.; VAROQUAUX, G. The numpy array: a structure for efficient numerical computation. *Computing in Science & Engineering*, IEEE, v. 13, n. 2, p. 22–30, 2011.
- 61 PUGET, J. F. *Python NumPy vs Python vs C*. 2017. <https://www.ibm.com/developerworks/community/blogs/jfp/entry/A_Comparison_Of_C_Julia_Python_Numba_Cython_Scipy_and_BLAS_on_LU_Factorization?lang=en>. Accessed: 2017-06-06.
- 62 PYTHON. *multiprocessing — Process-based parallelism*. 2017. <<https://docs.python.org/3.6/library/multiprocessing.html>>. Accessed: 2017-06-06.
- 63 TM, P. *Python GlobalInterpreterLock*. 2017. <<https://wiki.python.org/moin/GlobalInterpreterLock>>. Accessed: 2017-06-06.
- 64 PYTHON. *Python PYTHON THREADS AND THE GLOBAL INTERPRETER LOCK*. 2017. <<http://jessenoller.com/blog/2009/02/01/python-threads-and-the-global-interpreter-lock>>. Accessed: 2017-06-06.
- 65 XIANYI WANG QIAN, W. S. Z. *OpenBLAS*. 2017. <<http://www.openblas.net/>>. Accessed: 2017-06-06.
- 66 AGULLO PATRICK AMESTOY, M. B. A. B. P. C. M. D. A. F. A. G. G. J. J. K. J.-Y. L. S. P. C. P. F.-H. R. W. S.-L. T. S. B. U. E.; WEISBECKER, C. *MUMPS*. 2017. <<http://mumps.enseeiht.fr/>>. Accessed: 2017-06-06.

- 67 ZHOU, Y.-F. et al. Two-dimensional lattice model for the surface states of topological insulators. *Phys. Rev. B*, v. 95, p. 245137, 2017.
- 68 RESENDE, B. M. de et al. Confinement and fermion doubling problem in dirac-like hamiltonians. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 96, n. 16, oct 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.161113>>.
- 69 SHARMA, G.; GOSWAMI, P.; TEWARI, S. Chiral anomaly and longitudinal magnetotransport in type-ii weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 96, p. 045112, Jul 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.045112>>.
- 70 KLEIN, O. Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativistischen dynamik von dirac. *Zeitschrift fur Physik*, Springer Nature, v. 53, n. 3-4, p. 157–165, mar 1929. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01339716>>.
- 71 VOLOVIK, G. E. Topological lifshitz transitions. *Low Temperature Physics*, v. 43, n. 1, p. 47–55, 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.4974185>>.
- 72 AKHMEROV, A. R. *Dirac and Majorana edge states in graphene and topological superconductors*. [s.n.], 2011. ISSN 9085931010. ISBN 9789085931010. Disponível em: <<https://openaccess.leidenuniv.nl/handle/1887/17678>>.
- 73 OSTROVSKII, V. L.; SIL'VESTROV, S. D. Representations of real-valued forms of the graded analogue of a lie algebra. *Ukrainian Mathematical Journal*, v. 44, n. 11, p. 1395–1401, 1992.
- 74 ARIK, M.; KAYSERILIOGLU, U. The anticommutator spin algebra, its representations and quantum group invariance. *International Journal of Modern Physics A*, World Scientific, v. 18, n. 27, p. 5039–5045, 2003.
- 75 GENEST, V. X. et al. Supersymmetry of the quantum rotor. *arXiv preprint arXiv:1607.06967*, 2016.
- 76 BIE, H. D. et al. The bannai-ito algebra and some applications. In: IOP PUBLISHING. *Journal of Physics: Conference Series*. [S.l.], 2015. v. 597, n. 1, p. 012001.