



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

**Multicriticalidade e topologia em um fio  
quântico com interações spin-órbita e  
espacialmente modulado**

David de Sousa Brandão  
Orientadora: Mariana Malard Sales Andrade

Brasília  
2019

David de Sousa Brandão

**Multicriticalidade e topologia em um fio  
quântico com interações spin-órbita e  
espacialmente modulado**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação  
em Ciências de Materiais, da Universidade de Brasília,  
como requisito à obtenção do título de Mestre em Ciências  
de Materiais.

Orientadora: Mariana Malard Sales Andrade

Brasília  
2019

Ficha catalográfica elaborada automaticamente,  
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

SB821m Sousa Brandão, David  
Multicriticalidade e topologia em um o quântico com  
interações spin-órbita e espacialmente modulado / David  
Sousa Brandão; orientador Mariana Malard Sales Andrade. --  
Brasília, 2019.  
75 p.

Dissertação (Mestrado - Mestrado em Ciência de Materiais)  
-- Universidade de Brasília, 2019.

1. Transição não-trivial entre fases topológicas. 2.  
Winding number. 3. Fases topológicas com e sem gap. 4.  
Interação spin-órbita de Rashba e Dresselhaus. 5. Cargas  
topológicas. I. Malard Sales Andrade, Mariana , orient. II.  
Título.

*"pois nEle foram criadas todas as coisas,  
nos céus e na terra, as visíveis e as invisíveis,  
sejam tronos sejam soberanias, poderes ou autoridades;  
todas as coisas foram criadas por Ele e para Ele."  
Colossenses 1:16*

David de Sousa Brandão

**Multicriticalidade e topologia em um fio  
quântico com interações spin-órbita e  
espacialmente modulado**

A comissão examinadora, abaixo identificada, aprova o Trabalho de  
dissertação Mestrado do curso de Pós-Graduação Stricto Sensu em Ciências  
de Materiais da Universidade de Brasília-UnB

---

Prof.<sup>a</sup> Dra. Mariana Malard Sales Andrade  
Universidade de Brasília-UnB  
Orientadora

---

Prof. Dr. Luiz Antonio Ribeiro Junior  
Universidade de Brasília-UnB  
Membro Examinador

---

Prof. Dr. Amílcar Rabelo de Queiroz  
Universidade de Brasília-UnB  
Membro Examinador

---

Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito  
Universidade de Brasília-UnB  
Membro Suplente

# Resumo

Nesse trabalho será abordado novas propriedades topológicas achadas em um sistema de elétrons unidimensional com interação spin-órbita de Rashba e Dresselhaus e modulado periodicamente no espaço. O sistema descreve um modelo de oito bandas em aproximação de tight-binding ao qual está na classe de simetria CII da classificação de Altland-Zirnbauer. O diagrama de fase tridimensional do modelo possui fases com gap triviais e fases com gap não-triviais topológicas – distinguidas pelo Z-winding number usual da classe CII – separado por superfícies críticas sem gap, cuja classificação topológica também é obtida, mas usando um “winding number modificado” definido em volta dos pontos de fechamento de gap. O espectro sem gap mostra um par de bandas lineares cruzando a energia zero (nós) que se movem simetricamente na zona de Brillouin quando um parâmetro do modelo é variado sobre uma das superfícies críticas, semelhante aos cones de Weyl em três dimensões. Contudo, diferentemente do que acontece nos semi-metais de Weyl, aqui os nós carregam invariantes topológicos de sinais iguais que efetivamente funcionam como monopolos se repelindo, impedindo o aniquilamento desses nós. Finalmente, foi obtido resultados que mostram que o gap possui um perfil parabólico quando é realizado uma transição entre fases com gap com igual valor do winding number, sugerindo uma transição de segunda ordem conectando fases aparentemente iguais, esse poderia ser um novo tipo de transição quântica.

**Palavras-chaves:** Transição não-trivial entre fases topológicas; Winding number; Fases topológicas com e sem gap; Interação spin-órbita de Rashba e Dresselhaus; Cargas topológicas.

# Abstract

In this work I will report on new topological properties found in a one-dimensional electron system with Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions which are periodically modulated in space. The system is described by a eight-band tight-binding model which falls in symmetry class CII of the Altland-Zirnbauer classification. The three-dimensional phase diagram of the model consists of topologically nontrivial and trivial gapped phases - distinguished by the usual  $Z$ -winding number of class CII - separated by critical gapless surfaces whose topological characterizations is also obtained, but using a “modified winding number” defined around the gap closing points. The gapless spectrum sports a pair of linear band crossings at zero energy (nodes) that move symmetrically in the Brillouin zone as a model parameter is varied on a critical surface, similar to Weyl cones in three dimensions. However, differently from what happens in Weyl semi-metals, here the nodes carry topological invariants of equal signs which effectively work as repelling monopoles, preventing pairwise annihilation of the nodes. Finally, we have newly obtained results which show that the gap profile is parabolic around the transition point when going between gapped phases with equal winding numbers and equal ground-state symmetries, suggesting a second order transition connecting seemingly identical phases, this could be a novel type of quantum transition.

**Keywords:** Nontrivial transition between topological phases; Winding number; Topological phases with gap and gapless; Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions; topological charges

# Sumário

|          |                                                                         |           |
|----------|-------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Introdução</b>                                                       | <b>9</b>  |
| <b>2</b> | <b>Modelos Fundamentais</b>                                             | <b>12</b> |
| 2.1      | Estrutura de rede e aproximação de <i>tight-binding</i> . . . . .       | 12        |
| 2.2      | Modelo de <i>tight-binding</i> . . . . .                                | 13        |
| 2.2.1    | <i>Hopping</i> com spin conservado . . . . .                            | 13        |
| 2.2.2    | <i>Hopping</i> com inversão de spin . . . . .                           | 16        |
| 2.2.3    | Potencial de sítio com spin conservado . . . . .                        | 18        |
| 2.2.4    | Potencial de sítio com inversão de spin . . . . .                       | 19        |
| 2.2.5    | Matriz de Bloch . . . . .                                               | 20        |
| 2.3      | Exemplos: Modelo de duas e de quatro bandas . . . . .                   | 20        |
| 2.3.1    | Modelo de um sítios com spin . . . . .                                  | 21        |
| 2.3.2    | Modelo de dois sítios com spin . . . . .                                | 22        |
| <b>3</b> | <b>Simetrias discretas</b>                                              | <b>23</b> |
| 3.1      | Simetria quirial . . . . .                                              | 24        |
| 3.1.1    | Operadores projeção . . . . .                                           | 26        |
| 3.1.2    | Operador quirial . . . . .                                              | 27        |
| 3.1.3    | Hamiltoniano com simetria quirial . . . . .                             | 29        |
| 3.1.4    | Espectro de um Hamiltoniano com simetria quirial . . . . .              | 30        |
| 3.2      | Simetria de reversão temporal . . . . .                                 | 30        |
| 3.2.1    | Operador reversão temporal . . . . .                                    | 33        |
| 3.2.2    | Hamiltoniano com simetria de reversão temporal . . . . .                | 35        |
| 3.2.3    | Espectro de um Hamiltoniano com simetria de reversão temporal . . . . . | 35        |
| 3.3      | Simetria partícula-buraco . . . . .                                     | 36        |
| 3.3.1    | Operador partícula-buraco . . . . .                                     | 37        |
| 3.3.2    | Hamiltoniano com simetria partícula-buraco . . . . .                    | 39        |

|          |                                                                                                  |           |
|----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.3.3    | Espectro de um Hamiltoniano com simetria partícula-buraco . . . . .                              | 40        |
| 3.4      | Espectro de um Hamiltoniano com simetria quiral, reversão temporal e partícula-buraco . . . . .  | 40        |
| <b>4</b> | <b><i>Winding number</i></b>                                                                     | <b>43</b> |
| 4.1      | <i>Winding number</i> em uma dimensão . . . . .                                                  | 43        |
| 4.2      | <i>Winding number</i> em termos de pólos e zeros . . . . .                                       | 47        |
| 4.3      | <i>Winding number</i> em uma dimensão para sistemas sem gap . . . . .                            | 48        |
| <b>5</b> | <b>Fio quântico com interações spin-órbita e submetido a uma modulação espacial periódica</b>    | <b>52</b> |
| 5.1      | Interação spin-órbita . . . . .                                                                  | 53        |
| 5.2      | Modelo . . . . .                                                                                 | 55        |
| <b>6</b> | <b>Tratamento computacional</b>                                                                  | <b>59</b> |
| 6.1      | <i>Winding number</i> com gap . . . . .                                                          | 59        |
| 6.2      | Estrutura crítica . . . . .                                                                      | 63        |
| 6.3      | <i>Winding number</i> modificado . . . . .                                                       | 66        |
| 6.4      | Espectro . . . . .                                                                               | 69        |
| <b>7</b> | <b>Resultados</b>                                                                                | <b>70</b> |
| 7.1      | Diagrama de fases, espectros e cargas topológicas dos espectros nas transições de fase . . . . . | 70        |
| 7.2      | Transições de fases . . . . .                                                                    | 76        |
| <b>8</b> | <b>Conclusão</b>                                                                                 | <b>79</b> |
| <b>9</b> | <b>Referências</b>                                                                               | <b>81</b> |

# Capítulo 1

## Introdução

De acordo com a teoria de Ginzburg-Landau para transições de fase[1], fases da matéria são governadas por simetrias espaciais que podem ser caracterizadas por um parâmetro de ordem no sistema. O valor do parâmetro de ordem, definido como uma média sobre todo o sistema, indica a presença ou não da simetria. Por exemplo, a simetria de rotação dos momentos de dipolo magnético em um material distingue a fase ferromagnética, com magnetização finita, da fase paramagnética, com magnetização nula. Similarmente, quebrar uma simetria de translação contínua tornando-a discreta, com uma consequente queda abrupta na condutância, significa uma transição de fase metal-isolante em cristais. Em suma, uma transição de fase implica numa mudança de simetria espacial, acompanhada de uma resposta nítida do correspondente parâmetro de ordem.

Em 1980, uma nova fase da matéria que não podia ser explicada pelo paradigma de Ginzburg-Landau foi descoberta. Quando um campo magnético forte fora do plano e um campo elétrico no plano são aplicados a um gás de elétrons 2D, a condutância medida nas bordas é quantizada em uma precisão surpreendente, com cada platô de condutância é conectado a uma diferente fase da matéria. Contudo, estas as transições de fases não foram associadas a nenhuma mudança nas simetrias espaciais do sistema e não temos nenhum parâmetro de ordem que caracterize essas fases. Este é o famoso *efeito Hall quântico*[2][3][4]. Enquanto o interior da material é um isolante perfeito, suas bordas suportam um canal condutor balístico, um estado que pode ser caracterizado pelo invariante topológico *Chern Number*. O cálculo desse invariante topológico é análogo ao cálculo do fator *genus* na topologia da matemática, fator que calcula o número de buracos, nós, fibras, etc, de

um objeto matemático.

Na topologia da matemática, temos que se dois objetos possuem diferente números de buracos, eles são objetos topologicamente distintos. Já na teoria de bandas topológicas, se dois sistemas diferentes possuem o valor do invariante topológico diferente, eles estão em fases distintas. Uma propriedade dessas fases topológicas é a robustez, pois essas fases não mudam através de perturbações leves no Hamiltoniano do sistema. Além disso, temos que essas fases são caracterizadas pelos invariantes topológicos e as transições de fase são identificadas pelo fechamento do gap do espectro do sistema e, necessariamente, pela mudança no valor do invariante topológico. Desde o efeito Hall quântico, uma variedade de estados topológicos da matéria tem sido descoberta: isolantes, supercondutores e semi-metais, existe uma versão topológica para cada um deles[5][6][7]. Eles são caracterizados não por um parâmetro de ordem, mas por um invariante topológico cujo valor, definido em  $\mathcal{Z}$ , não pode mudar a menos que uma perturbação destrua as características que definem a fase inicial e induza uma transição de fase topológica.

Nesse trabalho estudaremos o sistema que consiste de um fio quântico submetido a um arranjo de eletrodos distribuídos periodicamente ao longo do fio. Serão consideradas as interações spin-órbita de Rashba e Dresselhaus presentes em muitos materiais cristalinos, particularmente em estruturas semicondutoras nas quais é possível realizar canais de condução unidimensionais (fios quânticos) através de campos externos.

O sistema será descrito na formulação de *tight-binding* que nos permite obter a matriz de Bloch do modelo. A análise das simetrias discretas obedecidas pela matriz de Bloch situa o modelo na classe de simetria CII da classificação de Altland-Zirnbauer[8] que, em uma dimensão espacial, é caracterizada pelo invariante topológico *Winding Number*.

Utilizando um método de diagonalização numérica da matriz de Bloch, obtivemos o espectro do modelo que, para nossa escolha de parâmetro, é composto por oito bandas de energia resolvidas para o spin dos elétrons.

O objetivo desse trabalho é explorar as fases topológicas de um sistema que se encontra na classe CII de sistemas topológicos, que até então foi pouco explorada em comparação à outras classes. Além disso, a partir de observações prévias foi notado que esse modelo poderia possuir propriedades topológicas interessantes, como por exemplo, a transição entre fases iguais, e essas propriedades motivaram o seu estudo.

Obtivemos também o diagrama de fases topológicas do sistema através do cálculo computacional do *Winding Number* no espaço de parâmetros do

modelo. O diagrama de fases é tridimensional e possui fases de isolante trivial e isolante topológico separadas por superfícies críticas onde o gap em torno da energia nula se fecha. O fechamento do gap se dá quando as bandas se cruzam formando degenerescências em torno das quais a dispersão é linear, similares a cones de Dirac no grafeno [9] ou de Weyl em cristais 3D [10]. No nosso caso, porém, as degenerescências possuem propriedades topológicas bastante peculiares que fazem com que as superfícies críticas do modelo constituam um novo tipo de semi-metal topológico.

Analisamos também as transições de fase e obtivemos que o gap se fecha seguindo um perfil linear para transições entre regiões de *winding number* diferentes. Já nas transições entre regiões com mesmo valor de *winding number*, o gap tem um comportamento parabólico, sugerindo uma transição de segunda ordem, porém sem uma quebra espontânea de simetria espacial e sem mudança no *winding number*. Esse tipo de fechamento de gap poderia ser explicado ou por uma simetria escondida do modelo que é quebrada na transição, ou se o modelo possui fases topológicas que estão além da classificação de Altland-Zirnbauer. Em qualquer caso, trata-se de um fenômeno potencialmente extremamente relevante e que, portanto, pretendemos investigar na sequência deste trabalho de mestrado.

# Capítulo 2

## Modelos Fundamentais

### 2.1 Estrutura de rede e aproximação de *tight-binding*

Nessa seção apresentamos o tipo de estrutura de rede que estudaremos nessa dissertação e discutiremos conceitualmente a abordagem teórica de *tight-binding* que usaremos para tratar o sistema.

Consideremos uma rede unidimensional com  $N$  células unitárias e  $r$  sítios em cada célula unitária. A rede é populada por elétrons de modo que cada sítio pode acomodar um estado de *spin up* e um de *spin down*. A rede possui então  $2r$  graus de liberdade internos, além dos  $N$  graus de liberdade referentes às posições das células unitárias. A Figura 2.1 ilustra a estrutura dessa cadeia.

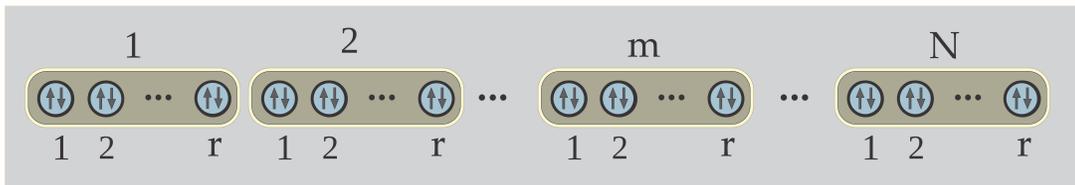


Figura 2.1: Rede cristalina com  $N$  células unitárias, possuindo cada uma delas  $r$  sítios, cada sítio podendo acomodar dois elétrons, um com spin up e outro com spin down.

Utilizaremos a aproximação de *tight-binding*[11] para descrever a estrutura de bandas de energia dos elétrons na rede da Figura 2.1.

Na aproximação de *tight-binding*, um dado elétron interage com o sítio da rede no qual se encontra e possui uma probabilidade de pular para o sítio vizinho.

A atração com o sítio da rede no qual o elétron se encontra é chamada de potencial de sítio e tem origem, principalmente, na atração coulombiana com o íon atômico localizado naquele sítio. Mas o potencial de sítio pode contar também com contribuições geradas por especificidades microscópicas do material ou por campos externos.

Em geral, a energia associada ao pulo entre sítios vizinhos, o chamado termo de *hopping*, vêm da energia cinética do elétron e da interação coulombiana com o sítio vizinho. Outra fonte de *hopping* são interações spin-órbita quando escritas na formulação de *tight-binding*.

## 2.2 Modelo de *tight-binding*

Nas seções subsequentes, trataremos matematicamente as interações de *hopping* e potencial de sítio em aproximação de *tight-binding*, levando em consideração em cada interação a possibilidade de conservação e troca de spin do elétron.

Para cada caso, será construída a matriz de Bloch do sistema. A diagonalização da matriz de Bloch produz as autoenergias em função do número de onda  $k$ , ou seja, a estrutura de bandas do sistema, bem como os correspondentes autoestados.

### 2.2.1 *Hopping* com spin conservado

Começaremos analisando um termo de *hopping*, do tipo *tight-binding*, descrevendo a probabilidade de o elétron pular entre sítios vizinhos mantendo a orientação do spin.

Na rede mostrada na Figura 2.1, este termo pode ser escrito da seguinte forma

$$H_{sc} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^{r-1} \sum_{\tau=\pm} \underbrace{(\alpha_n + \tau\tilde{\alpha}_n) c_m^{n,\tau\dagger} c_m^{n+1,\tau}}_{\text{hopping intra célula}} + \sum_{m=1}^N \sum_{\tau=\pm} \underbrace{(\alpha_r + \tau\tilde{\alpha}_r) c_m^{r,\tau\dagger} c_{m+1}^{1,\tau}}_{\text{hopping inter célula}} + H.c., \quad (2.1)$$

onde  $c_m^{n,\tau\dagger}$  ( $c_m^{n,\tau}$ ) é o operador criação (destruição) de um elétron no sítio  $n = 1, \dots, r$  da célula unitária  $m = 1, \dots, N$ , com spin  $\tau = \pm$ . Aqui é importante

salientar que os operadores atuam sobre estados de muitos corpos, conforme ditado pela formulação de *tight-binding*. Voltaremos a esse ponto adiante. A probabilidade de *hopping*, dada por  $\alpha_n + \tau\tilde{\alpha}_n$ , depende da posição  $n$  e do spin  $\tau$  do elétron. O Hamiltoniano é a soma do termo intra-celular, contendo *hoppings* entre os sítios vizinhos dentro da mesma célula unitária, e o termo inter-celular, contendo *hoppings* entre sítios vizinhos, porém em células unitárias adjacentes. A razão pela qual a energia de *hopping* é escrita como  $\alpha_n + \tau\tilde{\alpha}_n$  é que se a considerarmos dependente de  $\tau$  e expandirmos formalmente em série de Taylor neste termo, obtemos

$$\alpha_n(\tau) = \frac{\alpha_n(0)}{0!} + \frac{\alpha_n^{(1)}(0)}{1!}\tau + \frac{\alpha_n^{(2)}(0)}{2!}\tau^2 + \frac{\alpha_n^{(3)}(0)}{3!}\tau^3 + \dots$$

Porém,  $\tau = \pm 1$ , o que obrigatoriamente faz com que  $\tau^{2i} = 1$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots$ , deste modo, todos os termos com expoente par são constantes, podendo ser somados formando a constante  $\alpha_n$ , que depende somente de  $n$ . Para os termos com expoente ímpar, temos que  $\tau^{2i+1} = \tau^{2i}\tau = 1 \cdot \tau = \tau$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots$ , dessa forma podemos reunir todos esses termos em  $\tau\tilde{\alpha}_n$ . Assim, obtemos que  $\alpha_n(\tau) = \alpha_n + \tau\tilde{\alpha}_n$ .

Fazendo a transformada de Fourier

$$c_m^{n,\tau} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=-\pi}^{\pi} c_k^{n,\tau} e^{ikm} \quad (2.2)$$

$$k = k_j = \pm \frac{2\pi}{N}j, \quad j = 0, 1, \dots, N/2$$

segue que:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^N c_m^\dagger c_m &= \frac{1}{N} \sum_m \sum_{k,k'} c_k^\dagger e^{-ikm} c_{k'} e^{ik'm} = \\ &= \frac{1}{N} \sum_m \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'} e^{i(k'-k)m} = \\ &= \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'} \delta_{k',k} = \sum_k c_k^\dagger c_k \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde utilizamos no último passo a propriedade  $\frac{1}{N} \sum_m e^{ikm} = \delta_{k,0}$ . Segue

também que:

$$\begin{aligned}
\sum_m c_m^\dagger c_{m+1} &= \frac{1}{N} \sum_m \sum_{k,k'} c_k^\dagger e^{-ikm} c_{k'} e^{ik'(m+1)} = \\
&= \frac{1}{N} \sum_m \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'} e^{i(k'-k)m} e^{ik'} = \\
&= \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'} e^{ik'} \delta_{k',k} = \sum_k c_k^\dagger c_k e^{ik} \tag{2.4}
\end{aligned}$$

Substituindo (2.3) e (2.4) na Eq.(2.1) e explicitando os termos hermitianos conjugados, temos

$$\begin{aligned}
H_{sc} &= \sum_k \sum_{n,\tau} (\alpha_n + \tau \tilde{\alpha}_n) c_k^{n,\tau\dagger} c_k^{n+1,\tau} + (\alpha_n^* + \tau \tilde{\alpha}_n^*) c_k^{n+1,\tau\dagger} c_k^{n,\tau} + \\
&+ (\alpha_r + \tau \tilde{\alpha}_r) c_k^{r,\tau\dagger} c_k^{1,\tau} e^{ik} + (\alpha_r^* + \tau \tilde{\alpha}_r^*) c_k^{1,\tau\dagger} c_k^{r,\tau} e^{-ik}.
\end{aligned}$$

Reescrevendo a equação acima,

$$\begin{aligned}
H_{sc} &= \sum_k \sum_{n,\tau,n',\tau'} c_k^{n,\tau\dagger} [(\alpha_n + \tau \tilde{\alpha}_n) \delta_{n',n+1} \delta_{\tau',\tau} + (\alpha_{n'}^* + \tau \tilde{\alpha}_{n'}^*) \delta_{n',n-1} \delta_{\tau',\tau} + \\
&+ e^{ik} (\alpha_r + \tau \tilde{\alpha}_r) \delta_{n,r} \delta_{n',1} \delta_{\tau',\tau} + e^{-ik} (\alpha_r^* + \tau \tilde{\alpha}_r^*) \delta_{n,1} \delta_{n',r} \delta_{\tau',\tau}] c_k^{n',\tau'},
\end{aligned}$$

nos permite compactá-la na forma

$$H_{sc} = \sum_k \sum_{n,\tau,n',\tau'} c_k^{n,\tau\dagger} \mathcal{H}_{n\tau,n'\tau'}^{sc}(k) c_k^{n',\tau'},$$

onde

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{n\tau,n'\tau'}^{sc}(k) &\equiv (\alpha_n + \tau \tilde{\alpha}_n) \delta_{n',n+1} \delta_{\tau',\tau} + (\alpha_{n'}^* + \tau \tilde{\alpha}_{n'}^*) \delta_{n',n-1} \delta_{\tau',\tau} + \\
&+ e^{ik} (\alpha_r + \tau \tilde{\alpha}_r) \delta_{n,r} \delta_{n',1} \delta_{\tau',\tau} + e^{-ik} (\alpha_r^* + \tau \tilde{\alpha}_r^*) \delta_{n,1} \delta_{n',r} \delta_{\tau',\tau}. \tag{2.5}
\end{aligned}$$

Definindo *spinors* como sendo vetores cujas  $r$  primeiras (últimas) entradas são dadas pelos operadores com spin up (down), sendo os índices de sítio em cada setor do spinor distribuídos de forma crescente de 1 a  $r$ ,

$$c_k = \begin{bmatrix} c_k^{1+} \\ \vdots \\ c_k^{r+} \\ c_k^{1-} \\ \vdots \\ c_k^{r-} \end{bmatrix} \quad c_k^\dagger = (c_k^{1+\dagger} \dots c_k^{r+\dagger} c_k^{1-\dagger} \dots c_k^{r-\dagger}), \tag{2.6}$$

podemos reescrever o Hamiltoniano em forma matricial

$$H_{sc} = \sum_k c_k^\dagger \mathcal{H}_{sc}(k) c_k, \quad (2.7)$$

onde  $\mathcal{H}_{sc}(k)$  é a matriz  $2r \times 2r$  cujas entradas são dadas pela equação (2.5), ou seja:

$$\mathcal{H}_{sc}(k) = \begin{bmatrix} 0 & t_+^1 & 0 & \cdots & e^{-ik}t_+^{r*} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ t_+^{1*} & 0 & t_+^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & t_+^{2*} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{ik}t_+^r & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & t_-^1 & 0 & \cdots & e^{-ik}t_-^{r*} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & t_-^{1*} & 0 & t_-^2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & t_-^{2*} & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & e^{ik}t_-^r & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

onde  $t_\tau^n \equiv \alpha_n + \tau \tilde{\alpha}_n$ . A matriz  $\mathcal{H}_{sc}(k)$  dada na Eq. (2.8) é dita *matriz de Bloch* no espaço dos momentos  $k$  do Hamiltoniano dado pela Eq. (2.7).

A forma apresentada em (2.8) é devido a escolha dos spinores, pois eles foram escolhidos de modo que os primeiros  $r$  elementos possuem o spin up e os  $r$  restantes possuem spin down e, dessa forma,  $\mathcal{H}_{sc}(k)$ , que é a matriz de Bloch de um Hamiltoniano de *hopping* com spin conservado, possuirá elementos não nulos apenas nos blocos diagonais (de tamanho  $r \times r$ ) dentro dos quais os índices que percorrem as linhas e as colunas são iguais no spin.

### 2.2.2 *Hopping* com inversão de spin

Em seguida, vamos considerar um termo de *hopping* também de primeiros vizinhos, mas agora com inversão de spin. O Hamiltoniano correspondente fica:

$$H_{si} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^{r-1} \sum_{\tau=\pm} (\beta_n + \tau \tilde{\beta}_n) c_m^{n,-\tau \dagger} c_m^{n+1,\tau} + \sum_{m=1}^N \sum_{\tau=\pm} (\beta_r + \tau \tilde{\beta}_r) c_m^{r,-\tau \dagger} c_{m+1}^{1,\tau} + H.c. \quad (2.9)$$

Usando (2.2) e repetindo o procedimento anterior, obtemos:

$$H_{si} = \sum_k \sum_{n\tau, n'\tau'} c_k^{n,\tau\dagger} \mathcal{H}_{n,\tau, n',\tau'}^{si}(k) c_k^{n',\tau'},$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{n\tau, n'\tau'}^{si}(k) \equiv & (\beta_n + \tau\tilde{\beta}_n)\delta_{n', n+1}\delta_{\tau', -\tau} + (\beta_{n'}^* + \tau\tilde{\beta}_{n'}^*)\delta_{n', n-1}\delta_{\tau', -\tau} + \\ & + e^{ik}(\beta_r + \tau\tilde{\beta}_r)\delta_{n,r}\delta_{n',1}\delta_{\tau', -\tau} + e^{-ik}(\beta_r^* + \tau\tilde{\beta}_r^*)\delta_{n,1}\delta_{n',r}\delta_{\tau', -\tau}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Usando a representação de spinores da Eq.(2.6), temos que

$$H_{si} = \sum_k c_k^\dagger \mathcal{H}_{si}(k) c_k, \quad (2.11)$$

onde  $\mathcal{H}_{si}(k)$  é a matriz de Bloch  $2r \times 2r$  para o Hamiltoniano com inversão do spin (2.11), cujas entradas são dadas pela Eq.(2.10). Escrevendo na forma matricial, obtemos

$$\mathcal{H}_{si}(k) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & v_+^1 & 0 & \cdots & e^{-ik}v_+^{r*} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & v_+^{1*} & 0 & v_+^2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & v_+^{2*} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & e^{ik}v_+^r & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & v_-^1 & 0 & \cdots & e^{-ik}v_-^{r*} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ v_-^{1*} & 0 & v_-^2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & v_-^{2*} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{ik}v_-^r & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.12)$$

onde  $v_\tau^n \equiv \beta_n + \tau\tilde{\beta}_n$ .

Levando em consideração a disposição dos elementos nos spinores, por  $\mathcal{H}_{sc}(k)$  ser a matriz de Bloch de um Hamiltoniano de *hopping* com inversão de spin, ela possuirá elementos não nulos apenas nos blocos anti-diagonais (de tamanho  $r \times r$ ), dentro dos quais os índices de spin ao longo da linha e da coluna são diferentes.

### 2.2.3 Potencial de sítio com spin conservado

Começaremos por considerar o caso de um potencial de sítio com spin conservado que pode ser escrito da seguinte forma:

$$V_{sc} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^r \sum_{\tau=\pm} (\mu_n + \tau \tilde{\mu}_n) c_m^{n,\tau \dagger} c_m^{n,\tau}, \quad (2.13)$$

onde a soma do termo Hermiteano conjugado já foi efetuada, implicando que  $\mu_n$  e  $\tilde{\mu}_n$  são números reais. Aplicando a transformada de Fourier, Eq.(2.2), obtemos

$$\begin{aligned} V_{sc} &= \sum_k \sum_{n,\tau} (\mu_n + \tau \tilde{\mu}_n) c_k^{n,\tau \dagger} c_k^{n,\tau} \\ V_{sc} &= \sum_k \sum_{n,\tau,n',\tau'} c_k^{n,\tau \dagger} \mathcal{V}_{n\tau,n'\tau'}^{sc} c_k^{n',\tau'}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde

$$\mathcal{V}_{n\tau,n'\tau'}^{sc}(k) = (\mu_n + \tau \tilde{\mu}_n) \delta_{n',n} \delta_{\tau',\tau}. \quad (2.15)$$

Escrevendo (2.14) em termos dos spinores dados na Eq. (2.6) e da respectiva matriz de Bloch  $2r \times 2r$  cujas entradas são dadas pela Eq.(2.15),

$$V_{sc} = \sum_k c_k^\dagger \mathcal{V}_{sc}(k) c_k. \quad (2.16)$$

A matriz de Bloch  $\mathcal{V}_{sc}(k)$  é simplesmente

$$\mathcal{V}_{sc}(k) = \begin{bmatrix} u_+^1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & u_+^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & u_+^3 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_+^r & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & u_-^1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & u_-^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & u_-^3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & u_-^r \end{bmatrix}. \quad (2.17)$$

onde  $u_\tau^n \equiv \mu_n + \tau \tilde{\mu}_n$ . A matrix de Bloch possui elementos não nulos apenas ao longo da diagonal principal por consequência do potencial ser *on-site* com conservação do spin.

## 2.2.4 Potencial de sítio com inversão de spin

Neste caso consideremos o potencial de sítio, mas com inversão do spin do elétron. Esse é dado por:

$$V_{si} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^r \sum_{\tau=\pm} (\nu_n + \tau\tilde{\nu}_n) c_m^{n,-\tau\dagger} c_m^{n,\tau} \quad (2.18)$$

Usando a transformada de Fourier, Eq.(2.2), obtemos

$$\begin{aligned} V_{si} &= \sum_k \sum_{n,\tau} (\nu_n + \tau\tilde{\nu}_n) c_k^{n,-\tau\dagger} c_k^{n,\tau} \\ V_{si} &= \sum_k \sum_{n,\tau,n',\tau'} c_k^{n,\tau\dagger} \mathcal{V}_{n\tau,n'\tau'}^{si}(k) c_k^{n',\tau'}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde

$$\mathcal{V}_{n\tau,n'\tau'}^{si}(k) = (\nu_n + \tau\tilde{\nu}_n) \delta_{n',n} \delta_{\tau',-\tau}. \quad (2.20)$$

Escrevendo (2.18) na base dos spinores dados pela Eq.(2.6) e sua respectiva matriz de Bloch  $2r \times 2r$  cujas entradas são dadas pela Eq.(2.20), temos que

$$V_{si} = \sum_k c_k^\dagger \mathcal{V}_{si}(k) c_k, \quad (2.21)$$

tal que,

$$\mathcal{V}_{si}(k) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & w_+^1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & w_+^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & w_+^3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & w_+^r \\ w_-^1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_-^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & w_-^3 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & w_-^r & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

onde  $w_\tau^n \equiv \nu_n + \tau\tilde{\nu}_n$ . A matrix de Bloch possui elementos não nulos apenas ao longo da diagonal dos blocos anti-diagonais por consequência do potencial ser *on-site* com inversão de spin.

## 2.2.5 Matriz de Bloch

A matriz de Bloch total é a soma das matrizes de Bloch de todos os termos vistos até agora,

$$\mathcal{H}(k) = \mathcal{H}_{sc}(k) + \mathcal{H}_{si}(k) + \mathcal{V}_{sc}(k) + \mathcal{V}_{si}(k). \quad (2.23)$$

Considerando a representação de spinores da Eq. (2.6), somamos então as matrizes (2.8), (2.12), (2.17) e (2.22) e obtemos

$$\mathcal{H}(k) = \begin{bmatrix} u_+^1 & t_+^1 & 0 & \cdots & e^{-ik}t_+^{r*} & w_+^1 & v_+^1 & 0 & \cdots & e^{-ik}v_+^{r*} \\ t_+^{1*} & u_+^2 & t_+^2 & \cdots & 0 & v_+^{1*} & w_+^2 & v_+^2 & \cdots & 0 \\ 0 & t_+^{2*} & u_+^3 & \cdots & 0 & 0 & v_+^{2*} & w_+^3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{ik}t_+^r & 0 & 0 & \cdots & u_+^r & e^{ik}v_+^r & 0 & 0 & \cdots & w_+^r \\ w_-^1 & v_-^1 & 0 & \cdots & e^{-ik}v_-^{r*} & u_-^1 & t_-^1 & 0 & \cdots & e^{-ik}t_-^{r*} \\ v_-^{1*} & w_-^2 & v_-^2 & \cdots & 0 & t_-^{1*} & u_-^2 & t_-^2 & \cdots & 0 \\ 0 & v_-^{2*} & w_-^3 & \cdots & 0 & 0 & t_-^{2*} & u_-^3 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{ik}v_-^r & 0 & 0 & \cdots & w_-^r & e^{ik}t_-^r & 0 & 0 & \cdots & u_-^r \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

para a matriz de Bloch que representa uma cadeia com  $N$  células unitárias e  $r$  sítios em cada célula, populada com férmions de spin 1/2 (elétrons) com interações de *hopping* de primeiros vizinhos, para os casos em que o spin se conserva e inverte, e com potencial de sítio, para os casos que o spin se conserva e inverte.

Na seção seguinte veremos, a título de exemplo, as duas realizações mais simples do modelo anterior, quando a célula unitária possui apenas um sítio e quando possui dois sítios.

## 2.3 Exemplos: Modelo de duas e de quatro bandas

Aqui iremos obter a estrutura de bandas da matriz (2.24) para redes com  $r = 1, 2$  sítios por célula unitária. Quando  $r = 1(2)$ , a matriz é  $2 \times 2(4 \times 4)$  e o espectro do sistema é caracterizado por duas (quatro) bandas de energia.

### 2.3.1 Modelo de um sítios com spin

A matriz de Bloch da cadeia com um sítio por célula unitária e com spin pode ser obtida fazendo  $r = 1$  na equação geral (2.24). Note que, neste caso, cada bloco  $r \times r$  se torna um único número que contém tanto o potencial de sítio constante quanto os termos de *hopping* proporcionais a  $e^{\pm ik}$  (os quais, no bloco  $r \times r$ , ficam nas pontas). Temos então:

$$\mathcal{H}_{1ss}(k) = 2 \begin{bmatrix} u_+^1 + \text{Re}[t_+^1 e^{ik}] & w_+^1 + \text{Re}[v_+^1 e^{ik}] \\ w_-^1 + \text{Re}[v_-^1 e^{ik}] & u_-^1 + \text{Re}[t_-^1 e^{ik}] \end{bmatrix}$$

Diagonalizando a matriz de Bloch (utilizando o método numérico que será descrito no capítulo 6) para uma dada escolha de parâmetros, obtemos a estrutura de bandas mostrada na Figura 2.2.

$$\begin{aligned} \alpha_+ = 1.0, \tilde{\alpha}_+ = 0.0, \alpha_- = 2.0, \tilde{\alpha}_- = 0.0, \beta_+ = 0.5, \tilde{\beta}_+ = 0.2, \beta_- = 1.3, \tilde{\beta}_- = 0.5, \\ \gamma_+ = 1.5, \tilde{\gamma}_+ = 0.0, \gamma_- = 0.0, \tilde{\gamma}_- = 0.0, \delta_+ = 1.0, \tilde{\delta}_+ = 0.4, \delta_- = 3.0, \tilde{\delta}_- = 2.5 \end{aligned}$$

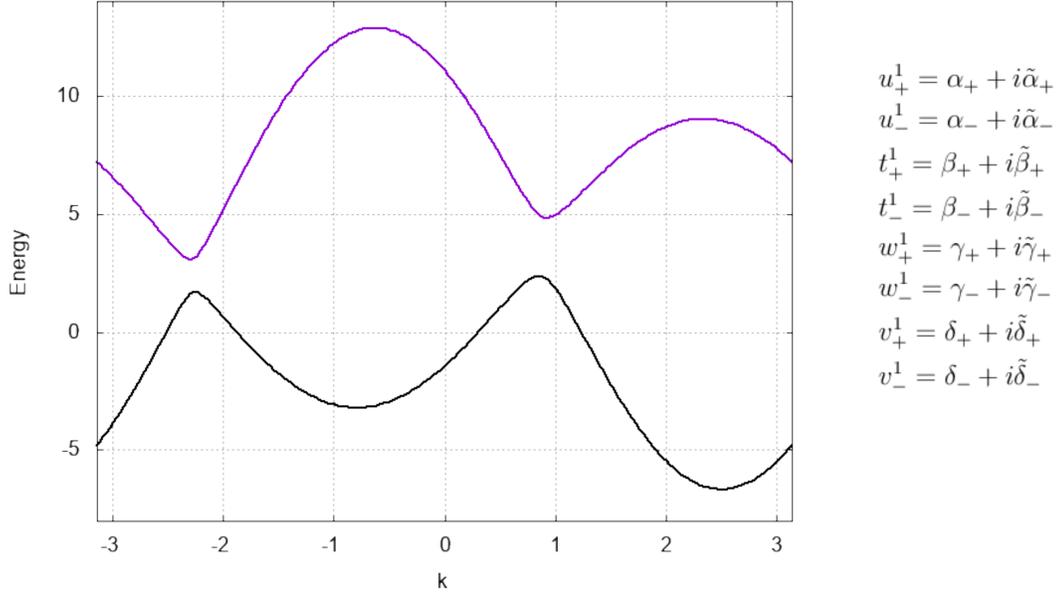


Figura 2.2: Estrutura de bandas do modelo de 1 sítio com spin para os parâmetros mostrados acima. O modelo possui 2 graus de liberdade por isso o espectro mostra 2 bandas, sendo que uma das bandas corresponde ao elétron no sítio 1 com spin up e a outra para o sítio 1 com spin down.

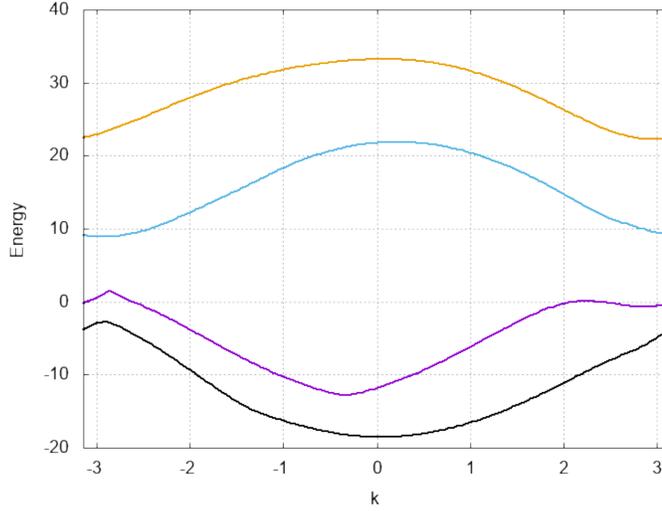
### 2.3.2 Modelo de dois sítios com spin

Tomando  $r = 2$  na equação geral (2.24) obtemos para a matriz de Bloch da cadeia com dois sítios por célula unitária e com spin:

$$\mathcal{H}_{2ss}(k) = \begin{bmatrix} u_+^1 & t_+^1 + t_+^{2*}e^{-ik} & w_+^1 & v_+^1 + v_+^{2*}e^{-ik} \\ t_+^{1*} + t_+^2e^{ik} & u_+^2 & v_+^{1*} + v_+^2e^{ik} & w_+^2 \\ w_-^1 & v_-^1 + v_-^{2*}e^{-ik} & u_-^1 & t_-^1 + t_-^{2*}e^{-ik} \\ v_-^{1*} + v_-^2e^{ik} & w_-^2 & t_-^{1*} + t_-^2e^{ik} & u_-^2 \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

Diagonalizando essa matriz utilizando o mesmo método anterior, obtemos a estrutura de bandas do modelo mostrada na Figura 2.3.

$$\begin{aligned} \alpha_+^1 &= 1.0, \tilde{\alpha}_+^1 = 3.0, \alpha_-^1 = 2.0, \tilde{\alpha}_-^1 = 4.0, \beta_+^1 = 0.0, \tilde{\beta}_+^1 = 2.0, \beta_-^1 = 1.0, \tilde{\beta}_-^1 = 3.0, \\ \gamma_+^1 &= 1.0, \tilde{\gamma}_+^1 = 2.0, \gamma_-^1 = 3.0, \tilde{\gamma}_-^1 = 4.0, \delta_+^1 = 5.0, \tilde{\delta}_+^1 = 6.0, \delta_-^1 = 7.0, \tilde{\delta}_-^1 = 8.0 \\ \alpha_+^2 &= 5.0, \tilde{\alpha}_+^2 = 7.0, \alpha_-^2 = 9.0, \tilde{\alpha}_-^2 = 2.0, \beta_+^2 = 4.0, \tilde{\beta}_+^2 = 6.0, \beta_-^2 = 8.0, \tilde{\beta}_-^2 = 0.0, \\ \gamma_+^2 &= -1.0, \tilde{\gamma}_+^2 = 2.0, \gamma_-^2 = -3.0, \tilde{\gamma}_-^2 = 4.0, \delta_+^2 = -5.0, \tilde{\delta}_+^2 = 6.0, \delta_-^2 = -7.0, \tilde{\delta}_-^2 = 8.0 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} u_+^1 &= \alpha_+^1 + i\tilde{\alpha}_+^1 \\ u_-^1 &= \alpha_-^1 + i\tilde{\alpha}_-^1 \\ t_+^1 &= \beta_+^1 + i\tilde{\beta}_+^1 \\ t_-^1 &= \beta_-^1 + i\tilde{\beta}_-^1 \\ w_+^1 &= \gamma_+^1 + i\tilde{\gamma}_+^1 \\ w_-^1 &= \gamma_-^1 + i\tilde{\gamma}_-^1 \\ v_+^1 &= \delta_+^1 + i\tilde{\delta}_+^1 \\ v_-^1 &= \delta_-^1 + i\tilde{\delta}_-^1 \\ u_+^2 &= \alpha_+^2 + i\tilde{\alpha}_+^2 \\ u_-^2 &= \alpha_-^2 + i\tilde{\alpha}_-^2 \\ t_+^2 &= \beta_+^2 + i\tilde{\beta}_+^2 \\ t_-^2 &= \beta_-^2 + i\tilde{\beta}_-^2 \\ w_+^2 &= \gamma_+^2 + i\tilde{\gamma}_+^2 \\ w_-^2 &= \gamma_-^2 + i\tilde{\gamma}_-^2 \\ v_+^2 &= \delta_+^2 + i\tilde{\delta}_+^2 \\ v_-^2 &= \delta_-^2 + i\tilde{\delta}_-^2 \end{aligned}$$

Figura 2.3: Estrutura de bandas do modelo de 2 sítios com spin para os parâmetros mostrados acima. O modelo possui 4 graus de liberdade por isso o espectro mostra 4 bandas. As duas bandas de cima correspondem a uma dada orientação de spin e as duas bandas de baixo correspondem à orientação oposta.

# Capítulo 3

## Simetrias discretas

A natureza é surpreendentemente organizada através de simetrias. Em particular, simetrias são de muita importância no tratamento de sistemas quânticos. As simetrias que serão apresentadas neste capítulo são: quiral, reversão temporal e partícula-buraco, simetrias discretas que têm uma grande influência na estrutura da matriz de Bloch e, conseqüentemente, nas estruturas de bandas. Além disso, as propriedades topológicas de um sistema dependem fortemente dessas simetrias.

Em Mecânica Quântica, um sistema de muitos corpos, representado pelo Hamiltoniano  $H$ , é descrito através de operadores criação e destruição que estão no espaço de Fock, enquanto um sistema de partícula única, representado pelo Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , é descrito através de bras e kets no espaço de Hilbert. Uma propriedade fundamental que iremos utilizar aqui é que para sistemas de muitas partículas indistinguíveis e não interagentes o Hamiltoniano de muitos corpos pode ser escrito como a soma dos Hamiltonianos de partícula única para todas as  $N_p$  partículas do sistema, desse modo,

$$H = \sum_{n=1}^{N_p} \mathcal{H}_n.$$

Da teoria de segunda quantização temos que a matriz de Bloch de um Hamiltoniano de muitas partículas não-interagentes é a mesma de partícula única,

ou seja

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{k,i,j} c_{k,i}^\dagger \mathcal{H}_{i,j}(k) c_{k,j} \\
\mathcal{H} &= \sum_{k,i,j} |k,i\rangle \mathcal{H}_{i,j}(k) \langle k,j|,
\end{aligned} \tag{3.1}$$

onde  $\mathcal{H}_{i,j}(k)$  são as entradas da matriz de Bloch e  $|k,i\rangle(\langle k,i|)$  o ket(bra) de partícula única no estado identificado pelos números quânticos  $k$  e  $i$ .

Dizer que um sistema de muitos corpos é invariante com relação às simetrias de interesse nesse capítulo é dizer que  $H$  satisfaz as seguintes relações de comutação,

$$[H, S] = 0, \quad [H, T] = 0, \quad [H, C] = 0$$

onde  $S, T$  e  $C$  são os operadores de simetria quiral, reversão temporal e partícula-buraco respectivamente.

A seguir veremos como essas relações de comutação são escritas em termos do hamiltoniano de partícula única  $\mathcal{H}$ , as correspondentes relações de invariância para a matriz de Bloch e as consequências sobre o espectro da mesma.

### 3.1 Simetria quiral

Um sistema possui simetria quiral se ele pode ser dividido em dois subsistemas de mesmo tamanho que não possuam interação entre quaisquer dois pontos no mesmo subsistema.

A simetria quiral pode ser representada através de operadores projeção

$$P^{A/B} \equiv \sum_k \sum_{i \in A/B} |k,i\rangle \langle k,i| \tag{3.2}$$

onde  $|k,i\rangle(\langle k,i|)$  é o estado ket (bra) de uma única partícula com momento  $k$  no ponto  $i$  do subsistema  $A/B$ ,  $i = 1, 2, \dots, 2r$ . Podemos definir spinores de dimensão  $2r$

$$\langle k| = \begin{bmatrix} \vdots \\ \langle k,i| \\ \vdots \\ \langle k,j| \\ \vdots \end{bmatrix} \quad |k\rangle = (\cdots |k,i\rangle \cdots |k,j\rangle \cdots). \tag{3.3}$$

com  $i \in A$  e  $j \in B$ . Assim a equação (3.2) pode ser escrita como

$$P^{A/B} = \sum_k |k\rangle \mathcal{P}^{A/B} \langle k|, \quad (3.4)$$

onde as entradas da matriz  $\mathcal{P}^{A/B}$  são dadas por:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} |k,i\rangle \mathcal{P}_{ij}^{A/B} \langle k,j| &= \sum_{i \in A/B} |k,i\rangle \langle k,i| \\ \mathcal{P}_{ij}^{A/B} &= \begin{cases} \delta_{ij}, & \text{se } i \in A/B \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Assim sendo, as matrizes  $2r \times 2r$   $\mathcal{P}^A$  e  $\mathcal{P}^B$  podem ser vistas como

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^A &= \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes 1_{r \times r} = \frac{1}{2}(1_{2 \times 2} + \sigma_z) \otimes 1_{r \times r} \\ \mathcal{P}^B &= \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes 1_{r \times r} = \frac{1}{2}(1_{2 \times 2} - \sigma_z) \otimes 1_{r \times r} \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde  $\otimes$  é o produto tensorial entre matrizes,  $1_{r \times r}$  é a matrix identidade  $r \times r$  e  $\sigma_z$  é a terceira matriz de Pauli.

É comum descrever a transformação quiral em termos do **operador quiral**.

$$S = P^A - P^B. \quad (3.7)$$

Aplicando os spinores bipartidos (3.3) e depois (3.4),  $S$  torna-se

$$\begin{aligned} S &= \sum_k |k\rangle \mathcal{S} \langle k| \\ \mathcal{S} &= P^A - P^B = \sigma_z \otimes 1_{r \times r} \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde temos que usar (3.6) para escrever a última equação.

Até aqui apresentamos o operador quiral de forma genérica, com o sistema bipartido em termos de dois subsistemas A e B, sem especificarmos como A e B foram formados. Na prática, ao analisarmos um dado sistema, precisamos especificar o critério de partição a fim de determinar se o sistema tem ou não aquela simetria quiral.

Aqui, estamos interessados em uma cadeia com  $2r$  graus de liberdade internos, sendo  $r$  o número de sítios na célula unitária e 2 graus de spin. Vamos particionar a cadeia em termos de sítios pares (subsistema A) e ímpares (subsistema B) e definir o operador quiral em termos dessa partição específica. Nesse caso, os spinores genéricos (3.3) tomam a forma:

$$|k\rangle = \underbrace{[|k, 1+\rangle |k, 1-\rangle \cdots |k, r-1-\rangle]}_{\text{sítio ímpar}} \underbrace{[|k, 2+\rangle |k, 2-\rangle \cdots |k, r-\rangle]}_{\text{sítio par}} \quad \langle k| = \begin{bmatrix} \langle k, 1+| \\ \langle k, 1-| \\ \vdots \\ \langle k, r-1-| \\ \langle k, 2+| \\ \langle k, 2-| \\ \vdots \\ \langle k, r-| \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

Considerando essa partição, um modelo que contenha apenas *hopping* de primeiros vizinhos (ou seja, sem potencial de sítio ou *hoppings* de maior alcance) terá simetria quiral pois não há conexões dentro de cada subsistema.

### 3.1.1 Operadores projeção

As propriedades abaixo seguem diretamente da definição (3.2):

#### 1) Resolução da identidade

$$P^A + P^B = \sum_k \sum_i |k, i\rangle \langle k, i| \quad (3.10)$$

$$P^A + P^B = I$$

onde  $I$  é o operador identidade.

## 2) Hermiticidade

$$\begin{aligned}
 P^{A/B\dagger} &= \sum_k \sum_{i \in A/B} |k, i\rangle \langle k, i| \\
 P^{A/B\dagger} &= P^{A/B}
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

## 3) Idempotência

$$\begin{aligned}
 P^{A/B^2} &= \sum_{kk'} \sum_{i' \in A/B} |k, i\rangle \underbrace{\langle k, i | k', i' \rangle}_{\delta_{ii'} \delta_{kk'}} \langle k', i'| = \sum_k \sum_{i \in A/B} |k, i\rangle \langle k, i| \\
 P^{A/B^2} &= P^{A/B}
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

## 4) Ortogonalidade de $P^A$ e $P^B$

$$\begin{aligned}
 P^A P^B &= \sum_{kk'} \sum_{i \in A, i' \in B} |k, i\rangle \underbrace{\langle k, i | k', i' \rangle}_{\delta_{ii'} \delta_{kk'} = 0} \langle k', i'| = 0 = P^B P^A, \quad \text{para } i \in A \neq i' \in B \\
 P^A P^B &= P^B P^A = 0
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Com propriedades idênticas para as matrizes  $\mathcal{P}^A$  e  $\mathcal{P}^B$ .

### 3.1.2 Operador quiral

#### 1) Hermiticidade

Usando (3.7) e (3.11)

$$\begin{aligned}
 S^\dagger &= P^{A\dagger} - P^{B\dagger} = P^A - P^B \\
 S^\dagger &= S
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

#### 2) Quadrado

Usando as equações (3.7), (3.10), (3.12) e (3.13)

$$\begin{aligned}
 S^2 &= P^{A^2} + P^{B^2} - P^A P^B - P^B P^A = P^A + P^B = I \\
 S^2 &= I
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

### 3) Inverso

Usando (3.15)

$$S^2 = SS = I = SS^{-1} \rightarrow S^{-1} = S \quad (3.16)$$

### 4) Unitariedade

Usando (3.16) e (3.14)

$$S^{-1} = S = S^\dagger \rightarrow S^{-1} = S^\dagger \quad (3.17)$$

com propriedades idênticas para a matriz  $\mathcal{S}$ .

Suponhamos um Hamiltoniano de uma única partícula escrito na base mostrada em (3.3),

$$\mathcal{H} = \sum_k |k\rangle \mathcal{H}(k) \langle k| \quad (3.18)$$

usando (3.4) e (3.18)

$$\begin{aligned} P^{A/B} \mathcal{H} P^{A/B} &= \sum_{k,k',k''} |k\rangle \mathcal{P}^{A/B} \langle k|k'\rangle \mathcal{H}(k) \langle k'|k''\rangle \mathcal{P}^{A/B} \langle k''| \\ P^{A/B} \mathcal{H} P^{A/B} &= \sum_k |k\rangle \mathcal{P}^{A/B} \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^{A/B} \langle k| \end{aligned} \quad (3.19)$$

usando (3.5)

$$\begin{aligned} [\mathcal{P}^{A/B} \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^{A/B}]_{ij} &= \sum_l [\mathcal{P}^{A/B} \mathcal{H}(k)]_{il} \mathcal{P}_{lj}^{A/B} = \\ &= \begin{cases} [\mathcal{P}^{A/B} \mathcal{H}(k)]_{ij} = \sum_l \mathcal{P}_{il}^{A/B} \mathcal{H}_{lj}(k), & \text{se } j \in A/B \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \\ &= \begin{cases} \mathcal{H}(k)_{ij}, & \text{se } i \in A/B \text{ } j \in A/B \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.20)$$

Sendo assim, para uma matriz  $\mathcal{H}(k)$  genérica

$$\mathcal{H}(k) = \mathcal{P}^A \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^A + \mathcal{P}^B \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^B + \mathcal{P}^A \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^B + \mathcal{P}^B \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^A. \quad (3.21)$$

Aplicando (3.8) podemos calcular a ação de  $\mathcal{S}$  sobre uma matriz genérica  $\mathcal{H}(k)$ .

$$\mathcal{S} \mathcal{H}(k) \mathcal{S} = \mathcal{P}^A \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^A + \mathcal{P}^B \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^B - \mathcal{P}^A \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^B - \mathcal{P}^B \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^A \quad (3.22)$$

### 3.1.3 Hamiltoniano com simetria quiral

Se o Hamiltoniano tem simetria quiral, isso significa que não existem conexões dentro dos subsistemas

$$\mathcal{H}_{ij}(k) = 0, \quad (3.23)$$

se  $i, j \in A$  ou se  $i, j \in B$ . Substituindo a Eq. (3.23) na Eq. (3.20), obtemos então que

$$\mathcal{P}^A \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^A = \mathcal{P}^B \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^B = 0 \quad (3.24)$$

Dessa forma, (3.21) se reduz, na presença de simetria quiral, à

$$\mathcal{H}(k) = \mathcal{P}^A \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^B + \mathcal{P}^B \mathcal{H}(k) \mathcal{P}^A. \quad (3.25)$$

Substituindo as Eqs. (3.24) e (3.25) na Eq. (3.22), temos então a ação de  $\mathcal{S}$  sobre uma  $\mathcal{H}(k)$  com simetria quiral:

$$\mathcal{S} \mathcal{H}(k) \mathcal{S} = -\mathcal{H}(k). \quad (3.26)$$

É comum usar (3.14) ou (3.16) (escrito para matriz) e reescrever (3.26) como

$$\begin{aligned} \mathcal{S} \mathcal{H}(k) \mathcal{S}^\dagger &= -\mathcal{H}(k) \\ \mathcal{S} \mathcal{H}(k) \mathcal{S}^{-1} &= -\mathcal{H}(k). \end{aligned}$$

A última expressão pode ainda ser reexpressa como

$$\begin{aligned} \mathcal{S} \mathcal{H}(k) &= -\mathcal{H}(k) \mathcal{S} \\ \{\mathcal{S}, \mathcal{H}(k)\} &= 0. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Utilizando (3.26), (3.18) e (3.8), temos que

$$\begin{aligned} \mathcal{S} \mathcal{H} \mathcal{S} &= \sum_{k, k', k''} |k\rangle \mathcal{S} \langle k|k'\rangle \mathcal{H}(k') \langle k'|k''\rangle \mathcal{S} \langle k''| = \\ &= \sum_k |k\rangle \mathcal{S} \mathcal{H}(k) \mathcal{S} \langle k| = -\sum_k |k\rangle \mathcal{H}(k) \langle k| = -\mathcal{H}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

que, a partir da propriedade (3.16), leva a

$$\{S, \mathcal{H}\} = 0. \quad (3.29)$$

A partir da eq. (3.29) é possível verificar que o Hamiltoniano de muitos corpos  $H$  da Eq. (3.1) de fato obedece  $[H, S] = 0$ , isto é, comuta com o operador quiral quando o sistema possui esta simetria.

### 3.1.4 Espectro de um Hamiltoniano com simetria quiral

O espectro de um Hamiltoniano com simetria quiral é simétrico em torno da energia igual a zero. Isso se dá pelo fato de que se existe um autoestado com energia  $E$  existe um autoestado com energia  $-E$ . Utilizando (3.29) tiramos que:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} |\psi_n\rangle &= E_n |\psi_n\rangle \\ \mathcal{H} S |\psi_n\rangle &= -S \mathcal{H} |\psi_n\rangle = \\ &= -S E_n |\psi_n\rangle = -E_n S |\psi_n\rangle, \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde  $|\psi_n\rangle$  é um autoestado genérico do Hamiltoniano. Ou seja, para cada estado  $|\psi_n\rangle$  com energia  $E_n$  existe um estado  $S |\psi_n\rangle$  com energia  $-E_n$ .

## 3.2 Simetria de reversão temporal

A simetria de reversão temporal é descrita em termos do operador reversão temporal

$$T = UK \quad (3.31)$$

onde  $U$  é um operador unitário e  $K$  é a operação complexo conjugada, que toma o complexo conjugado de um número sobre o qual esteja atuando. É possível mostrar que se um hamiltoniano de muitos corpos  $H$  possui simetria de reversão temporal, isto é, se  $[T, H] = 0$ , então o hamiltoniano de uma partícula  $\mathcal{H}$  também obedece:

$$[T, \mathcal{H}] = 0. \quad (3.32)$$

Algumas das propriedades mais importantes do operador de reversão temporal estão relacionadas a ação dele em alguns operadores. Quando aplicamos

esta operação sobre o sistema, os sinais dos autovalores de observáveis de alguns operadores são invertidos (tais operadores são chamados de operadores ímpares). Dois exemplos muito importantes de operadores ímpares são o operador de momento e o de spin. Assim sendo,

$$\begin{aligned} T\mathbf{p}T^{-1} &= -\mathbf{p} \\ T\sigma T^{-1} &= -\sigma, \end{aligned} \quad (3.33)$$

que nos diz que se aplicarmos o operador de reversão temporal sobre um estado ele inverte o spin e o momento. Isso pode ser visto a partir da inversão de  $k$  que representa o número de onda e pela relação que diz que  $p = k\hbar$ : se invertermos o momento, invertemos o  $k$  e vice-versa. O operador  $K$  presente em (3.31) é responsável pela inversão do  $k$  (e, portanto, de  $p$ ) sobre um estado expresso em termos de ondas planas do tipo  $e^{ikx}$ . Já a inversão do spin se dá pela ação de  $U$ . Dessa forma,

$$\begin{aligned} T|k, -\rangle &= |-k, +\rangle \\ T|k, +\rangle &= -|-k, -\rangle, \end{aligned} \quad (3.34)$$

o sinal negativo na última expressão seria uma fase.

A mudança no sinal do spin pode ser representada pela rotação em  $\pi$  no eixo que o spin está, que, por convenção, definimos como sendo o eixo  $y$ . O operador de reversão temporal para um sistema de partícula única (3.31) toma a forma

$$T = e^{-i\pi\hat{S}_y/\hbar}K \quad (3.35)$$

onde  $\hat{S}_y$  é o operador spin na direção  $y$ , que para o caso do spin-1/2 é ,  $\hat{S}_y = \hbar\sigma_y/2$ . Expandindo a exponencial em séries de potência, obtemos

$$e^{-i\pi\sigma_y/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-i\pi\sigma_y/2}{n!} = \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i\hat{\sigma}_y. \quad (3.36)$$

Dessa forma, obtemos que

$$T = -i\sigma_y K. \quad (3.37)$$

O operador da Eq. (3.37) age sobre um estado de partícula única do tipo da Eq. (3.34), isto é, que possui apenas os graus de liberdade de momento  $k$  e de spin. Consideremos agora que queremos representar  $T$  para uma partícula com  $2r$  graus de liberdade, sendo  $r$  graus de liberdade que podem ser, por exemplo, o número de sítios por célula unitária em uma rede na qual

a partícula vive, além dos 2 graus de liberdade por conta do spin. Podemos escrever o operador de reversão temporal da seguinte forma,

$$T = \sum_k |k\rangle \mathcal{T} \langle k| K \quad (3.38)$$

onde  $\langle k|$  e  $|k\rangle$  são spinores bipartidos de dimensão  $2r$ . Se eles forem bipartidos em relação ao spin temos

$$|k\rangle = \underbrace{[|k, 1+\rangle |k, 2+\rangle \cdots |k, r+\rangle]}_{spin +} \underbrace{[|k, 1-\rangle |k, 2-\rangle \cdots |k, r-\rangle]}_{spin -} \quad \langle k| = \begin{bmatrix} \langle k, 1+| \\ \langle k, 2+| \\ \vdots \\ \langle k, r+| \\ \langle k, 1-| \\ \langle k, 2-| \\ \vdots \\ \langle k, r-| \end{bmatrix}. \quad (3.39)$$

A forma de  $\mathcal{T}$  depende de como definimos a bipartição dos spinores. Se escolhermos os spinores bipartidos em termos do spin, como na Eq.(3.39), temos

$$\mathcal{T} = (-i\sigma_y) \otimes 1_{r \times r}. \quad (3.40)$$

Se ao invés disso, escolhermos a bipartição em termos dos sítios ímpares e pares, como na Eq.(3.9) temos que

$$\mathcal{T} = 1_{r \times r} \otimes (-i\sigma_y). \quad (3.41)$$

Para sistemas sem spin temos que  $\mathcal{T} = 1_{r \times r}$ .

Daqui em diante trataremos do operador reversão temporal para o caso onde é levado em consideração o grau de liberdade do spin.

### 3.2.1 Operador reversão temporal

#### 1) Hermiticidade

$$\begin{aligned}
T &= -i \sum_k |k\rangle \sigma_y \otimes 1_{r \times r} \langle k| K \\
T^\dagger &= +i K^\dagger \left( \sum_k |k\rangle \sigma_y \otimes 1_{r \times r} \langle k| \right)^\dagger = \\
&= i K \sum_k |k\rangle \sigma_y \otimes 1_{r \times r} \langle k| = \\
&= i \sum_k |-k\rangle (-\sigma_y) \otimes 1_{r \times r} \langle -k| K = \\
&= -i \sum_k |k\rangle \sigma_y \otimes 1_{r \times r} \langle k| K \\
T^\dagger &= T
\end{aligned} \tag{3.42}$$

#### 2) Quadrado

$$\begin{aligned}
T^2 &= \sum_{k,k'} |k\rangle (-i\sigma_y \otimes 1_{r \times r}) \langle k| K |k'\rangle (-i\sigma_y \otimes 1_{r \times r}) \langle k'| K \\
&= \sum_{k,k'} |k\rangle (-i\sigma_y \otimes 1_{r \times r}) \langle k| -k'\rangle (i(-\sigma_y) \otimes 1_{r \times r}) \langle -k'| K^2 \\
&= \sum_k |k\rangle (-i\sigma_y \otimes 1_{r \times r})^2 \langle k| \\
&= \sum_k |k\rangle (-1_{2 \times 2} \otimes 1_{r \times r}) \langle k| \\
&= - \sum_k |k\rangle \langle k| \\
T^2 &= -I
\end{aligned} \tag{3.43}$$

### 3) Inverso

$$\begin{aligned} T^2 &= TT = -I = -TT^{-1} \\ T^{-1} &= T \end{aligned} \quad (3.44)$$

### 4) Anti-unitariedade

$$\begin{aligned} T^{-1} &= T = -T^\dagger \\ T^{-1} &= -T^\dagger \end{aligned} \quad (3.45)$$

Já a matriz  $\mathcal{T}$  obedece

$$\mathcal{T}^\dagger = -\mathcal{T} \quad (3.46)$$

$$\mathcal{T}^2 = -1 \quad (3.47)$$

como segue da Eq. (3.41) ou (3.40). Logo, é unitária:

$$\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{T}^\dagger. \quad (3.48)$$

Suponhamos um hamiltoniano de uma partícula escrito na base (3.39) ou (3.41)

$$\mathcal{H} = \sum_k |k\rangle \mathcal{H}(k) \langle k|. \quad (3.49)$$

Aplicando (3.38) e (3.49) obtemos a ação de  $T$  sobre  $\mathcal{H}$

$$\begin{aligned} T\mathcal{H}T &= \sum_{k's} |k\rangle \mathcal{T} \langle k|K|k'\rangle \mathcal{H}(k') \langle k'|k''\rangle \mathcal{T} \langle k''|K = \\ &= \sum_{k's} |k\rangle \mathcal{T} \langle k| - k'\rangle \mathcal{H}^*(k') \langle -k'| - k''\rangle \mathcal{T} \langle -k''|K^2 \\ T\mathcal{H}T &= \sum_k |k\rangle \mathcal{T} \mathcal{H}^*(-k) \mathcal{T} \langle k| \end{aligned} \quad (3.50)$$

### 3.2.2 Hamiltoniano com simetria de reversão temporal

Aplicando (3.44), (3.32) pode ser moldado na forma

$$T \mathcal{H} T = -\mathcal{H} \quad (3.51)$$

e agora aplicando (3.49) e (3.50) obtemos a relação para a matriz de Bloch com simetria de reversão temporal:

$$\mathcal{T} \mathcal{H}^*(-k) \mathcal{T} = -\mathcal{H}(k) \quad (3.52)$$

usando (3.46) e (3.48), (3.52) aparece como:

$$\begin{aligned} \mathcal{T} \mathcal{H}^*(-k) \mathcal{T}^\dagger &= \mathcal{H}(k) \\ \mathcal{T} \mathcal{H}^*(-k) \mathcal{T}^{-1} &= \mathcal{H}(k) \end{aligned} \quad (3.53)$$

### 3.2.3 Espectro de um Hamiltoniano com simetria de reversão temporal

Como foi visto anteriormente,  $T^2 = -I$ , isso nos diz que  $T|\psi\rangle$  e  $|\psi\rangle$  são necessariamente dois estados diferentes. Alguém poderia pensar que  $T|\psi\rangle$  seja igual a  $|\psi\rangle$  diferenciados apenas por uma fase,

$$T|\psi\rangle = e^{i\phi}|\psi\rangle.$$

Assumindo isso, temos que

$$\begin{aligned} T^2|\psi\rangle &= T e^{i\phi}|\psi\rangle = \\ e^{-i\phi} T|\psi\rangle &= e^{-i\phi} e^{i\phi}|\psi\rangle = |\psi\rangle, \end{aligned}$$

fazendo com que  $T^2 = +1$ , o que está errado, considerando o que já mostramos em (3.43).

Como (3.32) é verdade é fácil demonstrar que  $T|\psi\rangle$  e  $|\psi\rangle$  tem a mesma energia, porém, como acabamos de demonstrar, eles não são o mesmo estado. Além disso, temos que quando aplicamos o operador de reversão temporal o novo estado terá seu spin invertido assim como o valor de  $k$ , como visto em (3.34).

Matematicamente,

$$\mathcal{H}|k, +\rangle = E|k, +\rangle, \quad \mathcal{H}T|k, +\rangle = \mathcal{H}|-k, -\rangle = E|-k, -\rangle \quad (3.54)$$

Isto significa que existe uma simetria do espectro de  $\mathcal{H}$  em relação a  $k = 0$ .

Consideremos agora os estados com momento  $k = 0, \pm\pi$ . Pelo que já vimos,  $|0, + \rangle$  e  $|0, - \rangle$  têm a mesma energia, assim como  $|\pm\pi, + \rangle$  e  $|\mp\pi, - \rangle$ . Mas, além disso,  $|+\pi, + \rangle$  e  $|-\pi, + \rangle$ , assim como  $|+\pi, - \rangle$  e  $|-\pi, - \rangle$ , são, na verdade, o mesmo estado (e, portanto, também têm a mesma energia) já que  $k = \pi = -\pi$  em virtude da periodicidade de  $2\pi$  da zona de Brillouin. Sendo assim, as bandas de energia para spin up e down precisam se cruzar em  $k = 0$  e em  $k = \pm\pi$ . Este é o conhecido Teorema de Kramers[12]. Os pontos  $k = 0$  e  $k = \pm\pi$  são chamados de momentos invariantes por reversão temporal.

### 3.3 Simetria partícula-buraco

Nos sistemas com reversão temporal e simetria partícula-buraco, a simetria quiral está automaticamente presente. Em tais sistemas,  $S = TC$ , onde  $C$  é o operador partícula-buraco. Assim sendo, assumindo um sistema que possua as três simetrias e usando (3.44),

$$\begin{aligned} C &= T^{-1}S \\ C &= -TS \end{aligned} \tag{3.55}$$

Na escolha de uma base para representação de  $S$  e  $T$ , se escolhermos (3.9), então  $\mathcal{S} = \sigma_z \otimes 1_{r \times r}$ , já o operador reversão temporal toma a forma  $\mathcal{T} = 1_{r \times r} \otimes (-\sigma_y)$ . Se, como outra alternativa, escolhermos (3.39), então  $\mathcal{T} = (-i\sigma_y) \otimes 1_{r \times r}$ , porém temos  $\mathcal{S} = 1_{r \times r} \otimes \sigma_z$ .

Não obstante, qualquer que seja a base adotada as relações de simetria (3.26) e (3.52) não mudam, pois não dependem de qual representação usada.

Aplicando (3.8) e (3.38) em (3.55)

$$\begin{aligned} C &= - \sum_{k,k'} |k\rangle \mathcal{T} \langle k| K |k'\rangle \mathcal{S} \langle k'| \\ C &= - \sum_{k,k'} |k\rangle \mathcal{T} \langle k| -k'\rangle \mathcal{S} \langle -k'| K \quad (\mathcal{S} \in R) \\ C &= - \sum_k |k\rangle \mathcal{T} \mathcal{S} \langle k| K \\ C &= \sum_k |k\rangle \mathcal{C} \langle k| K \end{aligned}$$

$$\mathcal{C} = -\mathcal{T}\mathcal{S} \quad (3.56)$$

escolhendo, por exemplo, a base (3.9)

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = \sigma_z \otimes 1_{r \times r} &= \begin{cases} \sigma_z, & r = 1 \\ \sigma_z \otimes 1_{r/2 \times r/2} \otimes 1_{2 \times 2}, & r \geq 2. \end{cases} \\ \mathcal{T} = 1_{r \times r} \otimes (-i\sigma_y) &= \begin{cases} (-i\sigma_y), & r = 1 \\ 1_{2 \times 2} \otimes 1_{r/2 \times r/2} \otimes (-i\sigma_y), & r \geq 2. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.57)$$

trazendo (3.57) em (3.56)

$$\mathcal{C} = \begin{cases} (-\sigma_x), & r = 1 \\ \sigma_z \otimes 1_{r/2 \times r/2} \otimes (-i\sigma_y), & r \geq 2. \end{cases} \quad (3.58)$$

### 3.3.1 Operador partícula-buraco

#### 1) (Anti-)Hermiticidade

$$\begin{aligned} C^\dagger &= -S^\dagger T^\dagger = -ST = -\sum_{k,k'} |k\rangle \mathcal{S} \langle k|k'\rangle \mathcal{T} \langle k'|K \\ C^\dagger &= -\sum_k |k\rangle \mathcal{S} \mathcal{T} \langle k|K \\ \mathcal{S} \mathcal{T} &= \begin{cases} -\sigma_x = \mathcal{C}, & r = 1 \\ -\sigma_z \otimes 1_{r/2 \times r/2} \otimes i\sigma_y = -\mathcal{C}, & r \geq 2. \end{cases} \\ C^\dagger &= \begin{cases} -\sum_k |k\rangle \mathcal{C} \langle k|K, & r = 1 \\ +\sum_k |k\rangle \mathcal{C} \langle k|K, & r \geq 2. \end{cases} \\ C^\dagger &= \begin{cases} -C, & r = 1 \\ +C, & r \geq 2. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.59)$$

## 2) Quadrado

$$\begin{aligned}
 C^2 &= \sum_{k,k'} |k\rangle C \langle k| K |k'\rangle C \langle k'| K = \sum_{k,k'} |k\rangle C \langle k| -k'\rangle C \langle -k'| K^2 \\
 C^2 &= \sum_k |k\rangle C^2 \langle k| = \begin{cases} \sum_k |k\rangle 1_{2 \times 2} |k\rangle, & r = 1 \\ \sum_k |k\rangle (-1_{2r \times 2r}) |k\rangle & r \geq 2. \end{cases} \quad (3.60) \\
 C^2 &= \begin{cases} I, & r = 1 \\ -I, & r \geq 2. \end{cases}
 \end{aligned}$$

## 3) Inverso

$$\begin{aligned}
 C^2 &= CC = \pm I = \pm CC^{-1} \\
 C^{-1} &= \begin{cases} C, & r = 1 \\ -C, & r \geq 2. \end{cases} \quad (3.61)
 \end{aligned}$$

## 4) Anti-Unitariedade

Como

$$C^{-1} = \begin{cases} C, & r = 1 \\ -C, & r \geq 2. \end{cases}$$

e

$$C^\dagger = \begin{cases} -C, & r = 1 \\ C, & r \geq 2, \end{cases}$$

então

$$C^{-1} = -C^\dagger. \quad (3.62)$$

A matriz  $C$  tem as propriedades 2) e 3), mostradas acima, mas

$$C^\dagger = \begin{cases} +C, & r = 1 \\ -C, & r \geq 2. \end{cases} \quad (3.63)$$

e consequentemente é unitário,

$$C^{-1} = C^\dagger. \quad (3.64)$$

### 3.3.2 Hamiltoniano com simetria partícula-buraco

Suponhamos um hamiltoniano escrito na mesma base que  $S$ ,  $T$  e  $C$

$$\mathcal{H} = \sum_k |k\rangle \mathcal{H}(k) \langle k|, \quad (3.65)$$

permita-nos calcular  $C\mathcal{H}C^{-1}$ . De (3.16), (3.44) e (3.55) segue que

$$\begin{aligned} C^{-1} &= -S^{-1}T^{-1} = ST \\ C^{-1} &= \sum_{k,k'} |k\rangle \mathcal{S} \langle k|k'\rangle \mathcal{T} \langle k'|K \\ C^{-1} &= \sum_k |k\rangle \mathcal{S} \mathcal{T} \langle k|K \end{aligned}$$

Dessa forma

$$\begin{aligned} C\mathcal{H}C^{-1} &= \sum_{k's} |k\rangle (-\mathcal{T}\mathcal{S}) \langle k|K|k'\rangle \mathcal{H}(k') \langle k'|k''\rangle \mathcal{S}\mathcal{T} \langle k''|K \\ &= \sum_{k's} |k\rangle (-\mathcal{T}\mathcal{S}) \langle k|-k'\rangle \mathcal{H}^*(k') \langle -k'|-k''\rangle \mathcal{S}\mathcal{T} \langle -k''|K^2 \\ &= -\sum_k |k\rangle \mathcal{T}\mathcal{S}\mathcal{H}^*(-k)\mathcal{S}\mathcal{T} \langle k| \\ &= -\sum_k |k\rangle \mathcal{H}(k) \langle k| \end{aligned}$$

$$C\mathcal{H}C^{-1} = -\mathcal{H} \quad (3.66)$$

$$\{C, \mathcal{H}\} = 0 \quad (3.67)$$

A equação (3.67) pode ser reformulada em termos das matrizes, como é mostrado a seguir,

$$\begin{aligned} C\mathcal{H}C^{-1} &= -\mathcal{H} \\ &= \sum_{k's} |k\rangle \mathcal{C} \langle k|K|k'\rangle \mathcal{H}(k') \langle k'|k''\rangle \mathcal{C}^{-1} \langle k''|K \\ &= \sum_{k's} |k\rangle \mathcal{C} \langle k|-k'\rangle \mathcal{H}^*(k') \langle -k'|-k''\rangle \mathcal{C}^{-1} \langle -k''|K^2 \\ &= \sum_k |k\rangle \mathcal{C} \mathcal{H}^*(-k) \mathcal{C}^{-1} \langle k| = -\sum_k |k\rangle \mathcal{H}(k) \langle k| \end{aligned}$$

$$\mathcal{C} \mathcal{H}^*(-k) \mathcal{C}^{-1} = -\mathcal{H}(k), \quad (3.68)$$

ou usando (3.64) e (3.61) (para a matriz)

$$\begin{aligned} \mathcal{C} \mathcal{H}^*(-k) \mathcal{C}^\dagger &= -\mathcal{H}(k) \\ \mathcal{C} \mathcal{H}^*(-k) \mathcal{C} &= \begin{cases} -\mathcal{H}(k), & r = 1 \\ +\mathcal{H}(k), & r \geq 2. \end{cases} \end{aligned} \quad (3.69)$$

### 3.3.3 Espectro de um Hamiltoniano com simetria partícula-buraco

O espectro de um Hamiltoniano com simetria partícula-buraco é simétrico em torno da origem.

Pode ser demonstrado que

$$[T, S] = 0, \quad (3.70)$$

para  $r > 2$ .

A partir disso, aplicando o operador partícula-buraco em um estado, obtemos que

$$\begin{aligned} C |k, \tau\rangle &= -TS |k, \tau\rangle \\ -ST |k, \tau\rangle &= \alpha S |-k, -\tau\rangle \end{aligned} \quad (3.71)$$

onde  $\alpha$  é uma fase. Lembrando de (3.30), que nos diz que  $|k, \tau\rangle$  e  $S |k, \tau\rangle$  têm a mesma energia só que com sinal trocado, podemos ver que a aplicação do operador  $C$  sobre um estado inverte os valores de  $k$ ,  $\tau$  e  $E$ .

De um forma mais intuitiva de se ver, o operador partícula-buraco é uma junção dos operadores de reversão temporal e quiral, dessa forma quando aplicamos o operador sobre algum estado, este novo estado terá sua energia, spin e  $k$  invertidos.

## 3.4 Espectro de um Hamiltoniano com simetria quiral, reversão temporal e partícula-buraco

O espectro de um sistema com a simetria quiral, de reversão temporal e partícula-buraco possuirá todas as simetrias discutidas separadamente nas

subseções 3.1.4, 3.2.3 e 3.3.3. Consideremos uma rede cristalina unidimensional periódica com dois sítios em cada célula e com o grau de liberdade do spin incluído.

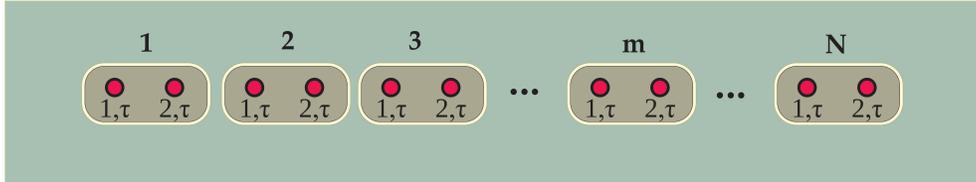


Figura 3.1: Rede unidimensional com dois sítios em cada célula, com spin.

Sendo assim, este sistema terá um espectro com 4 bandas. Levando em consideração que o sistema tem simetria quirál, vimos que as bandas são simétricas em torno da energia igual a zero. Considerando a simetria de reversão temporal, temos que o espectro é simétrico em torno de  $k = 0$ . Conseqüentemente, as bandas serão simétricas em torno da origem, como exigido pela simetria partícula-buraco. Portanto o espectro desse sistema hipotético será da forma mostrada abaixo.

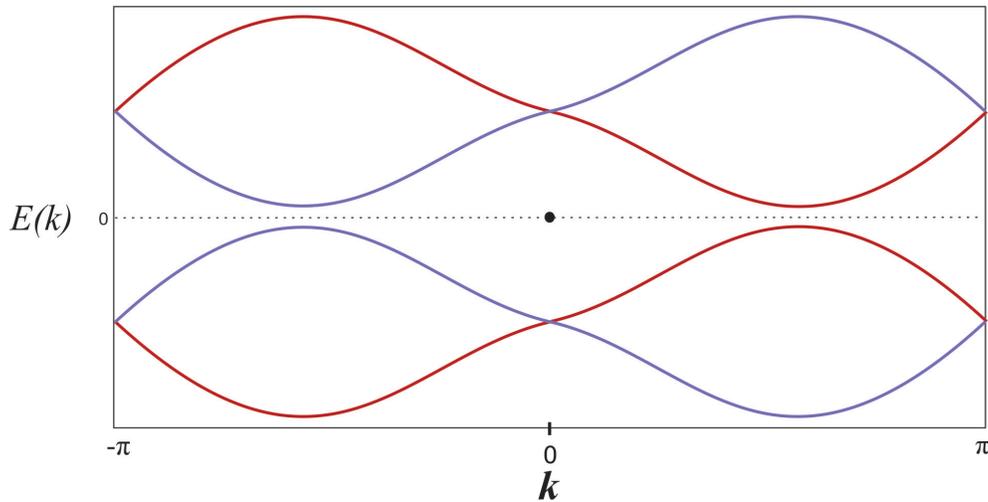


Figura 3.2: Espectro de uma rede unidimensional com 2 sítios em cada célula unitária e com spin 1/2, possuindo 4 bandas simétricas em torno da energia nula pela simetria quirál e em torno de  $k=0$  pela simetria de reversão-temporal, sendo as bandas vermelhas para spin up e as azuis para spin down.

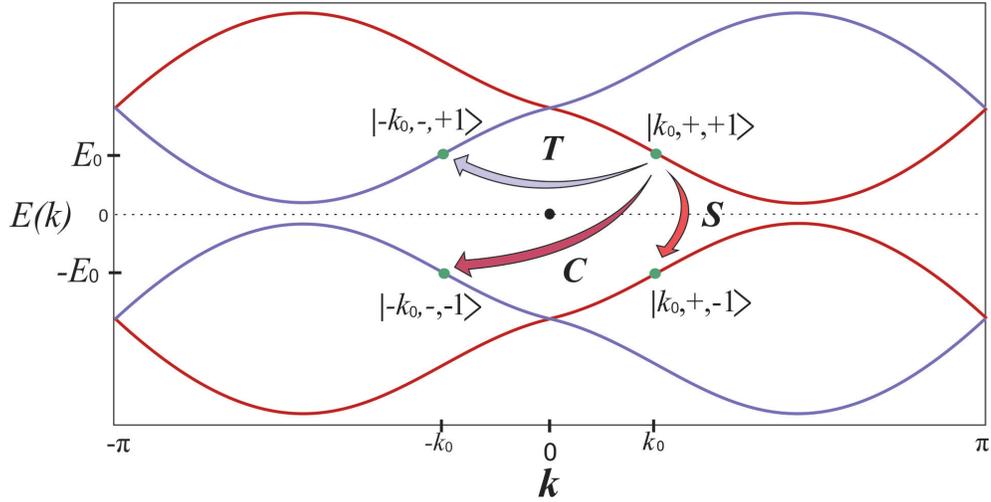


Figura 3.3: A ação dos operadores de simetria quiral,  $S$ , de simetria de reversão temporal,  $T$ , e de simetria partícula-buraco,  $C$ , sobre o estado  $|k_0, +, +1\rangle$ . As setas junto aos operadores mostram o estado resultante da transformação respectiva.

Para podermos identificar apropriadamente os estados, devemos considerar um outro número quântico para distinguí-los e esse número quântico será o autovalor do operador de simetria quiral, sendo  $+1$  se estiver energia positiva e  $-1$  se tiver energia negativa.

Se tomarmos um estado  $|k_0, +, +1\rangle$  com energia  $E_0$  e aplicarmos o operador quiral  $S$ , temos que o estado resultante será  $|k_0, +, -1\rangle$ , com energia  $-E_0$ . Se aplicarmos o operador reversão temporal, o estado resultante inverterá o  $k$  e o spin, portanto, será  $|-k_0, -, +1\rangle$ , com mesma energia,  $E_0$ . Se aplicarmos o operador partícula-buraco invertemos tanto o valor de  $k$  e o spin, quanto a energia, conseqüentemente,  $|-k_0, -, -1\rangle$  com energia  $-E_0$ . Estas afirmações podem ser observadas mais facilmente na Figura 3.3.

# Capítulo 4

## *Winding number*

Existem diversos tipos de invariantes topológicos que nos dão informações sobre em qual fase da matéria o sistema está dependendo dos seus parâmetros microscópicos. O valor de um invariante topológico é fixo dentro de uma dada fase topológica e, portanto, uma mudança no invariante significa uma transição de fase topológica. Cada sistema é descrito por um tipo de invariante topológico. O que determina qual deles devemos utilizar depende de quais simetrias estão presentes no sistema.

Para um sistema unidimensional que possui simetria quirial, temos que o invariante topológico que caracteriza as fases topológicas desse sistema é o *Winding Number*.

### 4.1 *Winding number* em uma dimensão

Seja a matriz de Bloch  $r \times r$

$$\mathcal{H}(k) = \vec{\mathbf{d}}(k) \cdot \vec{\mathbf{e}} \quad (4.1)$$

onde  $\vec{\mathbf{d}}(k) = (d_1(k), d_2(k), \dots, d_{r^2}(k))$  é um vetor  $r^2$ -dimensional cujas componentes  $d_i(k)$  são funções de  $k$ , e onde  $\vec{\mathbf{e}} = (e_1, e_2, \dots, e_{r^2})$  é um vetor  $r^2$ -dimensional cujas componentes  $e_i$  são matrizes  $r \times r$  que formam a base natural para o espaço de matrizes  $r \times r$ , isto é

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \quad e_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \quad \dots, \quad e_{r^2} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

Segue da Eq.(4.1) que

$$\mathcal{H}(k) = d_1(k)e_1 + d_2(k)e_2 + \cdots + d_{r/2}(k)e_{r/2}$$

$$\mathcal{H}(k) = \sum_{i=1}^{r/2} d_i(k)e_i \quad (4.2)$$

No caso do modelo possuir simetria chiral, por exemplo, sabemos que, se definirmos os spinors de tal forma que as primeiras  $r/2$  entradas contendam os operadores que atuam em cima da sub-rede  $A$  e as  $r/2$  entradas seguintes os operadores que atuam na sub-rede  $B$ , então  $\mathcal{H}(k)$  assume a forma 'off-diagonal'

$$\mathcal{H}(k) = \begin{bmatrix} 0 & \mathcal{H}_{AB}(k) \\ \mathcal{H}_{AB}^\dagger(k) & 0 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

onde  $\mathcal{H}_{AB}(k)$  é a matriz  $r/2 \times r/2$  contendo as conexões entre as sub-redes.

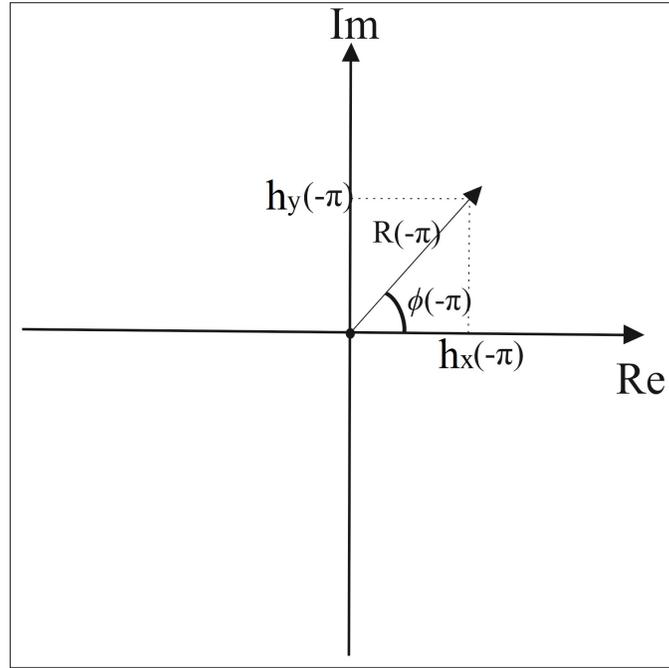
O *Winding Number*  $\nu$  é definido como o número de revoluções que o número complexo  $\det \mathcal{H}_{AB}$  faz em torno da origem do plano complexo quando  $k$  caminha pela zona de Brillouin, de  $-\pi$  à  $\pi$ .

Este determinante pode ser escrito como

$$\det \mathcal{H}_{AB}(k) = h_x(k) + ih_y(k) = R(k)e^{i\phi(k)}, \quad (4.4)$$

onde  $\phi(k) = \tan^{-1} \left( \frac{h_y(k)}{h_x(k)} \right)$ .

Vamos desenhar  $\det \mathcal{H}_{AB}(k)$  de um sistema hipotético no plano complexo com  $k = -\pi$ ,



Usando a periodicidade da zona de Brillouin, se fizermos  $k$  ir de  $-\pi$  à  $\pi$  a trajetória de  $\det \mathcal{H}_{AB}(k)$  será uma curva fechada, com  $\det \mathcal{H}_{AB}(-\pi) = \det \mathcal{H}_{AB}(\pi)$ . Dessa forma, devemos obter o resultado mostrado na figura a seguir. Podemos perceber, no presente exemplo, que a diferença entre  $\phi(-\pi)$  e  $\phi(\pi)$  é  $2\pi$ , ou seja,  $\Delta\phi = 2\pi$ . Por outro lado, obtemos que  $\det \mathcal{H}_{AB}(k)$  realiza uma volta em torno da origem no plano complexo quando  $k$  caminha pela zona de Brillouin, ou seja, nesse caso  $\nu = 1$

Portanto, o *Winding Number* pode ser calculado como

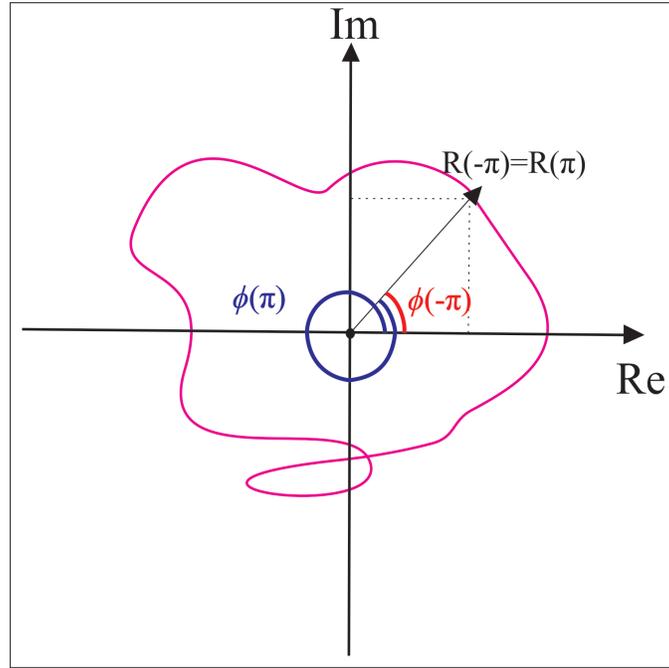
$$\nu = \frac{1}{2\pi} \Delta\phi, \quad (4.5)$$

ao qual não é nada menos que,

$$\nu = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\phi(k)}{dk} dk. \quad (4.6)$$

Outra expressão pode ser obtida considerando que,

$$d\phi = \frac{\partial\phi}{\partial h_x} dh_x + \frac{\partial\phi}{\partial h_y} dh_y, \quad (4.7)$$



sabendo que  $\frac{d}{dx} \arctan(x) = \frac{1}{1+x^2}$ ,

$$d\phi = \frac{1}{1 + \left(\frac{h_y}{h_x}\right)^2} \left(-\frac{h_y}{h_x^2}\right) dh_x + \frac{1}{1 + \left(\frac{h_y}{h_x}\right)^2} \left(\frac{1}{h_x}\right) dh_y, \quad (4.8)$$

então,

$$d\phi = \frac{1}{h_x^2} \times \frac{1}{1 + \left(\frac{h_y}{h_x}\right)^2} [h_x dh_y - h_y dh_x] \quad (4.9)$$

$$d\phi = \frac{h_x dh_y - h_y dh_x}{h_x^2 + h_y^2},$$

portanto, temos que

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int_{c_{zB}} \frac{h_x dh_y - h_y dh_x}{h_x^2 + h_y^2}. \quad (4.10)$$

## 4.2 *Winding number* em termos de pólos e zeros

Uma maneira mais prática de se calcular o *Winding Number* se dá através da diferença entre o números de **pólos**, vezes que a função diverge, e o número de **zeros**, vezes que a função é igual a zero, presentes em  $f(z(k))$  dentro de uma curva fechada, onde  $f(z(k)) \equiv f(k) \equiv \det \mathcal{H}_{AB}$  e  $z(k) \equiv e^{-ik}$ . Iniciando o tratamento em  $f(k)$ , notemos que a partir da Eq.(4.4) podemos obter

$$\ln f(k) = \ln R(k) + i\phi(k),$$

que pode ser reorganizada em

$$\phi(k) = \frac{1}{i}[\ln f(k) - \ln R(k)].$$

Utilizando o resultado obtido aqui, podemos reescrever a Eq.(4.6) da seguinte forma

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \left( - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d}{dk} \ln f(k) dk + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d}{dk} \ln R(k) dk \right).$$

Observando os termos da última expressão, podemos ver que a segunda integral desaparece, pois temos que a função real  $R(k)$ , diferente de  $f(k)$ , tem o mesmo valor em  $-\pi$  e  $\pi$ , desse modo,  $\ln R(\pi) - \ln R(-\pi) = 0$ . Usando a regra da cadeia sobre a derivada dentro da primeira integral, temos

$$\nu = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} \left[ \frac{d}{dk} f(k) \right] \frac{1}{f(k)} dk. \quad (4.11)$$

Podemos reescrever a derivada de  $f(k)$  definindo  $z(k) \equiv e^{-ik}$ ,

$$\frac{d}{dk} f(k) = \left( \frac{dz(k)}{dk} \right) \left( \frac{d}{dz(k)} f(z(k)) \right) = -ie^{-ik} \frac{d}{dz(k)} f(z(k))$$

Susbtituindo na Eq.(4.11),

$$\nu = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} \left[ \frac{d}{dz(k)} f(z(k)) \right] \frac{1}{f(z(k))} (-ie^{-ik}) dk,$$

definindo

$$g(z(k)) \equiv \left[ \frac{d}{dz(k)} f(z(k)) \right] \frac{1}{f(z(k))},$$

chegamos em

$$\nu = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} g(z(k))z'(k)dk. \quad (4.12)$$

Como é conhecido, temos um teorema que diz que a integral de linha de  $F(\tau)$  sobre a curva  $C$  é

$$\int_C F(\tau)d\tau = \int_a^b F(\tau(t))\tau'(t)dt, \quad (4.13)$$

onde  $\tau(t)$  parametriza a curva  $C$  quando  $a < t < b$ , sendo que a  $\tau(t)$  possui valor complexo, enquanto  $t$  é real. Aplicando do o teorema da Eq.(4.13) na Eq.(4.12), onde  $\tau(t)$  corresponde a  $z(k) = e^{-ik}$  e  $F(\tau(t))$  corresponde a  $g(z(k))$ ,

$$\nu = -\frac{1}{2\pi i} \oint g(z)dz = -\frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f'(z)}{f(z)}dz.$$

A curva é orientada no sentido-horário por estar parametrizada por  $e^{-ik}$  e  $k \in [-\pi, \pi]$ . Podemos reverter a direção da curva apenas trocando o sinal, deste modo,

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f'(z)}{f(z)}dz. \quad (4.14)$$

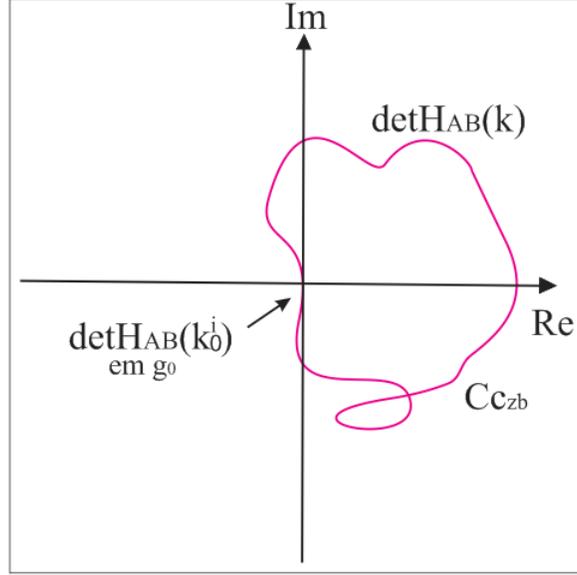
O **princípio do argumento** da análise complexa[13] nos leva ao seguinte resultado,

$$\nu = N_f - P_f, \quad (4.15)$$

pois diz que a integral de  $f'(z)/f(z)$  sobre uma curva fechada é igual a diferença entre o número de zeros,  $N_f$ , e o número de polos,  $P_f$ , de  $f(z)$  dentro da curva.

### 4.3 *Winding number* em uma dimensão para sistemas sem gap

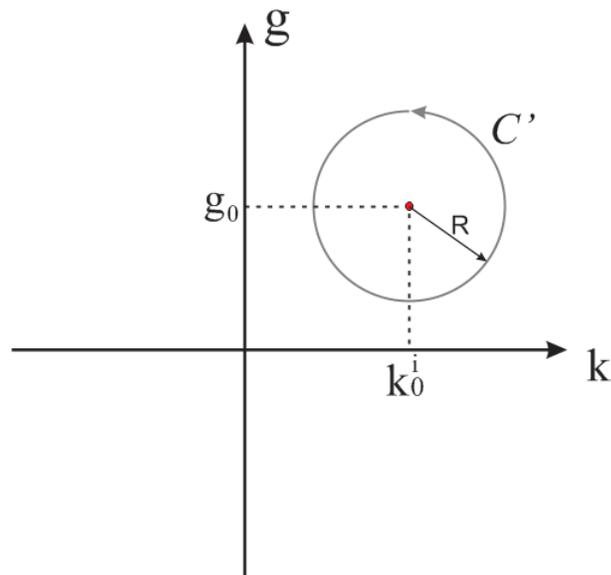
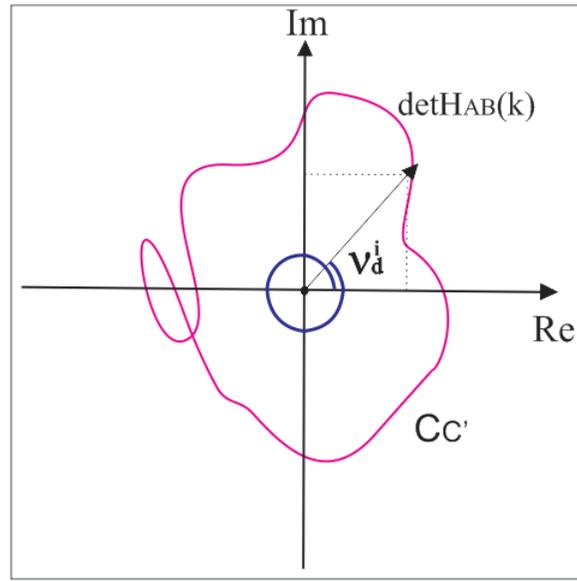
Existem valores dos parâmetros microscópicos - que serão designados por  $g$  - para os quais  $\det\mathcal{H}_{AB}(k) = 0$  em pontos isolados,  $k_0^i$ ,  $i = 1, 2, \dots$ , na zona de Brillouin. Nesses pontos, o gap entre as bandas intermediárias, sobre e abaixo da energia zero, se fecha, porque  $\det\mathcal{H}(k_0^i) = 0$ . Também,  $\nu$  se torna indefinido, pois o caminho  $C_{C_{ZB}}$  traçado por  $\det\mathcal{H}_{AB}(k)$  sobre o plano complexo, cruza a origem quando  $k = k_0^i$ .



Seguindo a proposta em [14], quando o espectro é sem-gap definimos um *Winding Number modificado*  $\nu_d^i$  computado em volta de cada ponto de fechamento do gap  $(g_0, k_0^i)$ .

$$\nu_d^i = \frac{1}{2\pi} \oint_{C'} \frac{h_x dh_y - h_y dh_x}{h_x^2 + h_y^2}. \quad (4.16)$$

Especificamente,  $\nu_d^i$  é definido como o número de vezes que  $\det\mathcal{H}_{AB}(k)$  circula em volta da origem do plano complexo quando o ponto  $(g, k)$  se move em torno de um pequeno círculo  $C'$  centrado em  $(g_0, k_0^i)$ , com este último sendo o único ponto de fechamento do gap dentro do círculo. Na figura a seguir,  $C_{C'}$  é o caminho que  $\det\mathcal{H}_{AB}(k)$  faz no plano complexo quando  $(g, k)$  percorre  $C'$ .



Diferentemente de  $\nu$ , que é um invariante global envolvendo um cálculo sobre a zona de Brillouin inteira,  $\nu_d^i$ 's são locais na medida que eles são definidos em uma pequena região no espaço parâmetro-momento. O *acúmulo*

do *Winding Number modificado* caracterizando o espectro sem gap é dado pela soma das contribuições locais:  $\nu_d = \sum_i \nu_d^i$ .

Na Ref.[24] é mostrado que os *Winding Numbers*  $\nu_1$  e  $\nu_2$  das fases com gap de lados opostos de um ponto de transição de fase sem gap e o *Winding Number*  $\nu_d$  do ponto de transição de fase estão relacionados por:  $\nu_d = \nu_1 - \nu_2$ .

## Capítulo 5

# Fio quântico com interações spin-órbita e submetido a uma modulação espacial periódica

Esse capítulo será dedicado à apresentação do sistema que iremos investigar e ao desenvolvimento do modelo que será usado para descrever o sistema.

O sistema consiste de um fio quântico inserido na interface entre dois semicondutores e submetido a um arranjo de eletrodos distribuídos periodicamente ao longo do fio, como mostrado na Fig. 5.1

Em nosso modelo, os elétrons se movem ao longo do fio via *hopping* e estão submetidos às interações spin-órbita de Rashba e de Dresselhaus tipicamente presentes em diversos materiais cristalinos, em particular em semicondutores. A cadeia de eletrodos depositada sobre o fio pode induzir uma modulação espacial periódica em cada uma das energias consideradas no modelo. Essa modulação é crucial pois, como veremos, certos termos modulados induzem inversão de spin e, com isso, comportamentos não triviais.

Assumiremos que o preenchimento do fio é tal que seja nulo seu potencial químico (ou seja, sua energia de Fermi é ajustada em zero). Isso será importante, como veremos, para que o sistema tenha simetria quiral.

A seguir serão apresentadas as interações spin-órbita de Rashba e Dresselhaus.

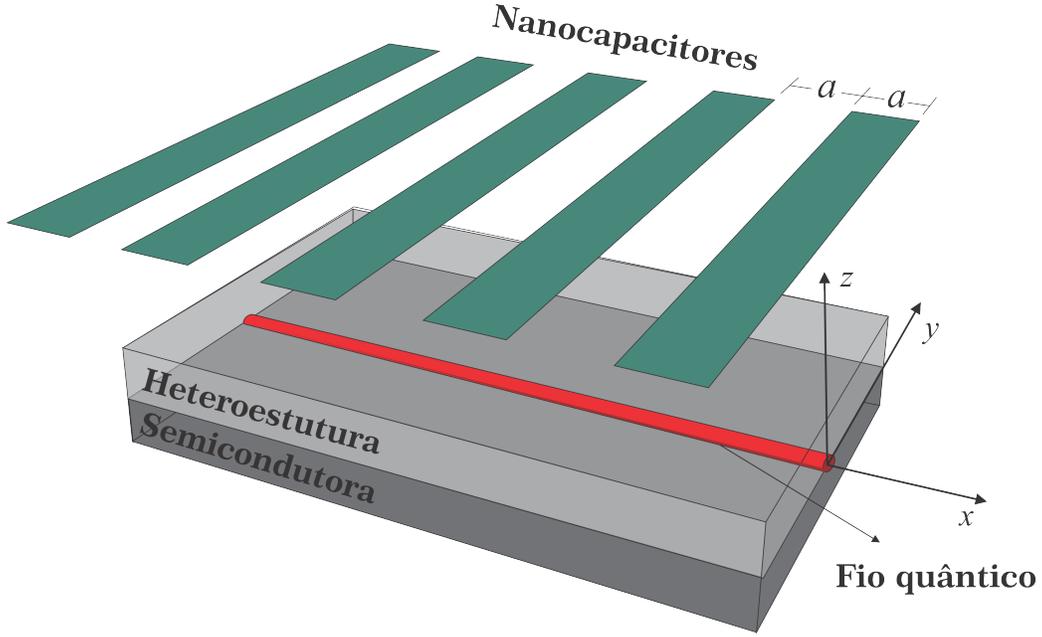


Figura 5.1: Arranjo de eletrodos distribuídos periodicamente sobre um fio quântico em um poço quântico semiconductor

## 5.1 Interação spin-órbita

O acoplamento spin-órbita(SO) surge da interação entre um campo magnético efetivo e o dipólo magnético do elétron. A movimentação do elétron na órbita de um átomo ou em um cristal, pode ser vista como a movimentação dos núcleos se o referencial adotado for o do elétron. A carga do núcleo em movimento gera um campo magnético efetivo  $B_{eff}^{\vec{}} \sim \vec{E} \times \vec{p}/mc^2$ , onde  $\vec{E}$  é o campo elétrico do núcleo[12]. A energia de Zeeman é dada por  $\mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$ , onde  $\mu_B \vec{\sigma}$  é o momento de dipolo magnético do elétron. Desta forma, a interação SO é descrita por

$$H_{SO} \sim \mu_B (\vec{E} \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} / mc^2. \quad (5.1)$$

Em cristais, o campo elétrico pode ser representado por  $\vec{E} = -\nabla \vec{V}(\vec{r})$ , sendo  $\vec{V}(\vec{r})$  o potencial cristalino do material.

Em um poço quântico 2D como o da Fig. 5.1, os elétrons estão sujeitos as interações spin-órbita de Rashba[15] e Dresselhaus[16], originadas da assimetria de inversão do potencial  $\vec{V}(\vec{r}) = V_{cr}(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r})$ . Sendo  $V_{cr}(\vec{r})$  o

potencial periódico do cristal e  $V_{ext}(\vec{r})$  é uma parte não-periódica contendo efeitos de outras fontes, por exemplo, impurezas ou campos elétricos. O gradiente de potencial  $\nabla \vec{V}(\vec{r})$  produz uma interação spin-órbita que pode ser escrita como

$$H_{SO} = \lambda_{cr}[\vec{k} \times \nabla V_{ext}(\vec{r})] \cdot \vec{\sigma} - \vec{b}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma}, \quad (5.2)$$

onde a contribuição de  $V_{cr}$ , no primeiro termo, é absorvida por  $\lambda_{cr}$ , enquanto no segundo produz um campo spin-órbita intrínseco. Aqui  $\vec{k}$  é o número de onda de um elétron, com  $\vec{\sigma}$  sendo as matrizes de Pauli representando seu spin. Em semicondutores onde o potencial do cristal não tem simetria de inversão, ou seja,  $V_{cr}(-\vec{r}) \neq V_{cr}(\vec{r})$  o campo spin-órbita interno  $\vec{b}(\vec{k})$  não possui uma média igual a zero dentro da célula unitária, resultando em uma *splitting* do spin compilado pela interação de Dresselhaus[16]. Para um fio quântico que cresce ao longo de  $[0,0,1]$ , com elétrons confinados na no poço quântico no plano  $xy$ , o termo principal da interação de Dresselhaus toma a forma

$$H_{\beta} = \beta(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y), \quad (5.3)$$

com  $\beta$  sendo um parâmetro que depende do material e estrutura deste[17].

A degenerescência em um poço quântico pode ser levantada também por causa da assimetria de inversão do potencial de confinamento em  $V_{ext}(\vec{r})$ . Mais precisamente, a assimetria espacial da banda de condução ao longo da direção de crescimento do poço quântico(i.e, na direção  $z$ , perpendicular ao plano de simetria do poço) simula um campo elétrico na mesma direção, e se obtem da Eq.(5.2) a interação de Rashba[15]

$$H_{\alpha} = \alpha(k_x \sigma_y - k_y \sigma_x). \quad (5.4)$$

O termo de acoplamento de Rashba  $\alpha$  possui uma dependencia complexa sobre várias características do poço quântico, incluindo a distribuição iônica nas proximidades das camadas de dopagem[18], a assimetria relativa da densidade de elétrons na interface do poço quântico[19], e, mais importante, a aplicação de um campo elétrico externo[20]. Esse último recurso permite, através de um eletrodo, controlar o termo de acoplamento de Rashba  $\alpha$ , com a variação de mais que um fator de 2 de seu valor base reportado para poços quânticos em InAs[21]. Observamos que  $\alpha$  em (5.4) é uma média espacial de uma flutuação microscópica aleatória do acoplamento de Rashba. Como discutido na REF 22, para um poço quântico com um acoplamento de Rashba muito grande como em poços em HgTe, ao qual suporta estados Hall quântico de spin, esse grande efeito desordenado pode causar uma transição de

Anderson a um estado isolante quando a interação elétron-elétron é blindada fracamente. Em GaAs ou InAs favorecidos na maioria das aplicações spintrônicas, o efeito desordenado é fraco, com um comprimento da localização induzido pela interação de Rashba mais longo que o comprimento de espalhamento pela impureza. Já tendo assumido que o fio tem um comprimento menor que o caminho livre médio, podemos desconsiderar as flutuações aleatórias no acoplamento de Rashba.

Projetando as interações de Rashba e Dresselhaus das Eq (5.3) e (5.4) ao longo da direção  $\hat{x}$  do fio quântico e usando o mesmo formalismo de *tight-binding*, é obtido

$$H_{DR} = i \sum_{n,\zeta,\zeta'} c_{n,\zeta}^\dagger [\gamma_D \sigma_{\zeta\zeta'}^x + \gamma_R \sigma_{\zeta\zeta'}^y] c_{n+1,\zeta} + H.c., \quad (5.5)$$

onde  $\gamma_D = \beta a^{-1}$ ,  $\gamma_R = \alpha a^{-1}$ , com  $a$  sendo o espaçamento de rede. O sinal relativo e magnitude de  $\gamma_D$  e  $\gamma_R$  depende do material tanto quanto do design da heteroestrutura, com  $\gamma_D \approx \gamma_R \approx 5 \times 10^{-2} \text{meV}$ [23] num típico poço quântico baseado em GaAs, enquanto no poço quântico de HgTe o acoplamento de Rashba tem ordem de grandeza maior que o de Dresselhaus, com  $|\gamma_R| \gtrsim 10^2$  e  $\gamma_D \approx 10 \text{meV}$ . Os efeitos de interações spin-órbita uniformes sobre elétrons confinados têm sido investigados para elétrons interagente[24]-[26] e não-interagente[23] e por enquanto é bem entendida [26]. Aqui iremos considerar como a modulação espacial dessas interações levam ao aparecimento de fases topológicas e multicriticalidade no diagrama de fases do sistema.

## 5.2 Modelo

Consideremos uma rede unidimensional com  $N$  sítios populados por elétrons movidos por *hopping*, com as interações spin-órbita de Rashba e Dresselhaus e uma contribuição espacialmente modulada em cada um desses termos. O Hamiltoniano em aproximação de *tight-binding* deve ser escrito:

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_{\zeta,\zeta'} h_{\zeta\zeta'}(n) c_{n,\zeta}^\dagger c_{n+1,\zeta'} + H.c., \quad (5.6)$$

onde

$$h_{\zeta\zeta'}(n) = -t(n)\delta_{\zeta\zeta'} + i\gamma_R(n)\sigma_{\zeta\zeta'}^y - i\gamma_D(n)\sigma_{\zeta\zeta'}^x, \quad (5.7)$$

com  $\zeta, \zeta' = \uparrow, \downarrow$  indexando a projeção do spin ao longo do eixo de quantização  $z$ .

Os parâmetros espacialmente modulados  $t(n)$ ,  $\gamma_R(n)$  e  $\gamma_D(n)$  são modulados da forma  $X(n) = -X - X' \cos(2\pi qn + \phi)$  com  $X = t, \gamma_R, \gamma_D$  ( $X' = t', \gamma'_R, \gamma'_D$ ) sendo, respectivamente, a intensidades do *hopping*, da interação de Rashba e da interação de Dresselhaus uniformes (modulados). A parte modulada possui o número de onda da modulação igual a  $2\pi q/a$  (com  $a = 1$  sendo o espaçamento de rede), e  $\phi$  uma diferença de fase. A modulação aqui mostrada vem do campo elétrico modulado que surge de capacitores dispostos periodicamente ao longo do fio.

Realizando uma rotação de base que diagonaliza a parte uniforme de  $H$  no espaço do spin:

$$\begin{aligned} d_{n,+} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\theta/2}c_{n,\uparrow} - ie^{i\theta/2}c_{n,\downarrow}), \\ d_{n,-} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-e^{-i\theta/2}c_{n,\uparrow} + ie^{i\theta/2}c_{n,\downarrow}), \end{aligned}$$

com  $\theta = \arctan(\gamma_D/\gamma_R)$ , Eqs. (5.6)-(5.7) toma a forma:

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_{\tau} [\alpha_n^{\tau} d_{n,\tau}^{\dagger} d_{n+1,\tau} + \beta_n d_{n,\tau}^{\dagger} d_{n+1,-\tau}] + H.c. \quad (5.8)$$

onde  $\tau = \pm$  rotula a projeção do spin ao longo do novo eixo de quantização sobre o plano  $xy$  e onde a intensidade  $\alpha_n^{\tau}$  do *hopping* de spin conservado e  $\beta_n$  do *hopping* de spin-flip são dados por

$$\begin{aligned} \alpha_n^{\tau} &= -[t + i\tau\gamma_{eff}] - [t' + i\tau(\gamma_{RR} + \gamma_{DD})]\cos(2\pi qn + \phi), \\ \beta_n &= i(\gamma_{RD} - \gamma_{DR})\cos(2\pi qn + \phi), \end{aligned} \quad (5.9)$$

com  $\gamma_{eff} = \sqrt{\gamma_R^2 + \gamma_D^2}$ ,  $\gamma_{RR} = \gamma'_R\gamma_R/\gamma_{eff} = \gamma'_R\cos\theta$ ,  $\gamma_{DD} = \gamma'_D\gamma_D/\gamma_{eff} = \gamma'_D\sin\theta$ ,  $\gamma_{RD} = \gamma'_R\gamma_D/\gamma_{eff} = \gamma'_R\sin\theta$ ,  $\gamma_{DR} = \gamma'_D\gamma_R/\gamma_{eff} = \gamma'_D\cos\theta$ .

Impondo condições periódicas de contorno,  $H$  é invariante sob translação em uma rede com  $M = N/r$  células unitárias, com  $r = 1/q$  sitios por célula unitária. A Eq. (5.8) pode ser escrita em termos de contribuições intra-celulares e inter-celulares como

$$H = \sum_{m=1}^M \left[ \sum_{n=1}^{r-1} \sum_{\tau=\pm} \mathcal{H}_{intra} + \sum_{\tau=\pm} \mathcal{H}_{inter} \right] + H.c., \quad (5.10)$$

com

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{intra} &= \alpha_n^\tau d_{m,n}^{\tau\dagger} d_{m,n+1}^\tau + \beta_n d_{m,n}^{\tau\dagger} d_{m,n+1}^{-\tau}, \\ \mathcal{H}_{inter} &= \alpha_r^\tau d_{m,r}^{\tau\dagger} d_{m+1,1}^\tau + \beta_r d_{m,r}^{\tau\dagger} d_{m+1,1}^{-\tau},\end{aligned}\quad (5.11)$$

onde  $d_{m,n}^{\tau\dagger}$  ( $d_{m,n}^\tau$ ) cria (aniquila) uma partícula em um sítio  $n$  na célula unitária  $m$  com projeção do spin  $\tau$ .

Pela transformada de Fourier,

$$d_{m,n}^\tau = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=-\pi}^{\pi} d_{k,n}^\tau e^{ikm}, \quad (5.12)$$

onde  $k = k_j = \pm 2\pi j/M$ ,  $j = 0, 1, \dots, M/2$ , desse modo, as Eqs (5.10)-(5.11) se tornam em

$$H = \sum_{k=-\pi}^{\pi} \sum_{n,n'=1}^r \sum_{\tau,\tau'=\pm} d_{k,n}^{\tau\dagger} \mathcal{H}_{n,\tau,n',\tau'}(k) d_{k,n}^{\tau'} \quad (5.13)$$

com

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{n,\tau,n',\tau'} &= \alpha_n^\tau \delta_{n',n+1} \delta_{\tau',\tau} + \beta_n \delta_{n',n+1} \delta_{\tau',-\tau} + \\ &+ \alpha_{n-1}^{\tau*} \delta_{n',n-1} \delta_{\tau',\tau} + \beta_{n-1}^* \delta_{n',n-1} \delta_{\tau',-\tau} + \\ &+ \alpha_r^{\tau*} e^{-ik} \delta_{n,1} \delta_{n',r} \delta_{\tau',\tau} + \beta_r^* e^{-ik} \delta_{n,1} \delta_{n',r} \delta_{\tau',-\tau} + \\ &+ \alpha_r^\tau e^{+ik} \delta_{n,r} \delta_{n',1} \delta_{\tau',\tau} + \beta_r e^{+ik} \delta_{n,r} \delta_{n',1} \delta_{\tau',-\tau}.\end{aligned}\quad (5.14)$$

Definindo os spinores de dimensão  $2r$  cujos primeiros  $r$  elementos são formados por elementos criação(destruição) de sítios impares com spin up e down e os  $r$  últimos dos sítios com spin up e down,

$$d_k = \begin{bmatrix} d_{k,1}^+ \\ d_{k,1}^- \\ \vdots \\ d_{k,r-1}^+ \\ d_{k,r-1}^- \\ d_{k,2}^+ \\ d_{k,2}^- \\ \vdots \\ d_{k,r}^+ \\ d_{k,r}^- \end{bmatrix} \quad d_k^\dagger = (d_{k,1}^{+\dagger}, d_{k,1}^{-\dagger} \dots d_{k,r-1}^{+\dagger}, d_{k,r-1}^{-\dagger} d_{k,2}^{+\dagger}, d_{k,2}^{-\dagger} \dots d_{k,r}^{+\dagger}, d_{k,r}^{-\dagger}). \quad (5.15)$$

Utilizando os spinores definidos acima podemos reescrever o Hamiltoniano (5.13), se tornando

$$H = \sum_k d_k^\dagger \mathcal{H}(k) d_k, \quad (5.16)$$

com as entradas da matriz de Bloch  $2r \times 2r$  são dadas pela Eq. (5.14). Na escolha da representação dos spinores (5.15),

$$\mathcal{H}(k) = \frac{\sigma_x}{2} \otimes [Q(k) + Q^\dagger] + \frac{i\sigma_y}{2} \otimes [Q(k) - Q^\dagger(k)] \quad (5.17)$$

ou, equivalentemente,

$$\mathcal{H}(k) = \begin{bmatrix} 0 & Q(k) \\ Q^\dagger(k) & 0 \end{bmatrix} \quad (5.18)$$

com a matriz  $r \times r$   $Q(k)$  dada por

$$Q(k) = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & A_r^* z \\ A_2^* & A_3 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & A_{r-2}^* & A_{r-1} \end{bmatrix}, \quad (5.19)$$

onde  $z = e^{-ik}$  e

$$A_n = \begin{bmatrix} \alpha_n^+ & \beta_n \\ \beta_n & \alpha_n^- \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

são matrizes  $2 \times 2$  cujas entradas diagonais (anti-diagonais) são dadas pelas amplitudes de *hopping* de spin conservado (spin-flip) vistas nas expressões em (5.9).

Como foi visto anteriormente, um sistema possui simetria quiral, de reversão temporal e partícula-buraco se a matriz de Bloch do sistema obedece as relações de invariância (3.26),(3.52) e (3.68). É fácil mostrar que  $\mathcal{H}(k)$  dada pelas Eqs. (5.18)-(5.20) satisfaz essas relações e, portanto, nosso modelo possui as três simetrias.

Temos que na base (3.9),  $\mathcal{S} = \sigma_z \otimes 1_{r \times r}$ , e, portanto,  $\mathcal{S}^2 = 1$ . Indo para a simetria de reversão temporal,  $\mathcal{T} = 1_{r \times r} \otimes (-i\sigma_y)$ , conseqüentemente  $\mathcal{T}^2 = -1$ . Seguindo que  $\mathcal{C} = -\mathcal{T}\mathcal{S}$ , temos que  $\mathcal{C} = \sigma_z \otimes 1_{r/2 \times r/2} \otimes (i\sigma_y)$ , com  $\mathcal{C}^2 = -1$ .

Com esses resultados de  $\mathcal{C}^2$ ,  $\mathcal{T}^2$  e  $\mathcal{S}^2$ , nosso modelo se encaixa na classe de simetria CII da classificação de Altland-Zirnbauer, com suas fases com gap sendo caracterizadas através de um *Z-winding number* [8].

# Capítulo 6

## Tratamento computacional

Nesse capítulo será apresentado o tratamento computacional desenvolvido na linguagem de programação  $C$  para obter a estrutura de bandas e o diagrama de fases topológicas do nosso modelo.

Nas seções seguintes, serão apresentados três programas: (i) *winding number* com gap: calcula o *winding number* nas regiões do espaço de parâmetros  $\gamma_{eff}, \theta$  e  $\phi$  (com os demais parâmetros fixos) onde a estrutura de bandas do modelo apresenta um gap em torno de  $E = 0$ ; (ii) Estrutura Crítica: delinea as superfícies críticas compostas pelos pontos  $(\gamma_{eff}, \theta, \phi)$  onde o gap se fecha; (iii) *winding number* Modificado: calcula o *winding number* nas superfícies críticas; (iv) Espectro: calcula as autoenergias da matriz de Bloch do sistema para determinados pontos do espaço dos parâmetros.

Os programas acima são combinados como camadas de um programa maior que resulta no diagrama de fases topológicas do nosso modelo. O fluxograma da Fig. 6.1 ilustra esse processo, com os programas caracterizados por elipses e os respectivos resultados por hexágonos.

### 6.1 *Winding number* com gap

Este programa gera uma lista de dados contendo os pontos do espaço dos parâmetros situados na região com  $0 \leq \phi \leq 0.5$ ,  $0 \leq \theta \leq 0.5$  e  $0 \leq \gamma_{eff} \leq 20$  juntamente com o *winding number*  $\nu$  para seu respectivo ponto do espaço. Neste e nos outros programas, os demais parâmetros do modelo são fixos em  $q = 1/r = 1/4$ ,  $t = \gamma'_R = 1$ ,  $t' = \gamma'_D = 0$ . A expressão "com gap" diz respeito ao tipo de, pontos que estamos interessados em calcular esse

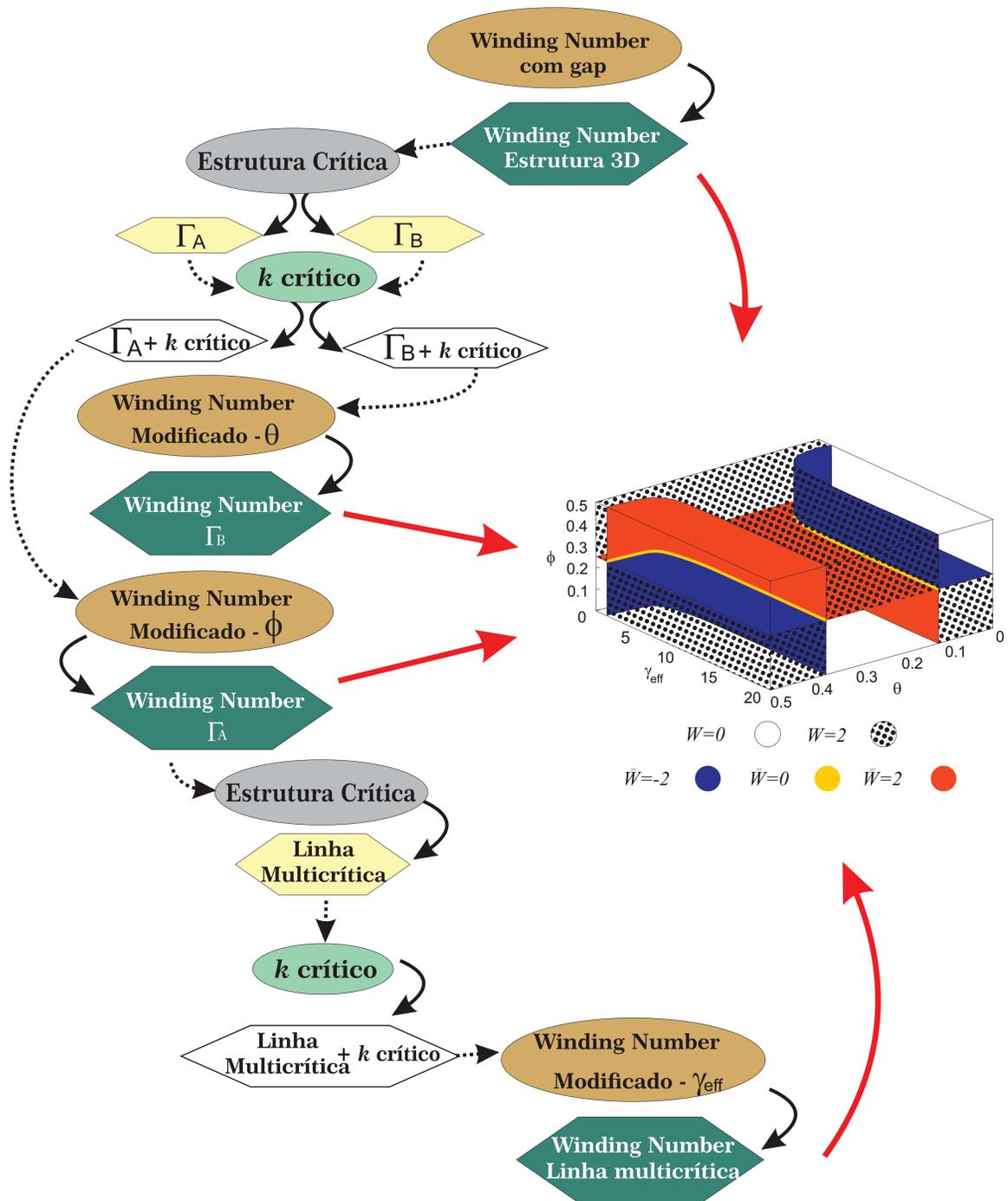


Figura 6.1: O fluxograma acima nos mostra as etapas computacionais, elipses, os dados obtidos em cada etapa, hexágonos, que resultam no diagrama de fase tridimensional no espaço dos parâmetros  $\gamma_{eff}$ ,  $\theta$  e  $\phi$  do modelo que está sendo estudado.

invariante topológico, pontos para os quais o espectro do Hamiltoniano possui um gap em torno de  $E = 0$ . Na Figura 6.2 temos o fluxograma de como é realizado esse programa.

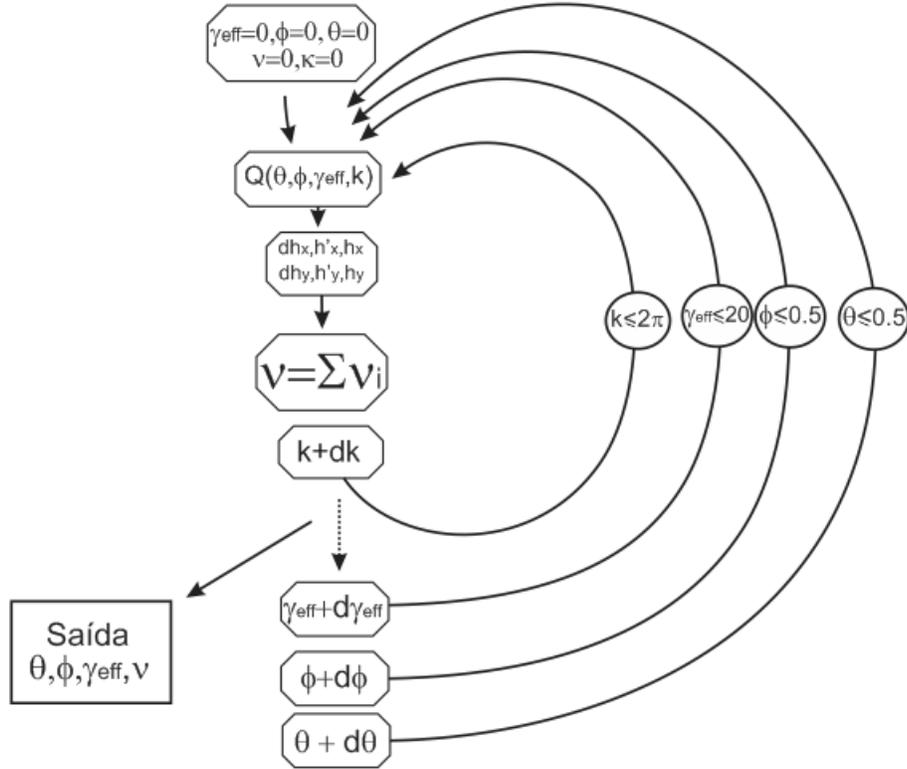


Figura 6.2:

Vemos que inicialmente os parâmetros  $\gamma_{eff}$ ,  $\phi$ ,  $\theta$ ,  $\nu$  e  $k$  são iguais a zero, e com o decorrer do programa, em seus respectivos *loops*, é lhes acrescentado uma parcela infinitesimal, determinada no próprio programa. Somente para o parâmetro  $\theta$  isso não ocorre, conforme discutido mais adiante. A fórmula usada para calcular o *winding number* foi

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \oint_c \frac{h_x dh_y - h_x dh_y}{h_x^2 + h_y^2}, \quad (6.1)$$

com  $h_x$  e  $h_y$  sendo, respectivamente, a parte real e imaginária de  $\det[Q]$ .

A matriz  $Q$  é codificada de acordo com as definições dadas nas Eq. (5.19)-(5.20), com suas entradas dadas pela Eq. (5.9). O determinante  $\det[Q]$  é uma função do segundo grau de  $z = e^{-ik}$ :  $\det[Q] = Az^2 + Bz + C$ , onde podemos obter as expressões de  $A$ ,  $B$  e  $C$  através do programa *Maple*.

Para uma dada escolha de  $\gamma_{eff}$ ,  $\theta$  e  $\phi$  (com os demais parâmetros fixos), o programa faz  $k$  variar em pequenos passos entre  $-\pi$  e  $\pi$  e computa os valores de  $h_x$  e  $h_y$  para cada  $k$ . Os diferenciais  $dh_x$  e  $dh_y$  são calculados como sendo a diferença entre  $h_x$ 's e  $h_y$ 's vizinhos. Agora é possível calcular a contribuição  $\nu_i$  de cada  $k$  da zona de Brillouin para o *winding number*  $\nu$ , onde

$$\nu_i = \frac{1}{2\pi} \frac{h_x dh_y - h_y dh_x}{h_x^2 + h_y^2}. \quad (6.2)$$

Após isso, essa contribuição é guardada em  $\nu$  e então é acrescentado um  $dk$  no valor de  $k$  e o processo volta ao começo, esse *loop* continuará até  $k = \pi$ . Quando isso ocorrer, toda zona de Brillouin já contribuiu, então já obtemos o *winding number* para aqueles valores de  $\gamma_{eff}$ ,  $\phi$  e  $\theta$ . Esses valores são gravados em um arquivo de saída, e depois disso, é acrescentado um  $d\gamma_{eff}$  ao valor atual de  $\gamma_{eff}$ , e então o procedimento volta ao começo e é calculado o *winding number* para esse novo conjunto de parâmetros. Isso ocorre até que  $\gamma_{eff} = 20$ . Após isso, é acrescentado um infinitesimal em  $\phi$ , o valor de  $\gamma_{eff}$  retorna ao valor inicial e todo procedimento anterior é repetido até  $\phi = 0.5$ . Finalmente, é acrescentado um valor infinitesimal em  $\theta$  e ocorre todo processo anterior até que  $\theta = 0.5$  (porém para  $\theta$  isso não é feito em processos internos do programa, o programa é rodado várias vezes cada um com um valor de  $\theta$  espaçados igualmente, isso faz com que possamos obter o resultado mais rápido, fazendo programas em paralelo). Com isso, foi varrido todo o espaço dos parâmetros, calculado o *winding number* para cada ponto e foram guardados em um arquivo de saída juntamente com seu ponto no espaço tridimensional.

## 6.2 Estrutura crítica

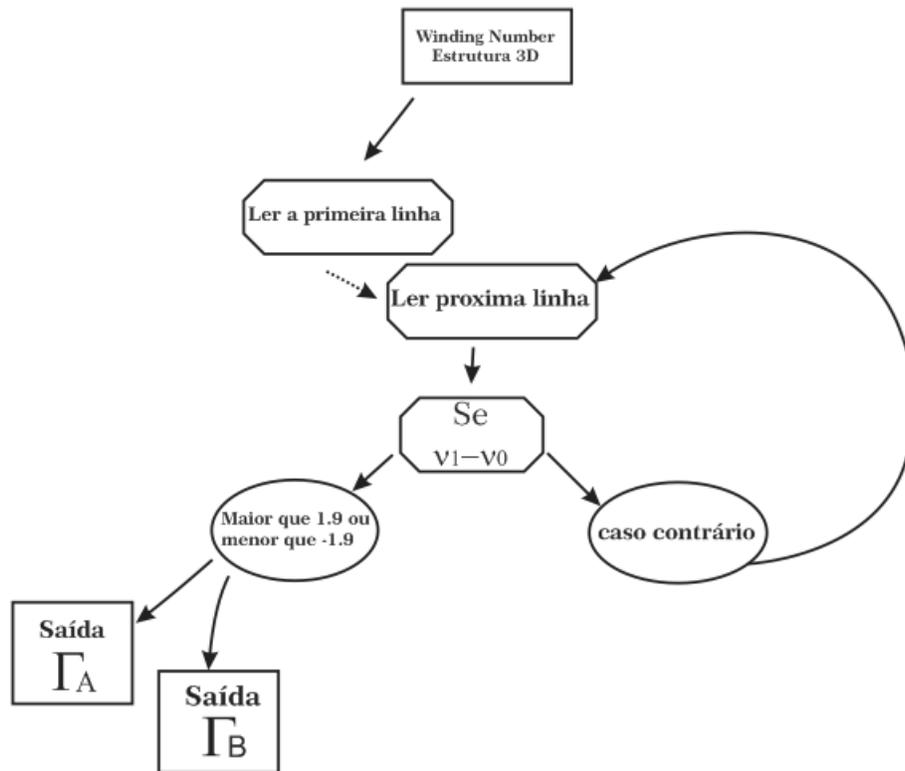


Figura 6.3:

Na Figura 6.3 mostramos como se dá o programa Estrutura Crítica. Inicialmente o programa recebe os dados do *winding number* da estrutura 3D calculados no programa anterior. O primeiro comando é ler a primeira linha, após isso ele lê a próxima. Com os dados reconhecidos, o programa faz uma condição: se a diferença entre o valor do *winding number* da penúltima linha lida e o da última linha for maior que 1.9 ou menor que -1.9 (pontos onde está ocorrendo uma transição de fase) o programa guarda o ponto em que ocorre a transição de fase e retorna a ler a próxima linha do arquivo de dados. Caso contrário, isto é, se a diferença for igual a zero ou um valor pequeno o programa continua nesse processo, lendo as próximas linhas e comparando com a anterior a ela. Ao final, o programa terá guardado todos os pontos de transição de fase. Os arquivos de saída são as superfícies críticas  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$ .

Tendo os dados das estruturas críticas  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$ , faremos o cálculo do *winding number* para esses pontos com transição de fase, utilizando o fundamento teórico encontrado na seção 4.3. Porém para isso é necessário saber qual o  $k$  crítico, que seria o valor de  $k$  onde o gap se fecha. O fluxograma da Figura 6.4 mostra como foi possível obtê-los para os diferentes pontos das estruturas críticas.

Os dados de entrada podem ser tanto da estrutura  $\Gamma_A$  quanto da  $\Gamma_B$ . O programa lê a primeira do programa e, com  $k = -\pi$  inicialmente, ele calcula o valor dos elementos da matriz de Bloch. Após isso, o programa diagonaliza essa a correspondente matriz de Bloch através do programa que será apresentado na Seção 6.4, obtendo as autoenergias  $E_n(k)$ , onde  $n$  é o número da banda. Então, é feita duas condições, se  $E_5 < LUE$  o  $k$  é guardado no  $k_{critLUE}$  e o de LUE é atualizado como sendo o valor de  $E_5(k)$ . LUE significa *Lower Unoccupied Energy* e é o nível de energia mais baixo não ocupado, lembrando que a energia de Fermi foi fixada em  $E = 0$  e que  $E_5$  é a banda logo acima do nível de Fermi. A outra condição é, se  $E_4 > HOE$  o  $k$  é guardado no  $k_{critHOE}$  e o de HOE é atualizado como sendo o valor de  $E_4(k)$ . HOE significa *Higher Occupied Energy* e é o nível de energia mais alto ocupado, sendo  $E_4$  a banda logo abaixo do nível de Fermi.

Depois disso, o programa acrescenta um valor infinitesimal à  $k$  e realiza o mesmo processo mostrado até aqui e o loop se encerra quando  $k = \pi$ . No fim desse loop, os valores de HOE e LUE são as energias mais próximas de zero, e  $k_{critHOE}$  e  $k_{critLUE}$  são os valores de  $k$  onde o gap se fecha. Os valores de  $k_{critHOE}$  e  $k_{critLUE}$  são gravados em uma arquivo de saída, junto ao ponto do espaço dos parâmetros que estava sendo utilizado. Após isso, o programa lê outro conjunto de parâmetros que estão no arquivo da estrutura crítica, fazendo novamente esse processo de encontrar os  $k$ 's críticos, até que leia todas os dados presentes nesse arquivo.

Com os dados obtidos, é possível fazer o cálculo do *winding number* para as estruturas críticas.

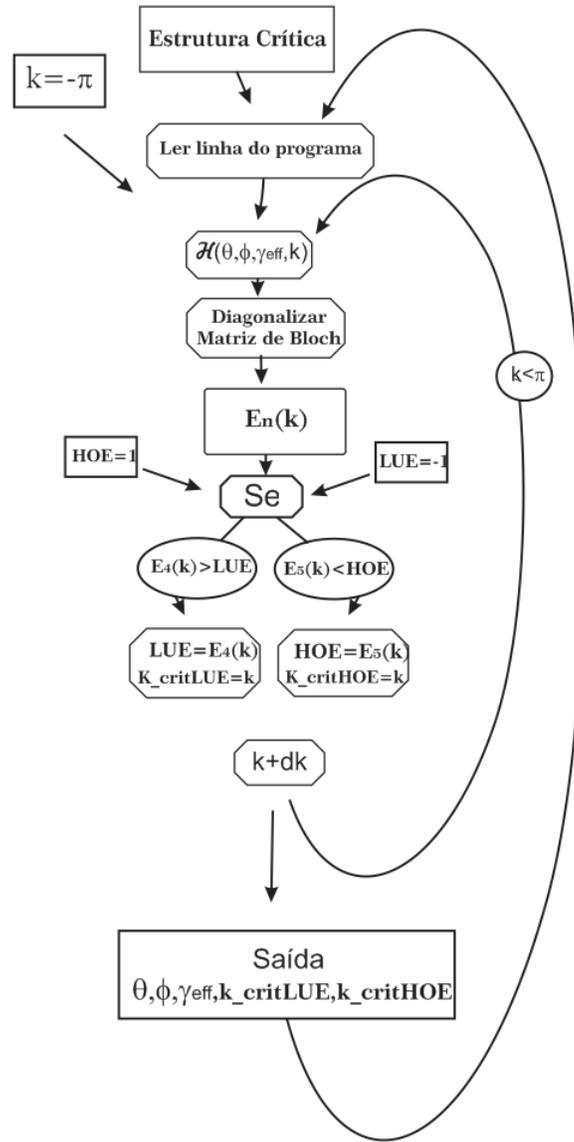


Figura 6.4:

### 6.3 *Winding number* modificado

Os comandos dessa etapa são bem parecidos com a que calcula o *winding number* com gap, porém possui algumas diferenças que são essenciais para sua realização. O cálculo do *winding number* modificado possui 2 programas, um para o *winding number* em torno do  $k < 0$  onde o gap se fecha e outro para o  $k > 0$ . Os programas lêem a primeira linha, contendo o ponto do espaço dos parâmetros juntamente com os  $k$ 's. Após isso, é feita uma parametrização em  $k$  e  $\lambda$ , sendo que  $\lambda = \theta, \phi, \gamma_{eff}$ , dependendo de qual superfície crítica estamos realizando o cálculo.

A parametrização aqui utilizada consiste em circular os pontos de transição de fase. Sendo assim, a parametrização utilizada foi

$$\begin{aligned} k &= \pi k_0 \pm \pi R|k_0|\sin(p) \\ \lambda &= \pi \lambda_0 + \pi R\lambda_0\cos(p) \end{aligned} \tag{6.3}$$

onde  $R$  é o raio da parametrização,  $k_0$  e  $\lambda_0$  são o  $k$  crítico e o parâmetro crítico, respectivamente.

O valor de  $p$  varia de 0 à  $2\pi$  pela soma de infinitesimais  $dp$ . Para cada um desses valores de  $p$  é calculado os elementos da matriz  $Q$ , os  $h_x, h_y, dh_x, dh_y$  e uma contribuição  $\nu_i$  para  $\nu$ . Somando todas as contribuições  $\nu_i$  para cada  $p$ , conseguimos o valor de  $\nu$  para o primeiro conjunto de parâmetros. Esses valores são guardados no arquivo de saída. Logo após é lido outro conjunto de parâmetros e é realizado novamente todo o processo anterior, até obtermos o *winding number* modificado de cada ponto das estruturas críticas. A Fig. 6.5 ilustra o processo descrito acima.

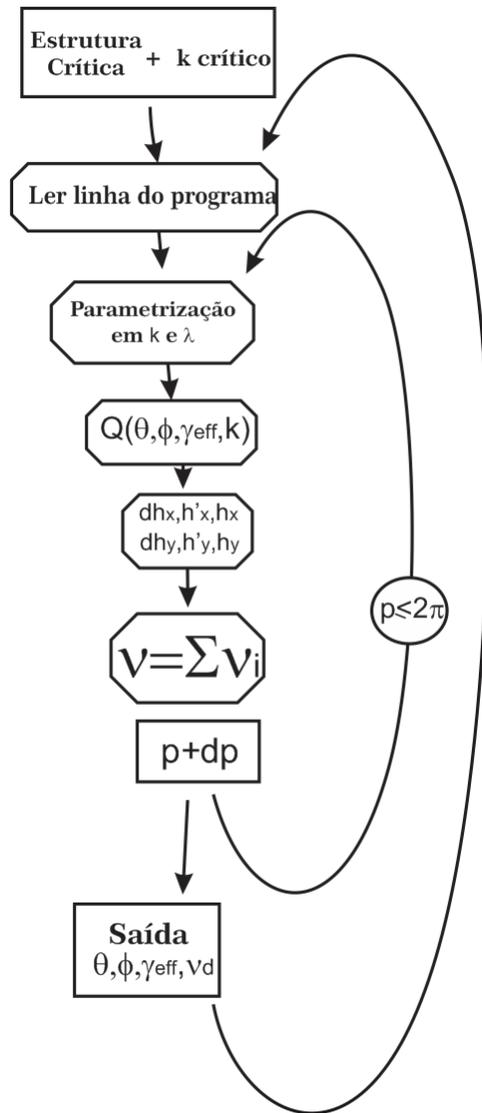


Figura 6.5:

Até o momento obtemos: o *winding number* dos pontos do espaço 3D e o *winding number* para as regiões de transição de fase, as estruturas críticas  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$ . Porém ainda existe uma região crítica a ser investigada, que é a intersecção entre  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$ . Essa intersecção possui uma multicriticalidade,

pois além de ser uma região que caracteriza a transição de fase de materiais com topologia determinada pelo *winding number* usual, ainda corresponde a uma transição de fase nas próprias estruturas críticas.

Para obter os dados referentes a essa intersecção de estruturas críticas, foi utilizado os dados vindos do último programa, referentes a  $\Gamma_A$ , no programa Estrutura Crítica, descrito no fluxograma da Fig. 6.3. Após isso os dados obtidos serão usados para calcular os pontos da zona de Brillouin em que o gap se fecha, no programa *k*-crítico, descrito na figura 6.4. De posse desses dados, podemos usar o programa descrito na Fig. 6.5 que calcula o *winding number* dessa região.

Uma informação interessante de se destacar é que cada estrutura crítica possui um parâmetro  $\lambda$  específico para realizar a parametrização do cálculo do *winding number*. Para  $\Gamma_A$  é  $\phi$ ,  $\Gamma_B$ ,  $\theta$ , e para linha multicrítica é  $\gamma_{eff}$ .

## 6.4 Espectro

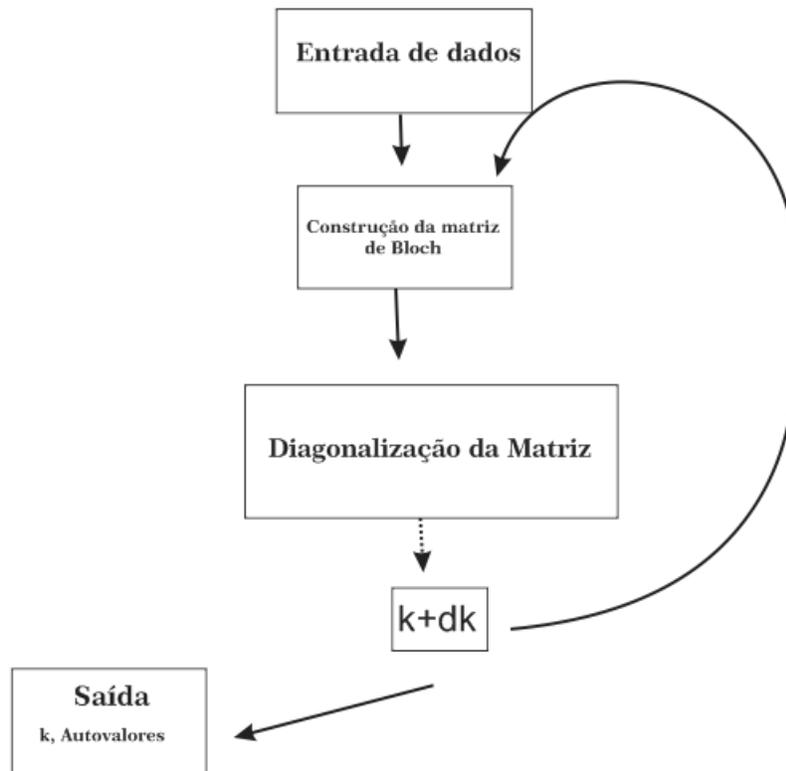


Figura 6.6: Etapas do programa que obtem a estrutura de bandas do modelo.

A Fig.(6.6) mostra as etapas do programa utilizado com o fim de obter o espectro para diferentes pontos do espaço dos parâmetros. Os dados de entrada correspondem ao ponto do espaço dos parâmetros,  $(\theta, \gamma_{eff}, \phi)$ , que será utilizado nas entradas da matriz de Bloch, com  $k = -\pi$  inicialmente. Após construir a matriz, ela é diagonalizada usando o pacote *mkl\_lapacke.h*, que realiza operações algébricas sobre matrizes. Esse processo é feito para os valores entre  $-\pi$  e  $\pi$ , para cada um desses *loops* é guardado o valor de  $k$  e os autovalores correspondentes. Ao fim desse processo, foi contruída as estrutura de bandas para aquele determinado ponto do espaço dos parâmetros.

# Capítulo 7

## Resultados

### 7.1 Diagrama de fases, espectros e cargas topológicas dos espectros nas transições de fase

A Figura 7.1 mostra o resultado numérico de  $\nu$  e  $\nu_d$  em três dimensões do espaço dos parâmetros  $(\gamma_{eff}, \theta, \phi)$ , do modelo dado pelas Eqs.(5.18)-(5.20), com parâmetros dados em (5.9), tomando  $q = 1/r = 1/4$ ,  $t = \gamma'_R = 1$  e  $t' = \gamma'_D = 0$ . Esta última escolha de parâmetros - que anula a modulação sobre o *hopping* e sobre a interação de Dresselhaus - se justifica pois, como veremos, o diagrama de fases já apresenta uma estrutura não-trivial com a modulação de apenas um dos parâmetros (aqui  $\gamma'_R$ ). Além do mais, temos também que a interação de Rashba é, experimentalmente falando, a única significativamente sensível a um campo elétrico externo, como vimos no Cap. 5. Para melhor visualização, contraímos  $\theta, \phi \in [0, \pi/2]$  pelo diagrama de fase ser periódico com período  $\pi/2$  ao longo desses eixos.

Podemos ver que o diagrama de fase consiste de fases com gap topológicas e triviais - as regiões com pontos (vazias) onde  $\nu = 2(\nu = 0)$  - separadas por superfícies críticas sem gap colorida em laranja (azul) se  $\nu_d = +2(\nu_d = -2)$ . A intersecção das superfícies críticas é identificada pela cor amarela e possui  $\nu_d = 0$ .

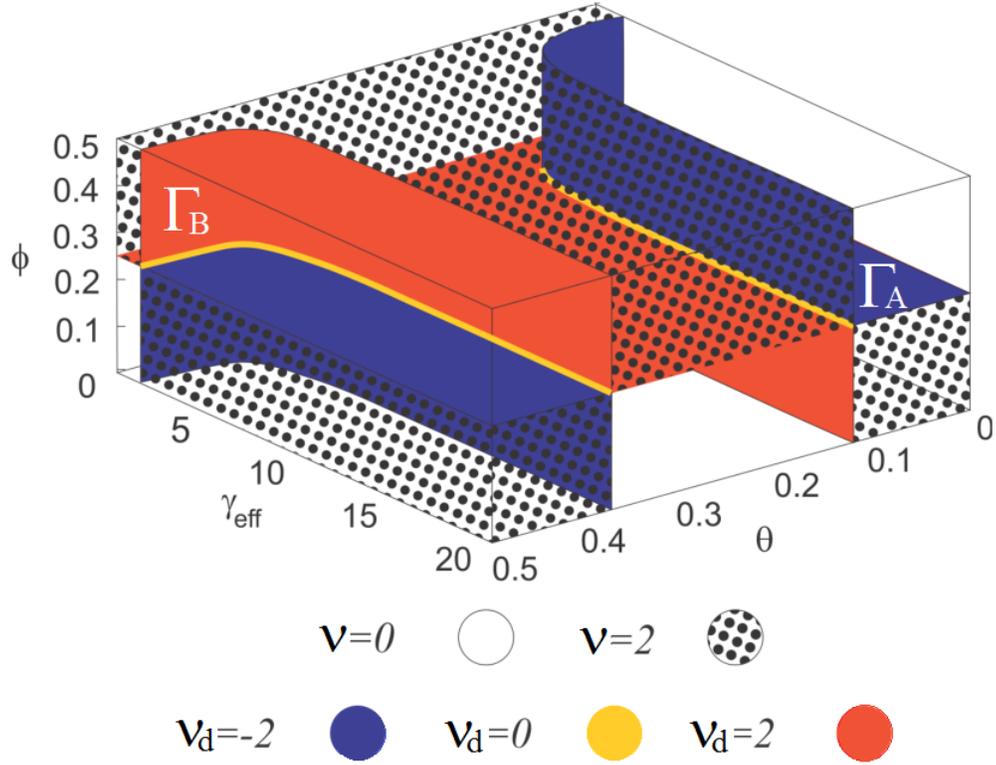


Figura 7.1: Diagrama de fase em três dimensões  $(\gamma_{eff}, \theta, \phi)$  do espaço dos parâmetros, que mostra os valores  $\nu$  do *winding number* das fases com gap (isolantes) e os valores  $\nu_d$  do *winding number modificado* sobre as superfícies críticas onde o gap se fecha.

Temos dois tipos de superfície crítica: o plano  $\Gamma_A$  definido por  $\phi = \pi/4$  e a superfície  $\Gamma_B$  que é curvada em  $\gamma_{eff}$  pequeno e se torna plana para  $\gamma_{eff}$  grande. Vemos que, de fato,  $\nu_d$  marca a diferença entre os *winding numbers*  $\nu$  das fases com gap em ambos os lados de  $\Gamma_A$  (considerando a transição baixo-cima) e  $\Gamma_B$  (considerando a transição esquerda-direita), como visto na seção 4.3. Os valores diferentes de zero de  $\nu_d$  significam que  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$  *hospedam fases topológicas sem gap separando isolantes topologicamente distintos*.

A Fig. 7.2 mostra a estrutura de bandas de *bulk* dos isolantes trivial (a) e topológico (b) para escolhas de parâmetros dentro da fase com  $\nu = 0$

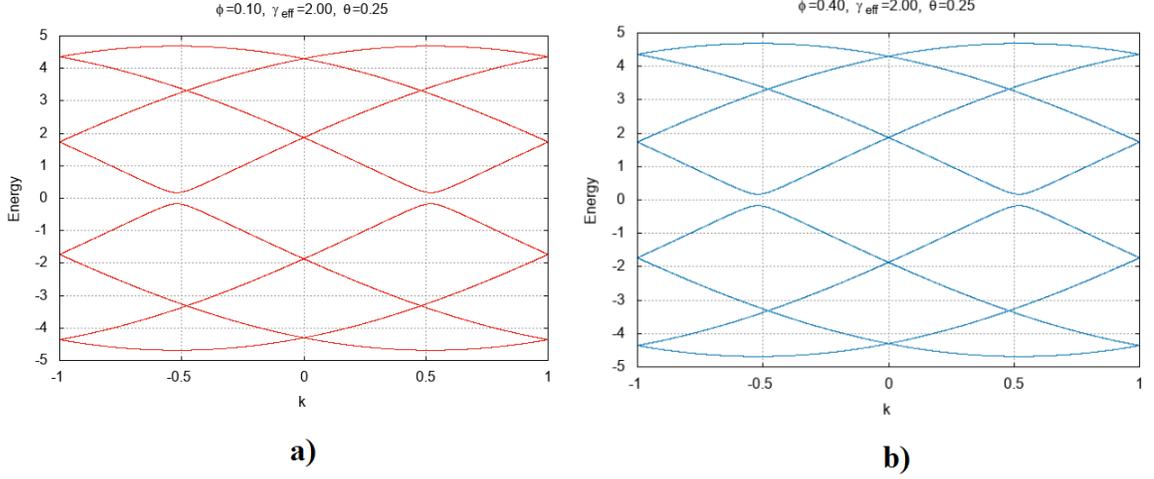


Figura 7.2: Estruturas de bandas com gap dos pontos do espaço dos parâmetros especificados acima de cada um dos gráficos, sendo que a) é referente a uma fase isolante trivial e b) isolante topológico

e  $\nu = 2$ , respectivamente. Os espectros são idênticos já que, exceto pelo valor de  $\nu$ , os dois isolantes são indistinguíveis no *bulk*: ambos possuem oito bandas ( $r = 4$ ) simétricas em relação a  $E = 0$  e  $k = 0$ , conforme exigido pelas simetrias do modelo. Os espectros apresentam um gap em torno da energia de Fermi  $E = 0$ . A diferença está no winding number do bulk que implica no aparecimento de estados de borda topológicos quando  $\nu = 2$ . Começamos a investigar os estados de borda obtidos através da diagonalização do modelo sem condições periódicas de contorno (cadeia com bordas) e obtivemos resultados preliminares que confirmam a existência de estados robustos, fortemente localizados nas pontas da cadeia e cuja energia se encontra dentro do gap isolante quando  $\nu = 2$ .

O fechamento do gap em  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$  acontece através da formação de um par de degenerescências das bandas com energia zero (nós) na zona de Brillouin simetricamente localizadas em relação a  $k = 0$ , com dispersão linear em volta dos nós, como descrito na Figura 7.3. O espectro a (b) corresponde a escolha dos parâmetros em um trecho de  $\Gamma_B$  ( $\Gamma_A$ ) com  $\nu_d = +2$  ( $\nu_d = -2$ ). Importante, os *winding numbers* locais  $\nu_d^i$  em ambos os lados da zona de Brillouin contribuem igualmente:  $\nu_d^\pm = +1(-1)$ , para ambos os nós, esquerdo e direito, quando  $\nu_d = +2(-2)$ . Isto significa que os nós espectrais podem

ser vistos como fontes de monopolos topológicos de cargas iguais, conforme ilustrado na Fig. 7.3.

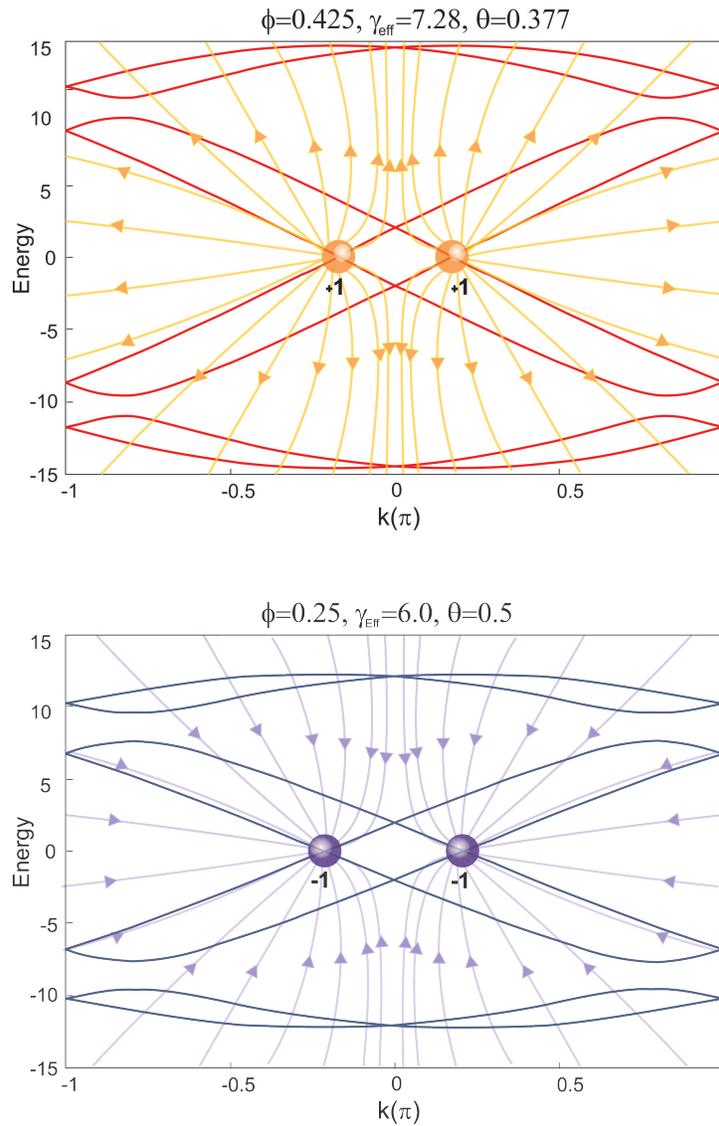
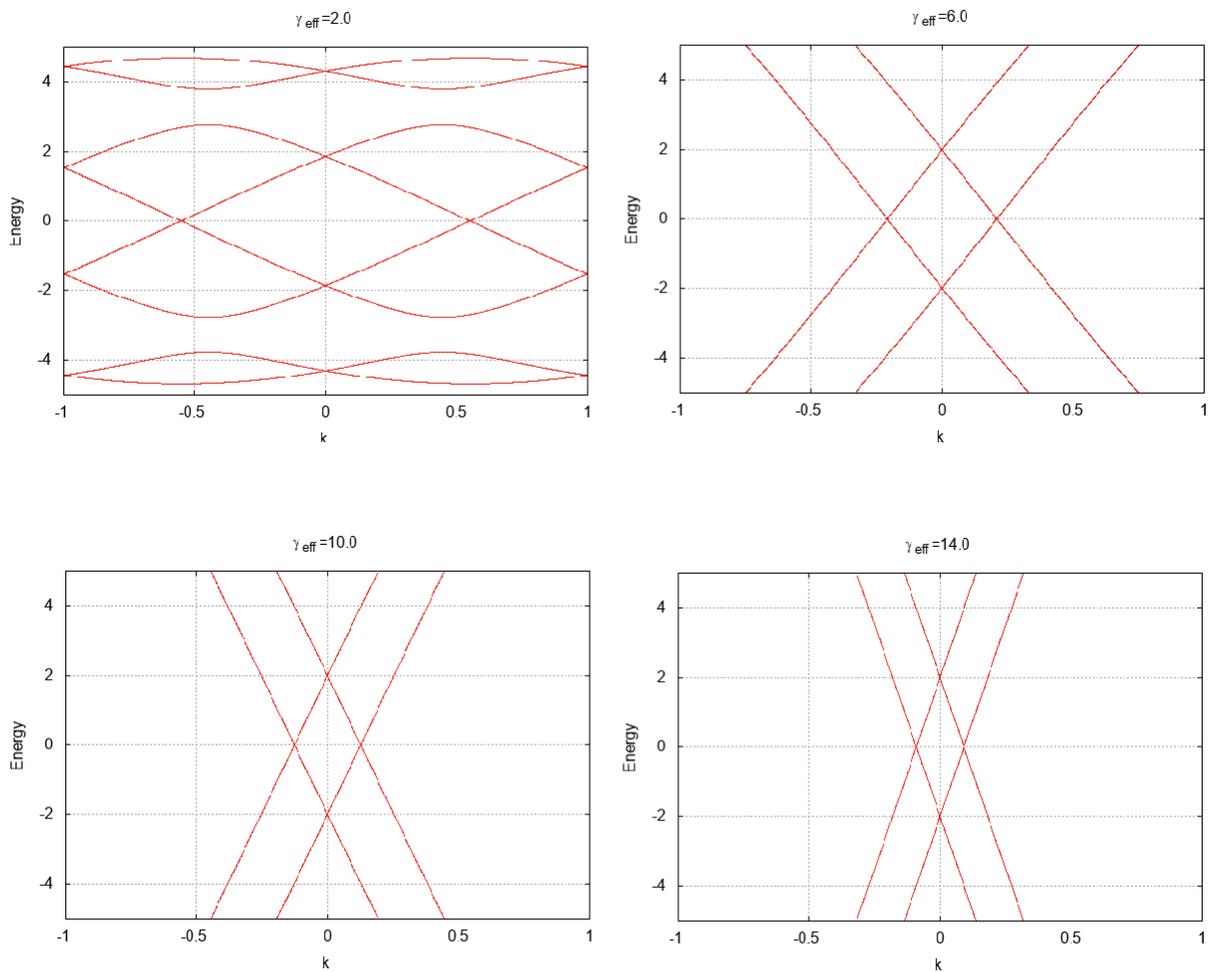


Figura 7.3: Estruturas de bandas para pontos críticos com *winding number*  $\nu = +2$ , bandas vermelhas, e  $\nu = -2$ , bandas azuis, destacando as cargas topológicas nos nós com suas cargas especificadas abaixo de cada nó

Uma variação de  $\gamma_{\text{eff}}$  ou de  $\theta$  em  $\Gamma_A$  ou de  $\phi$  em  $\Gamma_B$  faz com que os

correspondentes nós espectrais se movam simetricamente em relação a  $k = 0$  ao longo da zona de Brillouin, se aproximando assintoticamente um do outro em  $k = 0, \pm\pi$ . A Fig. 7.4 mostra esse comportamento para  $\gamma_{eff}$  variando, com  $\theta = 0.35$  e  $\phi = 0.25$  (nós de  $\Gamma_A$ ).



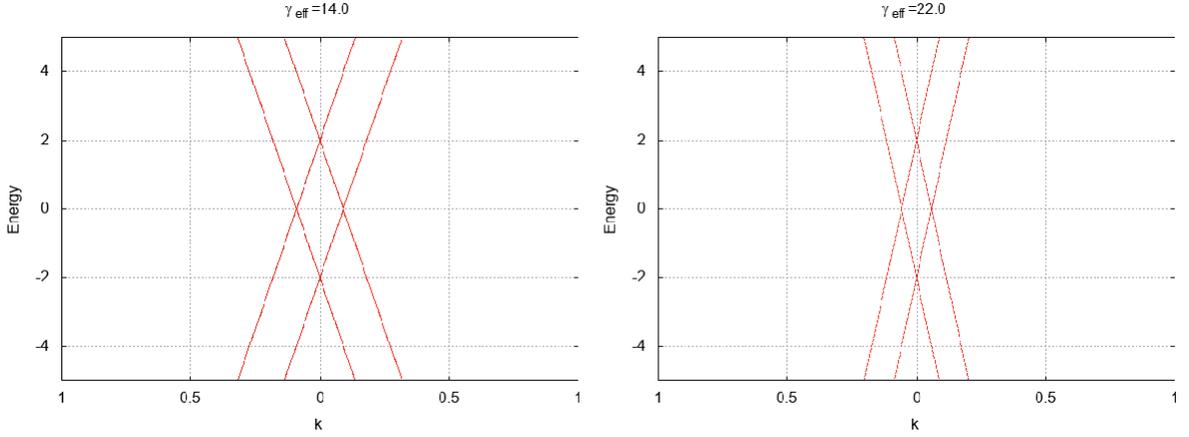


Figura 7.4: Movimentação dos nós no eixo  $k$  quando fazemos  $\gamma_{\text{eff}}$  aumentar. Sendo que esse movimento, como pode ser visto, é amortecido devido a repulsão das cargas.

Este movimento dos nós na zona de Brillouin é semelhante ao dos conhecidos cones de Weyl de semi-metais topológicos em 3D [10]. Porém, diferente do que ocorre com cones de Weyl, os nós de  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$  possuem cargas topológicas iguais e, portanto, não se fundem em  $k = 0, \pm\pi$ , aniquilando suas cargas e abrindo um gap.

Porém, mesmo seus espectros e características topológicas sendo similares, os nós de  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$  tem origens diferentes. Em  $\Gamma_A$  o modelo definido pelas Eqs. (5.18)-(5.20),(5.9) adquire, além das simetrias quiral e de reversão temporal, uma simetria de espelho simórfica, mas com o ponto de reflexão deslocado do centro da célula unitária. O efeito dessa simetria adicional foi investigado em [28] onde foi demonstrado que nós do tipo  $\Gamma_A$  são *móveis, mas não removíveis*. Existe, na área de pesquisa em semimetais topológicos, um entendimento de que degenerescências desse tipo necessitam de uma simetria não-simórfica no material<sup>1</sup>. Os nós de  $\Gamma_A$  constituem, portanto, o primeiro exemplo de degenerescências móveis, mas não removíveis, na ausência de uma simetria

<sup>1</sup>Uma simetria espacial é dita não-simórfica quando envolve uma translação não primitiva, ou seja, de uma fração da célula unitária do cristal; caso contrário, a simetria é simórfica. As simetrias não-simórficas mais conhecidas são *glide plane* - reflexão em torno de um plano seguida de uma translação não-primitiva paralela ao plano de reflexão - e *screw axis* - rotação em torno de um eixo seguida de uma translação não-primitiva paralela ao eixo de rotação.

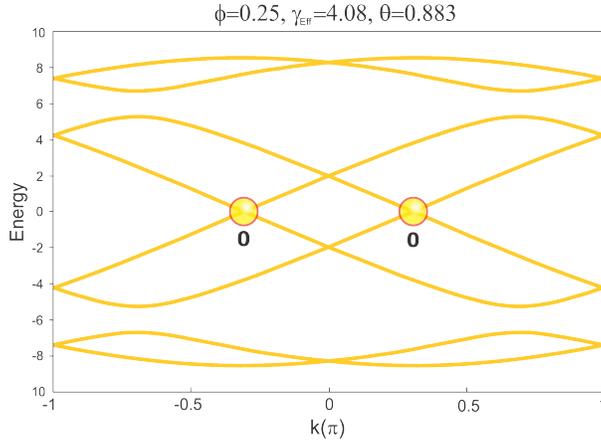


Figura 7.5: Estrutura de bandas para um ponto crítico com *winding number*  $\nu = 0$ , destacando as cargas topológicas nos nós com suas cargas especificadas abaixo de cada nó

não-simórfica. Esse resultado pode abrir um novo caminho na busca de semimetais topológicos em cristais simórficos e, importante para aplicações, na presença de interações spin-órbita fortes.

Diferente dos nós de  $\Gamma_A$ , os nós de  $\Gamma_B$  são *acidentais*, eles surgem apenas por uma sintonização dos parâmetros, sem nenhuma simetria extra associado à  $\Gamma_B$ . Essa distinção fica evidente quando as degenerescências são perturbadas pela mudança de um único parâmetro do Hamiltoniano. Como vimos, os nós de  $\Gamma_A$  não podem ser desfeitos por variações individuais em  $\gamma_{eff}$  ou  $\theta$ . Diferentemente, para um ponto inicialmente em  $\Gamma_B$ , o nó espectral imediatamente se desfaz quando  $\gamma_{eff}$  ou  $\theta$  é variado individualmente.

Indo para as intersecções de  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$ , o cancelamento do  $\nu_d$  ao longo dessas linhas (ver Fig. (7.1)) significa que elas constituem fases sem gap topologicamente triviais, que separam fases topológicas sem gap de cargas opostas. Os *winding numbers* locais  $\nu_d^\pm = 0$  para ambos nós direito e esquerdo, correspondendo a nós espectrais com carga topológica zero na zona de Brillouin como ilustrado na Fig.7.5

## 7.2 Transições de fases

Iremos agora analisar as possíveis transições de fase no diagrama da Figura 7.1. Podemos notar que existem dois tipos de transição de fase, sendo

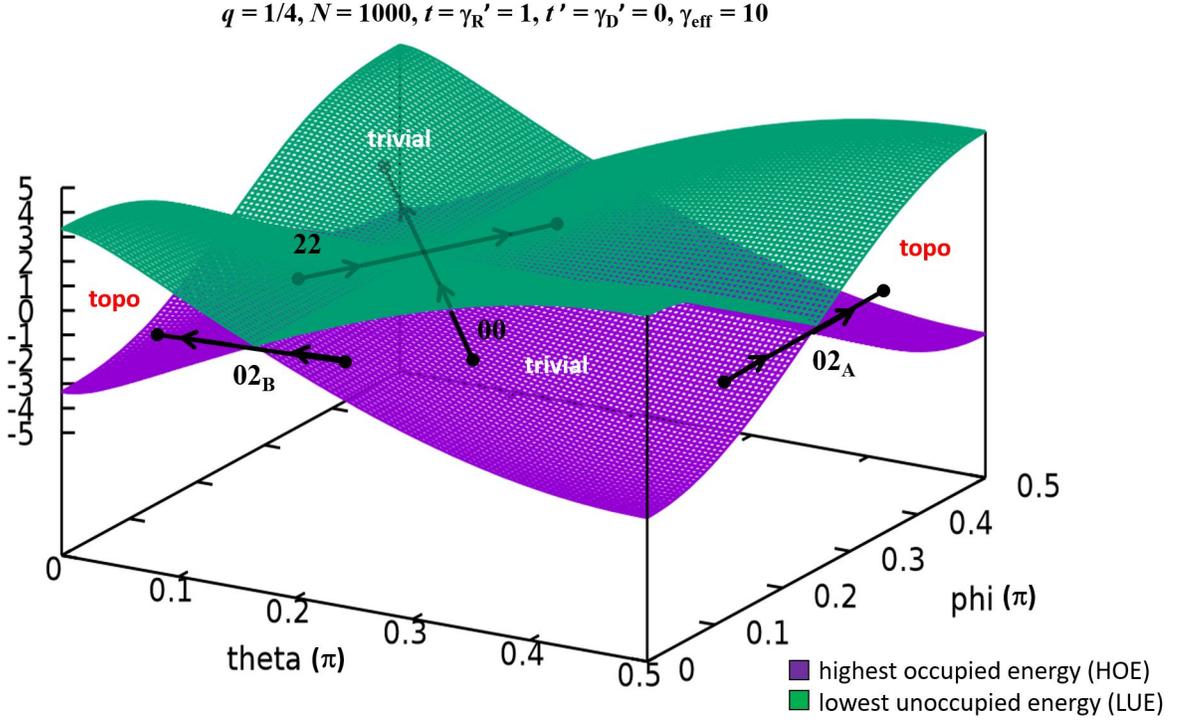


Figura 7.6:

estas: (i) transições de isolante trivial para isolante topológico(02) através de  $\Gamma_A$  ou através de  $\Gamma_B$ , cruzando algum ponto sem gap com  $\nu_d$  diferente de zero e (ii) transições de isolante topológico para topológico(22) e trivial para trivial(00) cruzando um ponto de  $\nu_d$  nulo, na intersecção entre  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$ .

A fim de caracterizar essas transições, começamos a analisar como o gap se fecha em torno do ponto crítico. Considerando, como antes, a cadeia em meio preenchimento (energia de Fermi em  $E = 0$ ), a Fig. 7.6 mostra a maior autoenergia ocupada (highest occupied eigenenergy - HOE) e a menor autoenergia desocupada (lowest unoccupied eigenenergy - LUE) no plano  $\gamma_{eff}$  versus  $\theta$ . As possíveis transições estão indicadas na figura. Vemos que o fechamento do gap é acentuado para as transições do tipo 02, com um toque linear entre HOE e LUE sugerindo uma transição de primeira ordem. O perfil de fechamento do gap para as transições 00 e 22 não é claro através da Fig. 7.6.

Recentemente, obtivemos resultados que mostram que o perfil do gap é

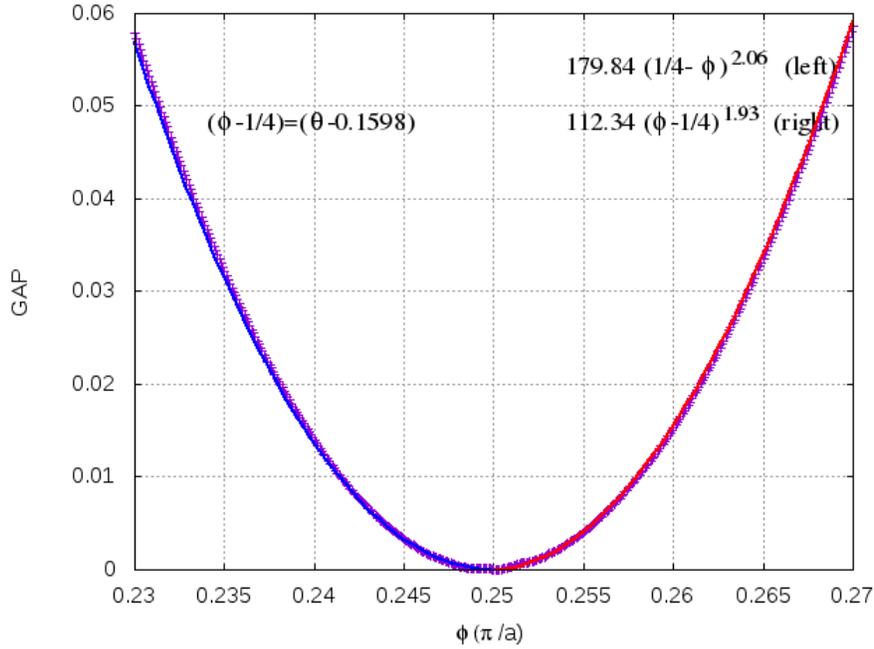


Figura 7.7: Comportamento do gap quando fazemos uma transição 22.

parabólico em torno do ponto de transição de fase do tipo 00 e 22, sugerindo uma transição de segunda ordem conectando fases aparentemente idênticas. A Fig. 7.7 mostra o gap em função de  $\phi$  ao longo de uma transição 22. Vemos que o gap se anula em  $\phi = 0.25$  (e  $\theta = 0.1598$ ), com um perfil parabólico. As curvas ajustadas à esquerda e à direita de  $\phi = 0.25$  possuem expoentes 2.06 e 1.93, respectivamente.

Com esse resultado preliminar, especulamos que essa transição (ao que parece de segunda ordem) pode ser devida a uma simetria escondida no modelo que é alterada nas transições 00 e 22 ou à uma topologia além da classificação de Altland-Zirnbauer que, portanto, não pode ser capturada pelo *winding number* usual da classe CII. Ou ainda, podemos ter encontrado um tipo peculiar de fechamento de gap “por aproximação” no qual a geometria do diagrama de fases obriga as bandas a se tocarem, sem que isso indique uma mudança de fase. Essas possibilidades serão investigadas na sequência do presente trabalho.

# Capítulo 8

## Conclusão

O trabalho possibilitou o estudo do sistema composto de um fio quântico submetido a um arranjo de eletrodos distribuídos periodicamente ao longo do fio. Foram consideradas as interações spin-órbita de Rashba e Dresselhaus. Utilizando o formalismo de *tight-binding*, foi construída a matriz de Bloch que contém as propriedades desse modelo e temos que é uma matriz que possui termos de *hopping* com spin conservado e com inversão de spin.

Analisando a matriz de Bloch do sistema, constatamos que as regras de simetria obedecidas por ela classificam-na na classe de simetria CII da classificação de Altland-Zirnbauer, classe esta que possui as fases com gap caracterizadas pelo *winding number*. Como é de nosso interesse estudar as propriedades dos pontos de transição de fase foi definido um *winding number* modificado que nos dá informações sobre as propriedades topológicas das regiões sem gap, que são  $\Gamma_A$ ,  $\Gamma_B$  e a linha multicrítica.

Para construir o diagrama de fase do sistema, foi realizado tratamento computacional desenvolvido na linguagem de programação *C* que calcula o invariante topológico das regiões com e sem gap.

Foi obtido o diagrama de fase para todo o espaço dos parâmetros  $(\phi, \theta, \gamma_{eff})$ . Nele contém os valores do *winding number* nas regiões com gap - com  $\nu = 0$  indicando um isolante trivial e  $\nu = 2$  para um isolante topológico - e o valor do *winding number* para regiões sem gap -  $\nu_d = \pm 2$  sobre  $\Gamma_A$  e sobre  $\Gamma_B$  e  $\nu_d = 0$  ao longo da linha multicrítica definida pela interseção entre  $\Gamma_A$  e  $\Gamma_B$ .

Foi observado que as degenerescências em zero, os nós, se comportam como cargas topológicas de mesmo sinal se repelindo em pontos como  $k = 0, \pm\pi$ . O movimento simétrico dos nós na zona de Brillouin os faz semelhantes aos cones de Weyl de semimetais topológicos em três dimensões. Porém as

cargas topológicas de mesmo sinal impedem que, no modelo estudado, os nós espectrais se aniquilem, como ocorre no caso de Weyl.

Ainda, no plano  $\Gamma_A$ , o modelo adquire uma simetria de espelho que faz com que ali os nós sejam *móveis, mas não removíveis*, constituindo as primeiras degenerescências desse tipo na ausência de uma simetria não-simórfica. Esse achado é relevante para investigações de semi-metais topológicos em cristais simórficos.

As transições trivial-trivial e topológico-topológico, que acontecem ao cruzarmos a linha multicrítica, sugerem uma transição de segunda ordem, porém sem nenhuma mudança aparente na fase do material. Esse resultado preliminar contraria o paradigma que liga o fechamento do gap a uma transição de fase.

Como projetos para o futuro, pretendemos investigar os estados de borda e suas propriedades. A respeito do tratamento computacional, queremos entender o por quê a parametrização de cada estrutura crítica se dá apenas por um parâmetro, não podendo ser usado em outra estrutura. Investigaremos se existe algum conteúdo físico nesse fato. Outro projeto é seria investigar melhor a dinâmica da transição de fase trivial-trivial e topológica-topológica que ocorre cruzando a linha multicrítica.

# Capítulo 9

## Referências

1. Landau, L.D; Lifshitz, E.M. *Statistical Physics*. Oxford, UK: Pergamon. 1980.
2. Klitzing, K.v; Dorda, G; Pepper, M. *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance*. Phys. Rev. Lett. 45:494–97; doi:10.1103/PhysRevLett.45.494. 1980.
3. Tsui D.C; Stormer, H.L; Gossard .A.C. *Two-Dimensional Magneto-transport in the Extreme Quantum Limit*. Phys. Rev. Lett. 48:1559–62; doi:10.1103/PhysRevLett.48.1559. 1982.
4. Thouless, D.J; Kohmoto, M; Nightingale .M.P; den Nijs, M. *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*. Phys. Rev. Lett. 49:405–8; doi:10.1103/PhysRevLett.49.405. 1982.
5. Bernevig B.A; Hughes T.L; Zhang S.C. *Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells* Science 314:1757–61; doi:10.1126/science.1133734. 2006.
6. Qi, Xiao-Liang; Zhang, Shou-Cheng. *Topological insulators and superconductors*. *Rev. Mod. Phys, American*. Physical Society, v. 83,p. 1057–1110. 2011.
7. Malard, Mariana; Grusha, Inna; Japaridze, G. I; Johannesson, Henrik. *Modulated Rashba interaction in a quantum wire: Spin and charge dynamics*. Phys. Rev. B 84, 075466. 2011.
8. Ryu, Shinsei; Schnyder, Andreas; Furusaki, Akira; Ludwig, Andreas. *Topological insulators and superconductors: ten-fold way and dimensional hierarchy*. New Journal of Physics, arXiv:0912.2157 [cond-mat.mes-hall]. 2010.
9. Chen, Y.L; et al. *Experimental realization of a three-dimensional*

- topological insulator*. Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. Science 325(5937):178–181. 2009.
10. Lu, Ling ; Fu, Liang ; Joannopoulos, John; Soljacic, Marin. *Weyl points and line nodes in 3D photonic crystals*. IEEE. 2013.
  11. OMAR, M. Ali; *Elementary Solid State Physics*. Canadá: Addison-Wesley, 1975.
  12. J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*. Rev. ed. Los Angeles: Addison-Wesley, 1985.
  13. Arhen, George B; Weber, Hans J; Harris, Frank E. *Mathematical methods for physicists: a comprehensive guide*. Academic press. 2011.
  14. Li, Linhu; Yang, Chao; Chen, Shu. *Winding numbers of phase transition points for one-dimensional topological systems*. arXiv:1508.01680 [cond-mat.str-el]. EPL, 112 10004. 2015.
  15. E. I. Rashba, Sov. Phys. Solid State 2, 1109. 1960; Y. A. Bychkov; E. I. Rashba, J. Phys. C 17, 6039. 1984.
  16. Dresselhaus, G. *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures* Phys. Rev. 100, 580. 1955.
  17. Dyakonov, M. I; Kachorovskii, V. Y. Sov. Phys. Semicond. 20,110. 1986; E. I. Rashba and E. Ya. Sherman, Phys. Lett. A 129,175. 1988.
  18. Sherman, E. Ya. *Minimum of spin-orbit coupling in two-dimensional structures*. Phys. Rev. B 67, 161303(R). 2003.
  19. Golub, L. E; Ivchenko, E. L. *Spin splitting in symmetrical SiGe quantum wells* Phys. Rev. B 69, 115333. 2004.
  20. Ekenberg, U; Gvozdic, D. M. *Quantum Wells: Theory, Fabrication and Applications*. A. Ruyter and H. Mahoney. Nova Science. 2010.
  21. Grundler, D. *Large Rashba splitting in InAs quantum wells due to electron wave function penetration into the barrier layers*. Phys. Rev. Lett. 84, 6074. 2000.
  22. Silsbee, R. H. *Spin-orbit induced coupling of charge current and spin polarization*. J. Phys. Condens. Matter 16, R179. 2004.
  23. Moroz, A. V; Barnes, C. H. W. Phys. Rev. B 60, 14272 (1999); 61, R2464 (2000); Andrada e Silva, E. A; La Rocca, G. C; *ibid.* 67, 165318 (2003); S. L. Erlingsson, J. C. Egues, and D. Loss, Phys. Status Solidi C 3, 4317 (2006); C. A. Perroni, D. Bercioux, V. Marigliano Ramaglia, and V. Cataudella, J. Phys. Condens. Matter 19, 186227 (2007).
  24. W. Hausler, Phys. Rev. B 63, 121310(R) (2001); M. Governale and U. Zulicke, *ibid.* 66, 073311 (2002); Solid State Commun. 131, 581 (2004); A. V. Moroz, K. V. Samokhin, and C. H. W. Barnes, Phys. Rev. B 62, 16900

- (2000); A. De Martino and R. Egger, *Europhys. Lett.* 56, 570 (2001); A. Iucci, *Phys. Rev. B* 68, 075107 (2003); W. Hausler, *ibid.* 70, 115313. 2004.
25. Gritsev, V. et al. Competing effects of interactions and spin-orbit coupling in a quantum wire. *Phys. Rev. Lett.* 94, 137207. 2005.
26. Schulz, A; De Martino, A; Ingenhoven, P; Egger, R. *Low-energy theory and RKKY interaction for interacting quantum wires with Rashba spin-orbit coupling.* *Phys. Rev. B* 79, 205432. 2009.
27. Malard, Mariana; Grusha, Inna; Japaridze, G. I; Johannesson, Henrik. *Modulated Rashba interaction in a quantum wire: Spin and charge dynamics.* 10.1103/PhysRevB.84.075466. 2011.
28. Malard, Mariana; Brito, Paulo Eduardo de; Ostlund, Stellan ; Johannesson, Henrik . *Movable but not removable band degeneracies in a symmetric crystal.* *Phys. Rev. B* 98, 165127. 2018.