

RAFAEL DOS REIS BARRETO

FRACIONALIZAÇÃO EM GRAFENO E ISOLANTES TOPOLÓGICOS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GÉRIAS - BRASIL
2019

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

B273f Barreto, Rafael dos Reis, 1993-
2019 Fracionalização em grafeno e isolantes topológicos / Rafael
dos Reis Barreto. – Viçosa, MG, 2019.
x, 72 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Orientador: Jakson Miranda Fonseca.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.
Referências bibliográficas: f. 65-72.

1. Superfícies (Física). 2. Grafeno. 3. Isolantes topológicos.
4. Matéria condensada. I. Universidade Federal de Viçosa.
Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física.
II. Título.

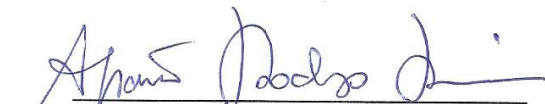
CDD 22. ed. 530.417

RAFAEL DOS REIS BARRETO


FRACIONALIZAÇÃO EM GRAFENO E ISOLANTES TOPOLÓGICOS


Dissertação apresentada à
Universidade Federal de Viçosa, como
parte das exigências do Programa de
Pós-Graduação em Física, para
obtenção do título de *Magister
Scientiae*.

APROVADA: 18 de junho de 2019.


Afranio Rodrigues Pereira


Joaquim Bonfim Santos Mendes


José Arnaldo Redinz


Jakson Miranda Fonseca
(Orientador)

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001

Sumário

Lista de Figuras	iv
Resumo	ix
Abstract	x
1 Introdução	1
2 Grafeno	12
3 Isolantes Topológicos	17
3.1 Topologia	17
3.2 Isolantes	18
3.3 Efeito Hall Quântico (EHQ)	19
3.4 Efeito Hall Quântico de Spin ou Isolantes Topológicos Bidimensionais (EHQS)	22
3.5 Isolantes Topológicos Tridimensionais	27
4 Fracionalização no Poliacetileno e Grafeno	30
4.1 Fracionalização de elétrons	30
4.2 Poliacetileno e a instabilidade de Peierls	31
4.3 Fracionalização em uma rede quadrada	34
4.4 Distorção de Kekulé no grafeno	38
5 Fracionalização em Isolantes Topológicos	45
5.1 Fracionalização em Isolantes Topológicos Bidimensionais	45
5.2 Fracionalização em Isolantes Topológicos Tridimensionais	49
5.2.1 Estados meio do gap para potencial químico nulo	50
5.2.2 Carga fracionária para $\mu = 0$	52
5.2.3 Estados meio do gap para potencial químico não nulo	53
5.2.4 Carga fracionaria para $\mu \neq 0$	58
5.3 Capacitor de placas paralelas com um dielétrico de IT-3D	60
6 Conclusão	63
7 Referências Bibliográficas	65

Lista de Figuras

1	Representação dos diferentes estados isolantes. Em a) elétrons confinados em um isolante (esquerda) devido a um <i>gap</i> de energia (direita) separando a banda de valência (ocupada) da banda de condução (vazia). Em b) estado Hall Quântico sobre a ação de um campo magnético B , possui um <i>gap</i> de energia no interior mas permite condução de corrente elétrica unidimensional nas bordas. Em c) o efeito Hall Quântico de <i>Spin</i> com um <i>gap</i> de energia no interior, mas permite condução em estados controlados pelo <i>spin</i> nas bordas. Fonte: Referência [1].	5
2	As camadas superiores e inferiores são de $CdTe$, enquanto que a camada do meio é de $HgTe$. Os estados de borda <i>spin</i> polarizados se propagam nas extremidades das interfaces $HgTe/CdTe$. Fonte: Referência [2]	6
3	A figura mostra a dispersão de energia, através do ARPES, do primeiro IT-3D. A liga $Bi_{0.9}Sb_{0.1}$ descoberta em 2008 por D. Hsieh, seria um isolante topológico devido aos cinco cones de Dirac que aparecem na medição ARPES. Isto indica uma superfície topologicamente protegida, porém esta liga apresenta um <i>gap</i> de energia pequeno $\approx 30meV$. Fonte: Referência [3].	7
4	(a) Estados de borda em um IT-3D. Os <i>spins</i> dos estados metálicos são polarizados perpendicularmente à direção do momento. (b) Gap (Δ) aberto na superfície por uma impureza magnética. Os cones de Dirac são separados pela impureza, o que permite a sondagem por transporte eletrônico dos estados de borda. Fonte: Referência [4].	7
5	Cadeia de carbono e a dispersão de energia linearizada próximo a energia de Fermi. Fonte: Referência [5].	8
6	Perfil do fônon variando com a posição. O ponto simétrico estacionário, $\phi = 0$, é instável. Configurações estáveis estão localizadas em $\phi = m $ (A) e $\phi = - m $ (B). Fonte: Referência [5].	9
7	Os arranjos triangulares A e B que compõem a rede hexagonal do grafeno. Fonte: Referência [6].	10
8	a) Rede hexagonal do grafeno, esferas azuis referentes à sub-rede A e esferas amarelas referentes à sub-rede B, assim como os vetores que ligam os átomos a sub-rede vizinha e a mesma sub-rede. b) Pontos independentes da primeira zona de Brillouin K e K' . Fonte: Referência [7].	12
9	Estrutura de bandas de energia do grafeno mostrando as bandas de valência e condução. A ampliação em torno de um dos pontos onde as bandas se tocam mostram o espectro cônico linear sem <i>gap</i> em torno dessa região. Fonte: Referência [7].	13

10	Comparação entre uma xícara e uma rosquinha como sendo iguais em linguagem topológica. Fonte: Referência [8].	17
11	Comparação entre as bandas de energia do isolante, semicondutor e metal. No isolante e no semicondutor existe um <i>gap</i> de energia que separa a banda de valência e de condução porém, o <i>gap</i> do semicondutor é pequeno. Já no metal não existe esse <i>gap</i> e os elétrons da banda de valência podem ir para a de condução sem impedimentos. Fonte: Referência [9].	18
12	Gráfico da variação da resistência em relação ao campo magnético externo mostrando as planícies de condutividade no MOSFET. Fonte: Referência [10].	20
13	Órbita dos elétrons é quebrada na superfície dando origem a corrente na borda. Fonte: Referência [11].	21
14	a) Comparação entre um isolante comum e o efeito hall quântico, proteção topológica dos estados de borda devido à mudança do invariante. b) Espectro de energia do efeito hall quântico. Fonte: Referência [12].	21
15	Pares de Kramers de uma rede quadrada . Fonte: Referência [13].	23
16	Dispersão eletrônica entre dois pontos na borda do isolante topológico que possuem degenerescência de Kramers. a) O número de estados de superfície cruzando a energia de Fermi entre os pontos $\Gamma_a = 0$ e $\Gamma_b = \pi/a$ é par e em b) é ímpar. Fonte: Referência [14].	24
17	Estados de borda do EHQS. Em (a) interface entre um EHQS que possui $\nu = 1$ e o isolante convencional $\nu = 0$. Existem estados de borda metálicos que são <i>spins</i> polarizados, isto é, partículas com diferentes componentes up e down do <i>spin</i> se propagam em sentidos opostos sendo os dois “ canais ” de propagação conectados pela simetria de reversão temporal. Em (b) um esquema da estrutura de bandas onde o <i>gap</i> do <i>bulk</i> do material e os estados metálicos da borda <i>spins</i> polarizados são mostrados. Fonte: Referência [14].	25
18	Espalhamento dos elétrons na borda do EHQS. O espalhamento pode ocorrer de duas formas distintas fazendo o <i>spin</i> dos portadores girar no sentido horário $-\pi$ ou no sentido anti horário π . Os dois caminhos diferem por uma rotação do <i>spin</i> do elétron por 2π e interferem destrutivamente. Fonte: Referência [11].	26
19	Dispersão da energia nas proximidades do ponto Γ , polarização e textura helical dos <i>spins</i> na superfície dos IT's-3D. (a): Dispersão de um composto isolante trivial para fins de comparação. (b)-(d): Espectro de energia dos IT's-3D da segunda geração. Apenas um cone de Dirac. (e): Polarização dos <i>spins</i> no topo da superfície de um IT-3D As cores vermelha e azul denotam as energias e <i>gap</i> no <i>bulk</i> respectivamente. Fonte: Referência [11]	27

20	Em (a) é mostrada a superfície de um IT-3D no espaço real e em (b) no espaço recíproco onde os quatro pontos $\Gamma_{1,2,3,4}$ que possuem degenerescência de Krammers, são mostrados. Note que em (b) a superfície de Fermi engloba apenas um desses pontos e o respectivo cone de Dirac também é mostrado. Em (c) e (d) são mostrados a estrutura de bandas entre os dois pontos que apresentam degenerescência de Krammers, em (c) um isolante trivial e em (d) um IT-3D. Fonte: Referência [15].	28
21	Arranjo linear de carbono (poliacetileno). Fonte: Referência [16].	31
22	Em 0 os átomos estão igualmente espaçados por 1Å entre eles, esta configuração é instável. A e B mostra a instabilidade de Peierls ajustando a distância entre os átomos vizinhos em 0.4Å , estas configurações são estáveis. Fonte: Referência [17].	32
23	A densidade de energia V em função do campo escalar ϕ . O ponto simétrico estacionário $\phi = 0$ é instável. Estados estacionários estáveis são encontrados nos pontos $\phi = \phi_0 $ e $\phi = - \phi_0 $. Fonte: Referência [17].	32
24	a) e b) Padrões de ligação química dos estados B e A, c) Dois sólitons inseridos no estado A. Fonte: Referência [16].	33
25	a) Exemplo de um rede quadrada onde os átomos de carbono estão igualmente espaçados nos vértices do quadrado. O termo t é relativo ao acoplamento entre os átomos. b) Espectro de energia na primeira zona de Brillouin, a zona em vermelho é a banda de valência e a zona transparente é a banda de condução. Fonte: Referência [18].	35
26	a) Rede quadrada com acoplamento diferente entre os primeiros vizinhos caracterizados pelos termos t e t' . b) Espectro de energia na primeira zona de Brillouin, a zona em vermelho é a banda de valência e a zona transparente é a banda de condução. Note que existem <i>gaps</i> de energias em ambas as bandas devido aos acoplamentos serem diferentes. Fonte: Referência [18].	35
27	a) Rede quadrada sujeita a um campo magnético transversal gerando um fluxo magnético π em cada célula unitária. b) Rede quadrada sujeita a um campo magnético transversal gerando um fluxo magnético π em cada célula unitária e acoplamentos distintos entre os átomos vizinhos. c) Espectro de energia na primeira zona de Brillouin de a), a zona em vermelho é a banda de valência e a zona transparente é a banda de condução, existem quatro pontos de Dirac d)Espectro de energia de b), existem <i>gaps</i> entre a banda de valência e de condução. Fonte: Referência [18].	36

28	Diferentes formas de acoplamento. a) O acoplamento ocorre com o vizinho da direita. b) O acoplamento ocorre com o vizinho de baixo c) O acoplamento ocorre com o vizinho de cima. d) O acoplamento ocorre com o vizinho da esquerda. Fonte: Referência [18].	37
29	O conjunto dos quatro domínios foram um vórtice em torno de uma região central referente ao estado isolado no meio do <i>gap</i> . Fonte: Referência [18]. .	37
30	a) O perfil da densidade fermiônica de um vórtice com carga 1 em uma rede quadrada de tamanho 144x144 sítios. b) O número fermiônico como função da variável $\mu_s(\infty)/\Delta(\infty)$ na presença de um vórtice com carga 1 ou com a adição de um vórtice com carga 1/2. O potencial químico μ_s toma valores: $0.01t$ (Preto), $0.03t$ (vermelho), $0.06t$ (verde) e $0.1t$ (azul) Fonte: Referência [19].	38
31	Esquematização da distorção de Kekulé, as linhas grossas e finas representam o forte e fraco acoplamento entre os átomos, respectivamente. Fonte: Referência [20].	39
32	A primeira zona de Brillouin é mostrada com os cones de Dirac nos pontos K e K' desta zona, o vetor \mathbf{G} conecta os pontos e o termo de massa $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0(\mathbf{r})$ da distorção de Kekulé abre o <i>gap</i> de energia. Fonte: Referência [21].	40
33	Fracionalização da carga Q em unidade da carga do elétron e em função da variável que relaciona o potencial químico $\mu_s(\infty)$ e o <i>gap</i> de energia Δ_0 da distorção de Kekulé na presença de um campo magnético $B = 20T$. Os círculos fechados representam um único vórtice $n \in Z$ e os círculos abertos representam semi inteiros $n \in Q$. Este modelo de rede consiste em 113x80 sítios. As linhas sólidas são resultados analíticos para quando $B = 0$. Fonte: Referência [22].	43
34	a)Esquematização do sistema composto por duas camadas de grafeno separadas por uma barreira dielétrica sobre a ação de um campo magnético. b) O espectro perto do ponto de Dirac onde a linha tracejada (verde) é referente ao sistema sem interação e a linha sólida (vermelho) alinha o caso de interação com os pontos deslocados devido ao potencial externo (V) e o <i>gap</i> de energia Δ . c) Densidade de um sistema uniforme. d) A carga axial ligada a um único vórtice em função de V e Δ_0 . O correspondente perfil da densidade para $V/T = 0.4$ e $\Delta_0/t = 0.3$ no (e) sistema uniforme e (f) sistema com um vórtice no centro. Em todos os <i>plots</i> , cada camada tem 39x22 sítios. A grade (e) e (f) estão no centro dos triângulos. Fonte: Referência [23].	44

35	Esquema de um IT-2D que possui em sua região mais central uma espessura menor do que nos extremos. Os estados com <i>spin</i> up estão em vermelho e os estados com <i>spin</i> down estão em azul. Os pares de <i>spin</i> dos estados de borda são acoplados com os da outra borda via tunelamento. Fonte: Referência [24].	46
36	Esquematização da carga fracionaria com a parede de domínio energética. As flechas azuis mostram a configuração da parede de domínio magnético e a linha roxa mostra o perfil do <i>kink</i> (note a semelhança com o fracionamento do poliacetileno). A curva vermelha mostra a distribuição da densidade de carga. Fonte: Adaptado da referência [11].	48
37	Espectro de energia das superfícies do IT-3D com alteração no nível de Fermi devido ao potencial externo.	59
38	Esquematização do capacitor de placas paralelas com dielétrico sendo um filme fino de IT-3D. Fonte: Referência [25].	61

Resumo

BARRETO, Rafael dos Reis, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, junho de 2019. **Fracionalização em Grafeno e Isolantes Topológicos.** Orientador: Jakson Miranda Fonseca. Coorientador: Daniel Heber Theodoro Franco.

Nesta dissertação será estudado o fenômeno de fracionalização no grafeno, nos estados de borda do isolante topológico bidimensional (IT-2D) e nos estados de superfície dos isolantes topológicos tridimensionais (IT-3D). Inicialmente será feita uma revisão sobre o grafeno de forma analítica para posteriormente discutir sobre a fracionalização nesse material. Em seguida será feito um estudo sobre isolantes topológicos bidimensionais e tridimensionais. Discutiremos inicialmente sobre isolantes comuns e o Efeito Hall Quântico, pois, através destes podemos ter um entendimento melhor sobre os isolantes topológicos. Após essa primeira parte de revisão do grafeno e isolantes topológicos, será discutido sobre o fenômeno de fracionalização. Entender o que é este fenômeno, quais suas consequências e requisitos para que um sistema possa exibir a fracionalização. Posteriormente discutiremos sobre o primeiro material a exibir esse fenômeno, o poliacetileno. Por meio da instabilidade de Peierls no poliacetileno é possível a existência de estados fundamentais degenerados com energia nula que carregam uma fração da carga do elétron. Antes de discutir sobre a fracionalização no grafeno, vamos discutir um pouco sobre a fracionalização em um sistema bidimensional de átomos de carbono com célula unitária quadrada, onde cada átomo ocupa um vértice. Esse sistema é uma evolução natural do poliacetileno para duas dimensões e através dele entenderemos um pouco o fenômeno de fracionalização em sistemas bidimensionais. Como uma extensão disso, o grafeno também é uma rede bidimensional de átomos de carbono, entretanto, em formato hexagonal e através da distorção de Kekulé pode-se obter estados fundamentais degenerados com energia nula que comportam vórtices e estes podem ter carga ligada fracionária. Posteriormente vamos discutir sobre a fracionalização nos isolantes topológicos. No caso da fracionalização dos estados de borda do IT-2D, os estados de borda opostos podem ser acoplados por meio de um tunelamento e a ação de um campo magnético externo, desta forma é possível a existência de estados ligados e isolados no meio do gap com energia nula que podem carregar carga fracionária. Em seguida mostraremos que a fracionalização nos estados de superfície do IT-3D pode ocorrer quando acoplamos duas superfícies de um mesmo IT-3D. Utilizaremos a ideia do acoplamento feito no caso do isolante topológico bidimensional e a distorção de Kekulé no grafeno como base para descrever de forma analítica este fenômeno no isolante topológico tridimensional.

Abstract

BARRETO, Rafael dos Reis, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, June, 2019. **Fractionalization in Graphene and Topological Insulators.** Adviser: Jakson Miranda Fonseca. Co-adviser: Daniel Heber Theodoro Franco.

In this dissertation will be studied the phenomenon of fractionalization in the graphene, in the edge states of the two-dimensional topological insulation (IT-2D) and in the surface states of the insulation three-dimensional topologies (IT-3D). Initially a graphene review will be done analytically for graphene to discuss later on the fractionalisation in this material. Next, a study on topological insulation two-dimensional and three-dimensional. We will initially discuss common insulation and the Hall Effect Quantum, therefore, through these we can have a better understanding about the topological insulators. After this first part of the review of graphene and topological insulators, it will be discussed phenomena of fractionalisation. Understand what this phenomenon is, what its consequences and requirements for that a system can exhibit fractionalization. Later we will discuss about the first material to exhibit this phenomenon, polyacetylene. Through Peierls instability in polyacetylene it is the existence of degenerate fundamental states with zero energy that carry a fraction of the charge of the electron. Before discussing the fractionalisation in graphene, let's discuss a little about the fractionation in a two-dimensional system of carbon atoms with square unit cell, where each atom occupies a vertex. This system is a natural evolution of polyacetylene for two dimensions and through it we will understand the phenomena of fractionalization in two-dimensional. As an extension of this, graphene is also a two-dimensional network of carbon atoms, however, in hexagonal format and through the distortion of Kekulé one can obtain fundamental states degenerate molecules with null energy that contain vortices and these can have fractional bound charge. Later we will discuss about the fractionalisation in topological insulators. In case of the IT-2D edge states, the opposite edge states can be coupled by of a tunneling and the action of an external magnetic field, in this way it is possible the existence of connected states and isolated in the middle of the gap with zero energy that can carry fractional load. Next we show that the fractionalisation in the surface states of IT-3D can occur when we couple two surfaces of the same IT-3D. We will use the idea made in the case of two-dimensional topological insulation and the Kekulé distortion in graphene as a basis for analytic this phenomenon in the topological three-dimensional insulator.

1 Introdução

Nesta dissertação iremos discutir sobre a fracionalização em grafeno e isolantes topológicos, mas por quê isto é interessante? O grafeno é um material revolucionário e forte candidato a ser o principal material usado no futuro, mas porquê? Ele possui alta condutividade elétrica, os elétrons se movem através do grafeno com praticamente nenhuma resistência e aparentemente sem massa, isso faz com ele transporte eletricidade de forma mais rápida, eficiente e precisa do que qualquer outro material. Apesar de ser fino e leve, o grafeno é um material extremamente forte, é duzentas vezes mais forte que o aço, sendo o elemento mais rígido que já se conheceu, superando até mesmo o diamante. Para se ter uma ideia, uma folha de grafeno de 1 metro quadrado pesa apenas 0,0077 gramas, porém, pode suportar o peso de até 4 kg. Mesmo sendo muito rígido, o grafeno é um material com grande elasticidade, se esticando até 25 por cento a mais do seu comprimento. O grafeno também é o material mais impermeável já descoberto, e mesmo os átomos de hélio não podem passar por ele. Ele é o primeiro material 2D do mundo e em 2004 os pesquisadores Prof. Andre Geim e o Prof. Konstantin conseguiram extrair o grafeno a partir do grafite dando a eles o prêmio Nobel. Por ser um material bidimensional, deve abrir as portas para novos campos experimentais que antes não poderiam ser utilizados. Mais adiante iremos discutir de forma analítica o grafeno [26], [27], [28], [29].

De forma surpreendente, logo após a obtenção do grafeno, físicos teóricos da Universidade da Pensilvânia, Kane e Mele, estudando as propriedades eletrônicas deste material, descobriram que poderia haver outra classe de estrutura eletrônica de materiais, os denominados Isolantes Topológicos [30], mas o que eles têm de especial?

Para simplificar, tomemos o caso de duas grandes classes de materiais do ponto de vista eletrônico. Conhecemos os isolantes, que são materiais que não conduzem eletricidade, como a borracha e os metais condutores de eletricidade, como o cobre. Estes são estados eletrônicos da matéria bem compreendidos pela comunidade científica e bem fundamentados pela mecânica quântica. Kane e Mele mostraram que há outra ordem não trivial da matéria, diferente dos já conhecidos metais e isolantes, os fascinantes Isolantes Topológicos. Esses são materiais que apresentam o *bulk* (a parte central ou interna do material) isolante e a superfície (ou borda) metálica, mas por que topológicos? Topologia é um ramo da matemática que estuda a estrutura dos objetos sem se preocupar com seu tamanho ou formato. Considere um *donut* o qual podemos lentamente ir deformando-o até ficar em outro formato, por exemplo, um cubo com o furo no meio, podemos até modelar em uma caneca. Também podemos pegar uma bola de futebol e deformá-la e transformá-la em um cubo. Entretanto, nunca poderemos fazer nosso *donut* virar uma bola e vice-versa. Dizemos que eles apresentam diferentes classes topológicas. O mesmo acontece com nossos materiais isolantes, existem os materiais que são isolantes normais e os isolantes topológicos, ou seja, podemos perturbá-lo com campo elétrico, pressão (etc),

e nunca um isolante topológico se transformará em um isolante convencional [30], [31].

E qual a consequência dessa invariância quando um isolante topológico fica em contato com um isolante convencional? Para bola de futebol virar um *donut* teríamos que destruí-la fazendo um buraco. No caso dos isolantes haverá na região de contato um estado metálico. E pode-se mostrar que esse estado metálico não pode ser destruído e nem modificado [31]. Se considerarmos, por exemplo, um isolante topológico bidimensional, a sua borda será metálica e os elétrons conduzem sem serem importunados por perturbações (exceto magnéticas) podendo a corrente elétrica fluir sem dissipação. Ou seja, podemos dizer que isolantes topológicos são materiais que apresentam suas superfícies metálicas protegidas e são isolantes no *bulk*. Esses isolantes são a grande coqueluche na física e ciência de materiais e tem atraído grande atenção da comunidade devido seu potencial para aplicações em nano-dispositivos, spintrônica e computação quântica. Certamente esses materiais promoverão grandes mudanças em novos nanodispositivos, portanto, o impacto do conhecimento científico e tecnológico de novos materiais é determinante para o desenvolvimento de novos dispositivos. Assim como o grafeno, os isolantes topológicos também renderam um prêmio Nobel, em 2016 foi conferido a David Thouless (University of Washington), Duncan Haldane (Princeton University) e Michael Kosterlitz (Brown University) por suas várias e importantes contribuições no estudo de transições de fase topológicas e, mais genericamente, na descoberta de fases topológicas da matéria [32].

Por que estudar fracionalização? Em 1887 o físico Joseph John Thomson descobre o elétron, um dos minúsculos componentes do átomo. Nos cem anos seguintes, numerosos experimentos convencem a maioria dos cientistas de que o elétron não é formado por partes menores nem possui nenhuma estrutura interna. O homem parecia ter chegado a uma partícula realmente elementar, uma fronteira final na divisão e subdivisão da matéria. O americano Robert Laughlin (Stanford University), o alemão Horst Störmer (Columbia University) e o chinês Daniel Tsui (Princeton University), mostraram que, em temperaturas próximas do zero absoluto (cerca de $-273^{\circ}C$) e na presença de campos magnéticos extremamente poderosos, os elétrons deixam de atuar como partículas individuais e passam a ter um comportamento coletivo, formando um fluido quântico que apresenta as mais estranhas características. Uma delas é a aparente presença de "quase-partículas", como fragmentos de elétrons com cargas iguais a um terço ($1/3$), um quinto ($1/5$) ou frações ainda menores da carga do elétron. Graça a essa descoberta, em 1998 foram premiados com o prêmio Nobel [33], [34], [35].

Outra motivação interessante é que através da fracionalização podemos tentar verificar pela primeira vez a existência de férmions de majorana. Férmions de majorana é uma quasipartícula que também é sua própria antipartícula. Quando um elétron (carga negativa) encontra um pósitron (sua antipartícula, com carga positiva), eles se aniquilam mutuamente com a emissão de um *flash* de raios gama. Tudo no nosso universo é feito de matéria, estrelas, planetas, nós. Desde o início do século 20, no entanto, os físicos

sabem que cada partícula de matéria tem a sua antipartícula, que é idêntica à sua contraparte, mas tem uma carga oposta. Em 1937, o físico Ettore Majorana pensou: “E se uma partícula tivesse carga nula?” e a resposta que ele encontrou foi que esta partícula seria sua própria anti-partícula, e elas não se aniquilariam ao contato, porque qualquer uma delas seria ao mesmo tempo, a partícula e a anti- partícula [36], [37].

Muitos físicos acreditam que os férmions de majorana podem ser encontrados em sistemas de estado sólido, pois, nos materiais condutores de eletricidade, existe um análogo da antimatéria: os elétrons (negativos) e as lacunas (positivas), um desaparecendo ao se encontrar com o outro, ou seja, assim como partículas e antipartículas não podem coexistir, elétrons e lacunas também não. Veremos que a fracionalização pode gerar estados localizados e isolados fundamentais com energia nula, o que dá um background favorável para a existência de férmions de majorana nesses estados. Além do interesse da física fundamental, os férmions de Majorana têm grande utilidade na computação quântica, pois, quando dois férmions de Majorana são movimentados um em relação ao outro, cada um deles mantém a memória da sua posição anterior e isto permitiria a construção de computadores quânticos extraordinariamente estáveis e praticamente imunes à influência externa [36], [37]. Outros cientistas apontam para a importância dos férmions de Majorana na escala cosmológica: eles acreditam que eles possam ser o constituinte fundamental da matéria escura, uma matéria que é detectada apenas por seus efeitos gravitacionais, mas que ninguém sabe ainda do que se trata. A observação agora relatada dos férmions de Majorana foi indireta e, portanto, não totalmente conclusiva, embora otimizações no experimento - como a redução da temperatura do semicondutor - possam gerar resultados mais precisos e práticos no futuro. Assim, estudar fracionalização pode ser a chave para tentar desvendar o mistério por trás dos férmions de majorana. Das três partes que compõe essa dissertação, todas elas: grafeno, isolantes topológicos e fracionalização, resultaram em prêmios Nobel e todas fazem parte de um futuro promissor tanto para a área teórica, quanto experimental e aplicações [37].

Vamos agora à uma análise mais aprofundada sobre as discussões feitas anteriormente. No ano de 1879, Edwin Hall mostrou que um campo magnético altera a distribuição de carga em um condutor, ou seja, o campo magnético atua sobre os portadores de carga que trafegam no condutor e, além disso foi possível determinar o sinal dos portadores de carga [38]. Mais de 100 anos depois, em 1980, von Klitzing e colaboradores, estudando em baixas temperaturas a interface entre dois semicondutores sob a influência de um forte campo magnético, descobriu-se o Efeito Hall Quântico [39].

Neste efeito, o campo magnético faz com que os elétrons sintam uma força de Lorentz perpendicular ao seu movimento provocando um movimento circular dos elétrons. Este movimento é visto pela mecânica quântica como órbitas com energias quantizadas ou níveis de Landau. Se houver n níveis preenchidos e o resto vazio, obtemos um análogo a bandas de energia com um *gap*, ou seja, os estados eletrônicos no *bulk* tornam-se locali-

zados e idênticos ao de um isolante, porém, na borda existem estados de condução que formam um canal unidimensional. Este efeito leva a condutância Hall quantizada [40]:

$$\sigma_{xy} = \frac{ne^2}{h}, n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1)$$

onde, $e = 1,6 \times 10^{-19}C$, $h = 6,626 \times 10^{-34}Js$.

A maioria dos estados quânticos da matéria condensada são classificados por uma quebra de simetria espontânea. Os diferentes estados da matéria podiam ser entendidos pela quebra de simetria contínua, por exemplo, sólidos cristalinos e magnetos, os quais apresentam uma quebra de simetria translacional e de rotação de *spin*, respectivamente. No Efeito Hall Quântico, não se têm quebra de simetria contínua, mas sim quebra de uma simetria discreta, a simetria sob reversão temporal. Assim o Efeito Hall Quântico foi atribuído à topologia do sistema e não aos seus detalhes geométricos, fazendo com que ele fosse ser o primeiro exemplo de estado quântico da matéria que é topologicamente distinto de todos os outros estados conhecidos da matéria anteriormente [41], [42].

Dois anos após a descoberta do Efeito Hall Quântico, os pesquisadores Thouless, Kohmoto, Nightingale e den Nijs, mostraram que a diferença entre um isolante trivial e o Efeito Hall Quântico era uma questão de topologia. Usando a fórmula de Kubo, notaram que o mesmo n da condutividade Hall é um invariante topológico, sendo este chamado de primeiro número de Chern [43]. Este número pode ser entendido fisicamente em termos da fase de Berry associadas às funções de Bloch. Em uma dimensão o invariante pode ser escrito como [44]:

$$n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} A_n(\vec{k}) dk, \quad (2)$$

onde $A_n(\vec{k}) = -i \langle u_{nk} | \nabla_k | u_{nk} \rangle$ e u_{nk} são as funções de Bloch no espaço recíproco.

No final da década de 1980, Haldane propôs um modelo para uma rede hexagonal sem *spin*, para o Efeito Hall Quântico Inteiro sem que aja a quebra da simetria de reversão temporal. Ele propôs que o Efeito Hall Quântico seria possível ser nulo sem uma quebra na simetria de reversão temporal com um fluxo total na célula unitária, mas com dois fluxos em sentidos opostos, de forma que cada sub-rede sente um campo magnético em um sentido [45].

A partir desta descoberta, os pesquisadores se questionaram se haveriam outros estados topológicos da matéria a serem descobertos. Então em 2005, Kane e Mele publicaram um artigo a partir do modelo de Haldane para o grafeno, em que se considera o *spin* do elétron e substitui os fluxos magnéticos do modelo de Haldane pelo acoplamento *spin*-órbita (interação de partículas de *spin* com seu próprio movimento). O resultado que se obteve foi uma cópia do Efeito Hall Quântico, mas com os estados topológicos localizados nas bordas separados por componentes de *spin*, como se cada componente de *spin* sentir-se um campo magnético em sentido contrário, acarretando em correntes de *spin* polarizadas nas

bordas. Este estado é chamado de Efeito Hall Quântico de *Spin* ou Isolantes Topológicos Bidimensionais [45].

Em um material isolante, há um *gap* de energia finito na estrutura de bandas. No Efeito Hall Quântico, que ocorre na presença de um forte campo magnético e baixas temperaturas, os elétrons da borda se movem em canais unidimensionais, enquanto que no *bulk* da amostra se comporta como um isolante. Já no Efeito Hall Quântico de *Spin*, temos dois canais em cada borda da amostra que são separados por componentes de *spin*, enquanto que no *bulk* da amostra se comporta como isolante e esse efeito acontece na ausência de um campo magnético externo [43], [45]. Podemos ver este comportamento na figura 1.

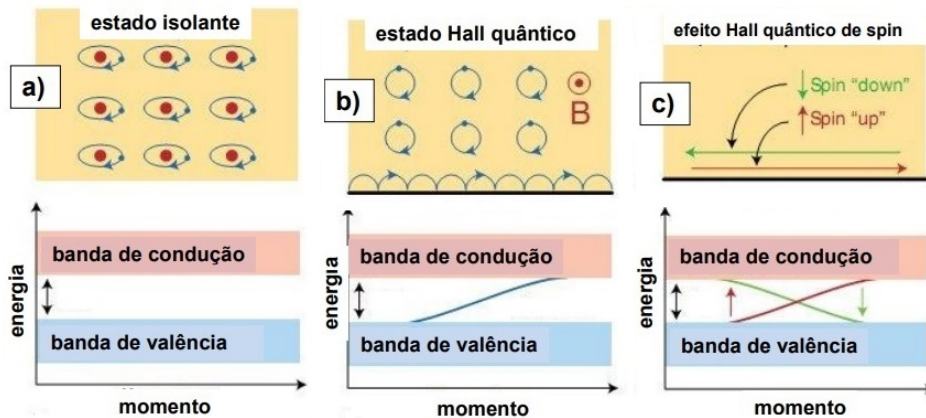


Figura 1: Representação dos diferentes estados isolantes. Em a) elétrons confinados em um isolante (esquerda) devido a um *gap* de energia (direita) separando a banda de valência (ocupada) da banda de condução (vazia). Em b) estado Hall Quântico sobre a ação de um campo magnético B, possui um *gap* de energia no interior mas permite condução de corrente elétrica unidimensional nas bordas. Em c) o efeito Hall Quântico de *Spin* com um *gap* de energia no interior, mas permite condução em estados controlados pelo *spin* nas bordas. Fonte: Referência [1].

O fato do acoplamento *spin*-órbita fazer o papel análogo ao do campo magnético externo no Efeito Hall Quântico, faz com que o sistema agora possua simetria de reversão temporal [45]. Em sistemas com simetria de reversão temporal, devido ao teorema de Krammers, os estados são degenerados e o número de Chern é zero, portanto, é necessário outro parâmetro invariante para caracterizar o Efeito Hall Quântico de *Spin* [46]. Como consequência da simetria de reversão temporal, as funções de Bloch são bidegeneradas em certos pontos Γ na zona de Brillouin, ou seja, $\psi_n(\vec{k}) = \psi_n(-\vec{k})$. Através destes pontos podemos definir um novo invariante topológico Z_2 , que contém dois elementos, 0 ou 1, onde 1 correspondente ao isolante topológico bidimensional e 0 ao isolante trivial [47].

Como o grafeno possui um baixo acoplamento *spin*-órbita, este efeito é difícil de se verificar, então em 2006, Bernevig, Hughes e Zang [48], previram teoricamente o mesmo efeito que Kane e Mele propuseram, o Efeito Hall Quântico de *Spin*, mas desta vez eles

utilizaram materiais com forte acoplamento *spin*-órbita afim que fosse possível observar experimentalmente este efeito. Eles usaram poços quânticos de $HgTe/CdTe$, onde a variação da largura do poço leva a uma inversão de bandas, que promove uma transição topológica [49]. A figura 2 ilustra o material e os estados de borda exibidos em sua fase topológica.

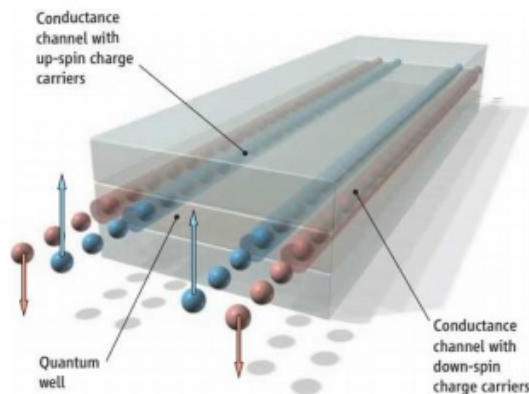


Figura 2: As camadas superiores e inferiores são de $CdTe$, enquanto que a camada do meio é de $HgTe$. Os estados de borda *spin* polarizados se propagam nas extremidades das interfaces $HgTe/CdTe$. Fonte: Referência [2]

A intensa interação *spin*-órbita existentes nos poços quânticos de $HgTe/CdTe$ separa espacialmente os canais de condução, além disso, preserva a simetria de reversão temporal dos estados de borda de maneira que esses sejam helicais, ou seja, têm direção de propagação correlacionada com a polarização de *spin*, figura 2. Esse grau de liberdade adicional potencializa o uso de IT-2D para armazenamento e processamento de dados ao nível quântico [50].

No ano de 2007 foi verificado experimentalmente que ligas do tipo $Bi_{1-x}Sb_x$, com $0,07 < x < 0,22$, se comportam como Isolantes Topológicos Tridimensionais (ITs-3D) [51]. Devido a intensa interação *spin*-órbita dessas ligas as bandas de valência e de condução dos componentes do $Bi_{1-x}Sb_x$ exibem um colapso para determinados pontos da zona de Brillouin [52]. Tais características permitem a existência de estados de superfície sem *gap* de energia e protegidos por simetria de reversão temporal. Nesses materiais, estados metálicos com características topológicas foram mapeados através da técnica ARPES (*Angle Resolved Photoemission Spectroscopy*) [53], figura 3.

No ano de 2009, estados de superfície foram encontrados nos compostos estequiométricos Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 , cuja os quais foram conhecidos como ITs-3D de segunda geração [54]. Em um IT-3D, a correlação entre momento e *spin* manifesta-se em qualquer direção na superfície do material, ou seja, os estados de borda propagam-se arbitrariamente com a polarização de *spin* sendo perpendicular ao movimento. Com isso, esses estados não

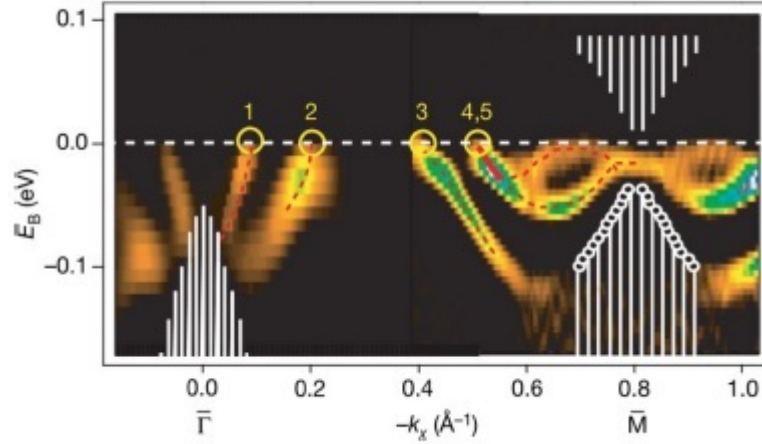


Figura 3: A figura mostra a dispersão de energia, através do ARPES, do primeiro IT-3D. A liga $Bi_{0.9}Sb_{0.1}$ descoberta em 2008 por D. Hsieh, seria um isolante topológico devido aos cinco cones de Dirac que aparecem na medição ARPES. Isto indica uma superfície topologicamente protegida, porém esta liga apresenta um *gap* de energia pequeno $\approx 30\text{meV}$. Fonte: Referência [3].

podem ser medidos por experimentos de transporte eletrônico, pois, a superfície do IT-3D não apresenta bordas, figura 4-a. Os estados de superfície de um IT-3D são do tipo férmions de Dirac sem massa e podem ser sondados quando a simetria de reversão temporal é violada na superfície do material. Isso pode ser feito por meio da abertura de um *gap* através de um campo magnético aplicado ou cobrindo-a com um filme magnético. Dessa forma, os cones de Dirac são separados na dispersão da energia, figura 4-b, e os estados de borda podem ser detectados via canais de condução estabelecidos [55], [11].

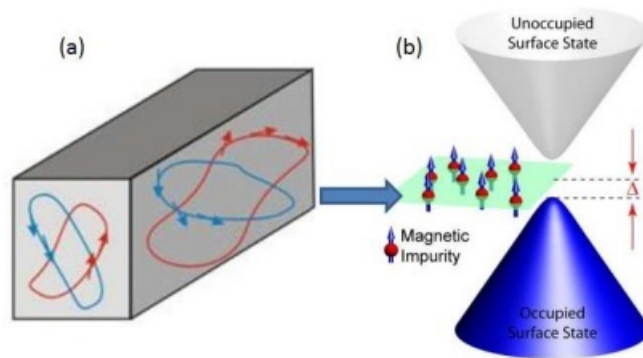


Figura 4: (a) Estados de borda em um IT-3D. Os *spins* dos estados metálicos são polarizados perpendicularmente à direção do momento. (b) Gap (Δ) aberto na superfície por uma impureza magnética. Os cones de Dirac são separados pela impureza, o que permite a sondagem por transporte eletrônico dos estados de borda. Fonte: Referência [4].

Nas condições descritas acima e na presença de campos eletromagnéticos, as superfícies dos IT's-3D exibem respostas eletromagnéticas quantizadas em termos da constante de estrutura fina, $\alpha = e^2/c\hbar$, onde c é a velocidade da luz. Essas respostas são caracterizadas pelo efeito magneto-elétrico topológico (EMT), no qual um campo elétrico gera uma magnetização e um campo magnético gera uma polarização. Tal efeito incorpora a ordem topológica que vigora no bulk do material e propriedades eletromagnéticas exóticas emergem desses materiais [55], [11].

Fisicamente falando, fracionalização é o fenômeno em que as quasipartículas do sistema não podem ser descritas pela combinação das partículas elementares que constituem o sistema. Exemplos disso são a fracionalização da carga, onde as quasipartículas carregam fração da carga do elétron, também temos a separação *spin*-carga, onde o elétron é visto como estado ligado entre uma quasipartícula chamada *chargeon* que carrega a carga do elétron e outra quasipartícula o *spinon* que carrega o *spin* do elétron [56].

O conceito de carga fracionada emerge da teoria quântica de campos em 1976 onde Jackiw e Rebbi mostraram que campos bosônicos podem induzir um número fermiônico 1/2 para férmions relativísticos com os quais acoplam com o campo [57]. O primeiro material em matéria condensada a exibir este fenômeno de fracionalização foi o poliacetileno. O poliacetileno é um arranjo de átomos de carbono separados por cerca de 1Å. A dispersão que conecta a energia e o momento são mostrados na figura 5 [17].

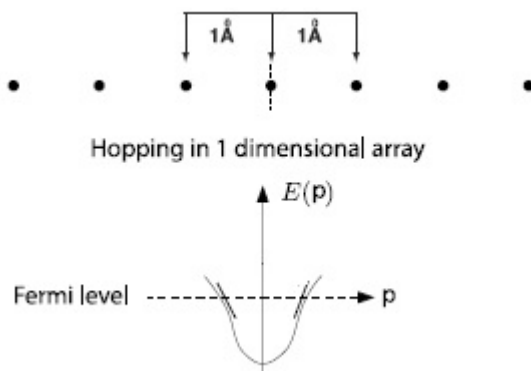


Figura 5: Cadeia de carbono e a dispersão de energia linearizada próximo a energia de Fermi. Fonte: Referência [5].

A curva de energia intercepta o nível de Fermi em dois pontos, chamados de pontos de Dirac, figura 5, pois, perto destes pontos a dispersão é linear. É conhecido que a cadeia de carbono do poliacetileno é instável [5], [58], o equilíbrio é atingido quando deslocamos o átomo 0.4Å para a esquerda ou direita do ponto inicial. A probabilidade de deslocar para a direita é a mesma que deslocar para a esquerda, isto nos dá duas estruturas de domínios equivalentes, isto é chamado de instabilidade de Peierls [59]. Essa instabilidade gera um termo de massa na hamiltoniana que pode variar com a distância, este termo é chamado de campo de fônon (ϕ) [5], [59].

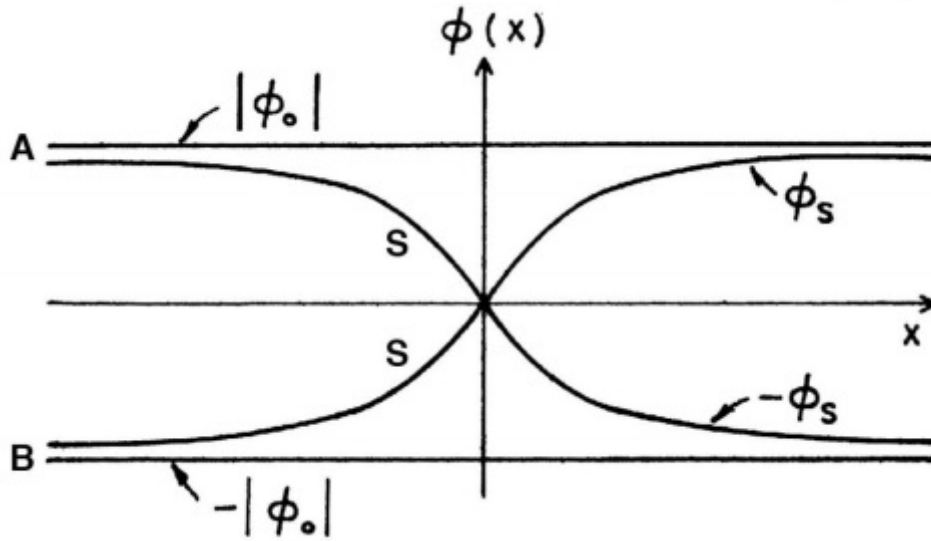


Figura 6: Perfil do fônon variando com a posição. O ponto simétrico estacionário, $\phi = 0$, é instável. Configurações estáveis estão localizadas em $\phi = |m|$ (A) e $\phi = -|m|$ (B). Fonte: Referência [5].

A solução da hamiltoniana agora passa a ser um sólition, em uma dimensão é chamado de *kink*. A função que descreve o *kink* interpola os dois domínios, figura 6, entre os termos de massa positiva e negativa, que são os dois domínios equivalentes do poliacetileno [58]. Um simples cálculo mostra que não importa os detalhes da forma que o *kink* possui, a equação de Dirac na presença do *kink* sempre suporta estado normalizável com energia nula, também chamado de modo zero [17], [5], [60].

A pergunta que resulta agora é, como tratar este estado modo zero na construção do estado fundamental do material. Este estado está vazio, com energias positivas, ou cheio com energias negativas?

Jackiw e Rebbi deram a resposta [57]. Não existe diferença de energia entre às duas possibilidades, cheio e vazio, então ambas têm que ser contabilizadas. A hamiltoniana efetiva possui simetria de conjugação, logo o espectro de energia dos estados ocupados é o mesmo dos vazios, mas a carga é oposta [57], [17], [58], por causa desta simetria o modo zero se encontra no meio do *gap* e a diferença de carga entre os estados vazios e cheios é um. Logo é como se o estado modo zero fosse uma mistura entre a possibilidade de estar cheio e vazio, o que gera a carga $Q = 1/2$ se estiver preenchido e $Q = -1/2$ se estiver vazio [57].

Com este resultado, os físicos abriram sua mente para a ocorrência de carga fracionada. Após estas descobertas é feita outra pergunta, isto pode ocorrer em sistemas além de uma dimensão? A resposta veio com o grafeno.

O grafeno é um arranjo planar de átomos de carbono ligados em forma hexagonal (figura 7) [20]. Este hexágono é uma superposição de dois arranjos triangulares, cada um

responsável por um cone de Dirac no espectro de energia.

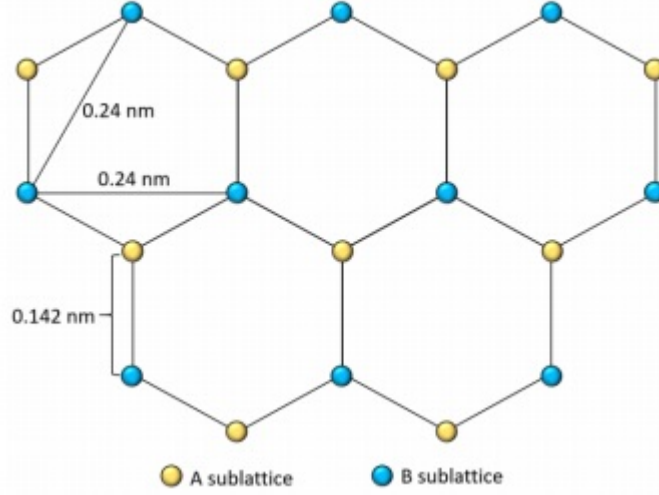


Figura 7: Os arranjos triangulares A e B que compõem a rede hexagonal do grafeno. Fonte: Referência [6].

Wallace mostrou em 1947 que a dispersão de energia devido à estrutura de bandas, pode ser linearizada próximo aos dois cones de Dirac, como no poliacetileno [7]. Assim como a instabilidade de Peierls, Chamon e colaboradores identificaram um efeito parecido, chamado de Distorção de Kekulé [61]. Esta distorção pode ser vista como um deslocamento dos cones de Dirac no espaço recíproco, isto gera um termo de massa que assume um valor constante de forma a abrir um *gap* de energia no cone de Dirac e um valor não constante que gera um análogo ao *kink*, chamado de vórtice, cuja sua forma conecta os estados de energia negativa e positiva [57], [61]. A corpo da Hamiltoniana do grafeno, considerando a distorção de Kekulé é:

$$\begin{bmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & \Delta \\ \bar{\Delta} & -\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \end{bmatrix}_{4 \times 4} \Psi_E = E \Psi_E, \quad (3)$$

onde σ são as matrizes de Dirac [62] e Δ é um sóliton, também chamado de vórtice, que pode ser constante gerando um *gap* ou $\Delta = \phi(x, y)$ gerando um estado modo zero no interior do *gap*. A hamiltoniana de superfície de um isolante topológico tridimensional é:

$$H_{sup} = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_{x,y}, \quad (4)$$

onde $v_F \simeq 6.2 \times 10^5 m/s$ é a velocidade de Fermi e $\vec{\nabla}_{x,y} = (\partial_x, \partial_y)$. Logo, considerando ambos os estados de *spin* up e down, a hamiltoniana (4) do isolante topológico se torna:

$$\begin{bmatrix} i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_{x,y} & 0 \\ 0 & -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_{x,y} \end{bmatrix}_{4 \times 4} \Psi_{sup} = E \Psi_{sup}, \quad (5)$$

com,

$$\Psi_{sup} = \begin{bmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

onde ψ_{\uparrow} e ψ_{\downarrow} são as funções de onda que descrevem os férmions com *spin* up e down, respectivamente, na superfície do IT. Observe a semelhança estrutural da hamiltoniana entre o grafeno e o isolante topológico e note que os estados de superfície do IT tridimensional são bidimensionais assim como o grafeno, logo um ponto de partida para verificar a existência de fracionalização no IT é a distorção de Kekulé no grafeno.

Nossa proposta então será tentar encontrar se existe essa fracionalização em isolantes topológicos tridimensionais, vamos adotar como norte a distorção de Kekulé pois, a semelhança na hamiltoniana entre o grafeno e dos estados de superfície do IT-3D fornece um background favorável para isto ocorrer.

2 Grafeno

O grafeno é o primeiro material bidimensional produzido em laboratório. Ele é constituído de átomos de carbono e possui propriedades de transporte distintas daquelas observadas em outros materiais e isto faz com que o grafeno seja um material onde a física da matéria condensada e a física de altas energias se conectam.

O grafeno é uma cadeia planar de átomos de carbono construída a partir de uma célula unitária formada por 6 carbonos em um formato hexagonal, figura 8 [20], [7].

A estrutura hexagonal do grafeno pode ser descrita por duas sub-redes triangulares superpostas, chamados de sub-rede A e B. Os vetores da rede podem ser descritos por [20]:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}). \quad (7)$$

Esses dois vetores geram as sub-redes. Outro fato interessante do grafeno é que a primeira zona de Brillouin também é hexagonal e os vetores da rede recíproca são descritos por [20]:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (8)$$

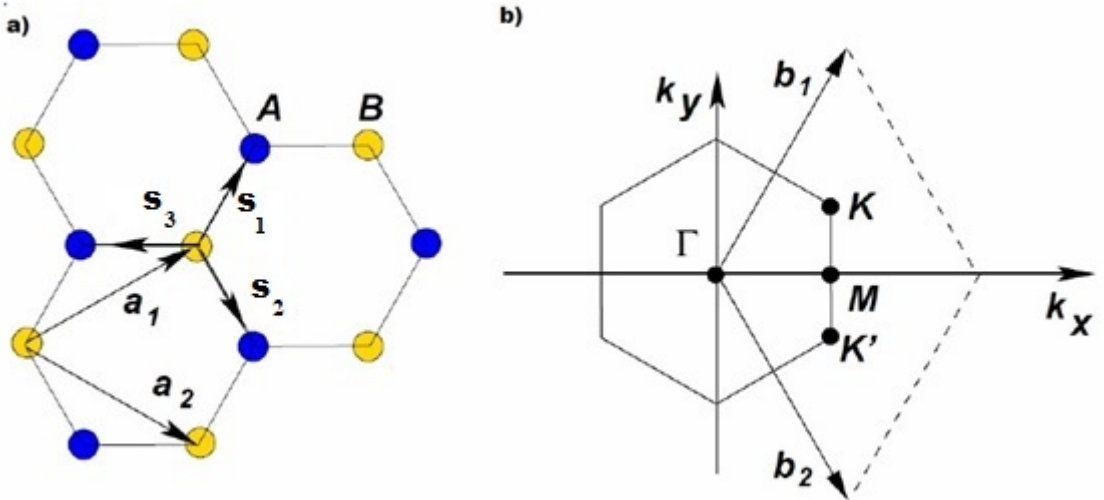


Figura 8: a) Rede hexagonal do grafeno, esferas azuis referentes à sub-rede A e esferas amarelas referentes à sub-rede B, assim como os vetores que ligam os átomos a sub-rede vizinha e a mesma sub-rede. b) Pontos independentes da primeira zona de Brillouin K e K' . Fonte: Referência [7].

Esta zona de Brillouin possui seis pontos onde a banda de valência toca a banda de condução, pontos estes chamados de ponto de Dirac. Entretanto, apenas dois destes pontos são independentes, os pontos K e K' . As coordenadas destes pontos no espaço recíproco são [7], [63].

$$K = \frac{2\pi}{3a}(1, \frac{1}{\sqrt{3}}), \quad K' = \frac{2\pi}{3a}(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}). \quad (9)$$

A descrição dos elétrons do grafeno é feita por meio de uma Hamiltoniana que descreve as fortes ligações químicas existentes no grafeno. Considerando que o elétron interage entre os primeiros átomos vizinhos, têm-se, em unidades naturais:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j}), \quad (10)$$

onde $a_{\sigma,i}^\dagger$ e $a_{\sigma,j}$ são os operadores de criação e aniquilação, $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ é o *spin* do elétron que se encontra em \mathbf{R}_i da sub-rede A. Analogamente vale para a sub-rede B. O parâmetro t é a energia de “salto” entre os primeiros vizinhos. A hamiltoniana (10) pode ser diagonalizada no espaço dos momentos como:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}, \quad (11)$$

$$\phi_{\mathbf{k}} = -t \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}_j}, \quad (12)$$

onde \mathbf{s}_i com $i = 1, 2, 3$ conecta qualquer átomo da sub-rede B aos seus vizinhos próximos da sub-rede A, figura 8, e $\phi_{\mathbf{k}}$ é a auto função no espaço dos momentos.

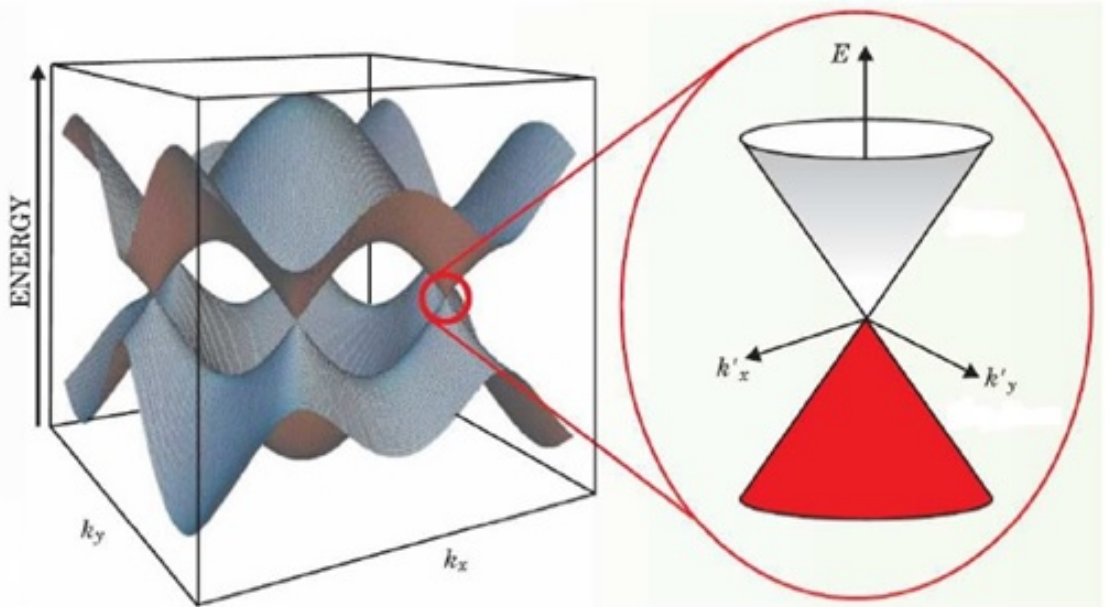


Figura 9: Estrutura de bandas de energia do grafeno mostrando as bandas de valência e condução. A ampliação em torno de um dos pontos onde as bandas se tocam mostram o espectro cônico linear sem *gap* em torno dessa região. Fonte: Referência [7].

A estrutura de bandas, figura 9, é obtida através do espectro de energia que é dado por [7]:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}, \quad (13)$$

$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right). \quad (14)$$

O sinal $+(-)$ se refere a banda de condução (valência).

A dispersão linear da estrutura de bandas pode ser obtida expandindo-se o espectro $E_{\pm}(\mathbf{k})$ em torno dos pontos de Dirac K e K' . Considerando $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$, onde $|\frac{q}{K}| \ll 1$, têm-se:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm v_F \mathbf{q} + O\left[\left(\frac{q}{K}\right)^2\right], \quad (15)$$

onde \mathbf{q} é o momento medido em torno do ponto de Dirac e v_F é a velocidade de Fermi dada por $v_F = \frac{3ta}{2} \cong 10^6 m/s$. Esta é a velocidade com que os portadores que se encontram na borda da superfície de Fermi se deslocam.

O grafeno é um material muito peculiar que possui propriedades distintas dos demais sistemas de matéria condensada. Em geral, a relação entre energia e momento eletrônico em cristais é dada pela relação clássica $E(\vec{q}) = q^2/2m^*$, onde m^* é a massa efetiva dos portadores de carga. Esta relação quadrática entre energia e momento leva a uma velocidade de Fermi dependente da energia dos portadores de carga, $v_F = k/m = \sqrt{\frac{2E}{m^*}}$, portanto, a velocidade dos elétrons muda consideravelmente com a energia, mas isso é bem diferente do que encontramos no grafeno onde a velocidade de Fermi é constante e independe da energia dos portadores.

Considere a hamiltoniana do grafeno descrita pela equação (10). A transformada de Fourier dos operadores de aniquilação é dada por:

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} a(\vec{k}), \quad (16)$$

onde N_c é o número de células unitárias, \vec{R}_n a posição dos átomos da sub-rede A e n indica a posição dos átomos na rede. Existem dois pontos onde estão localizados os estados de mais baixa energia, esses pontos são os pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' . Quando expandimos o somatório da equação (16), é possível escrever o operador a_n como uma soma de dois termos em torno desses pontos de Dirac. Logo podemos escrever este operador como:

$$a_n \simeq e^{-i(\vec{K} + \vec{q}) \cdot \vec{R}_n} a_{1n}(\vec{q}) + e^{-i(\vec{K}' + \vec{q}') \cdot \vec{R}_n} a_{2n}(\vec{q}'), \quad (17)$$

onde os índices 1 e 2 se referem aos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' , respectivamente, e os momentos \vec{q} e \vec{q}' são medidos em relação aos pontos \vec{K} e \vec{K}' , respectivamente. Analogamente,

podemos fazer a mesma transformação para o operador aniquilação da sub-rede B, assim:

$$b_n \simeq e^{-i(\vec{K}+\vec{q})\cdot\vec{R}_n} b_{1n}(\vec{q}) + e^{-i(\vec{K}'+\vec{q}')\cdot\vec{R}_n} a_{2n}(\vec{q}'), \quad (18)$$

Vamos considerar apenas termos de ordem linear, para isto, considere um átomo da sub-rede n localizado na posição R_n . Os termos de ordem linear iram surgir devido à interação entre os primeiros vizinhos, que no caso são 3, figura 8. Logo a posição desses átomos vizinhos com relação ao átomo em R_n é $\vec{R}_n + \vec{s}_i$, onde $i = 1, 2, 3$ e os vetores \vec{s}_i são dados por, figura 8:

$$\vec{s}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{s}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \vec{s}_3 = -a(1, 0). \quad (19)$$

Substituindo os operadores definidos nas equações (17) e (18) na hamiltoniana (10) e considerando termos de ordem linear e usando que,

$$\sum_i e^{\pm\vec{K}\cdot\vec{s}_i} = \sum_i e^{\pm\vec{K}'\cdot\vec{s}_i} = 0. \quad (20)$$

Temos que a hamiltoniana (10) fica na forma:

$$H = -i\hbar v_F \int dx dy \left(\psi_1^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \psi_1(\vec{r}) + \psi_2^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma}^* \cdot \vec{\nabla} \psi_2(\vec{r}) \right), \quad (21)$$

onde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, $\vec{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$ são as matrizes de Pauli, $\psi_i = (a_i, b_i)^T$ e $\psi_i^\dagger = (a_i^\dagger, b_i^\dagger)^T$ com $i = 1, 2$. Observe que a Hamiltoniana (21) é constituída de duas cópias da Hamiltoniana de Dirac em (2+1) dimensões com massa nula, uma descrevendo a dinâmica dos portadores de carga próximos ao ponto K e a outra próxima ao ponto K' .

Portando, podemos descrever os portadores de carga que se encontram próximos ao ponto K através da função de onda ψ_K que satisfaz:

$$H_K \psi_K = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_K = E \psi_K = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q} \psi_K, \quad (22)$$

onde $\vec{q} = -i\hbar \vec{\nabla}$. Resolvendo esta equação matricial, a função de onda com auto energia $E = \pm v_F q$ que representam os portadores de carga com momento q têm a forma:

$$\psi_{\pm K} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta(\vec{q})/2} \\ \pm e^{i\theta(\vec{q})/2} \end{pmatrix} = u_{\pm}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \quad (23)$$

onde $\theta = \arctan(q_y/q_x)$ e o sinal $+$ é para a banda de condução elétrons), e $-$ se refere a banda de valência (buracos). Para os elétrons próximos ao ponto K' temos:

$$H_{K'} \psi_{K'} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{K'} = E \psi_{K'} = v_F \vec{\sigma}^* \cdot \vec{q} \psi_{K'}, \quad (24)$$

onde $\vec{q} = -i\hbar \vec{\nabla}$. Resolvendo esta equação matricial, a função de onda com auto energia

$E = \pm v_F q$ que representam os portadores de carga com momento q' têm a forma:

$$\psi_{\pm K'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta(\vec{q}')/2} \\ \pm e^{-i\theta(\vec{q}')/2} \end{pmatrix} = u_{\pm}(\vec{q}') e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}}. \quad (25)$$

Observe que as Hamiltonianas (22) e (24) podem ser escritas da forma:

$$H_{K(K')} = v_F (\sigma^x q_x \pm \sigma^y q_y), \quad (26)$$

onde o sinal $+(-)$ se aplica ao vale $\vec{K}(\vec{K}')$. Veremos no próximo capítulo a semelhança dessa Hamiltoniana com a Hamiltoniana que descreve os estados de superfície do isolante topológico tridimensional.

3 Isolantes Topológicos

3.1 Topologia

O conceito de topologia e seus invariantes foram introduzido pelos matemáticos para classificar diferentes objetos em classes onde os detalhes geométricos dos objetos não são importantes. Isto quer dizer que, se dois objetos diferentes puderem ser modificados de tal forma que um se transforme no outro e vice-versa, dizemos que estes objetos são topologicamente equivalentes, desde que a transformação que leve um objeto no outro seja suave, ou seja, sem rasgar ou quebrar o objeto [31].

Por exemplo, dizemos que uma xícara e uma rosquinha são topologicamente equivalentes pois, podemos transformar uma, na outra. Imagine que ambas são feitas de massinha, conseguimos modelar uma, na outra como na figura 10.

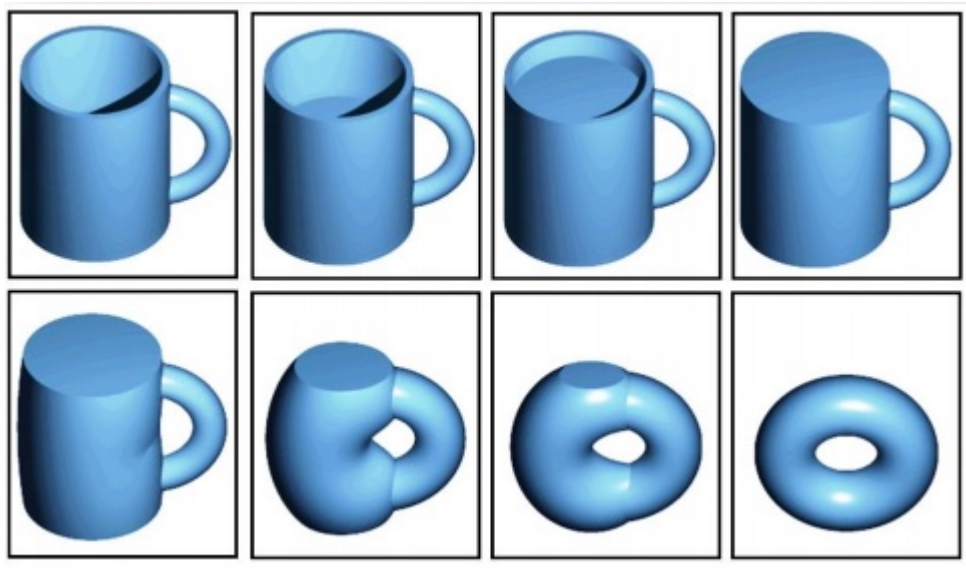


Figura 10: Comparação entre uma xícara e uma rosquinha como sendo iguais em linguagem topológica. Fonte: Referência [8].

Existe uma informação importante sobre esta modelagem, ambos possuem um furo e este se mantém em todo o processo. A partir dessa observação, definimos o que chamamos de invariante topológico. Definimos o *invariante topológico* como sendo a quantidade que é conservada quando modelamos um objeto em outro, no nosso exemplo acima, esta quantidade é o número de buracos ou gênero que cada um dos objetos possui, cada um deles possui um buraco, logo podemos classificar várias classes topológicas através de seus invariantes topológicos [31].

Na matemática esse conceito de topologia está associado a geometria, o que importa para classificar os objetos são seus invariantes topológicos (buracos ou gênero). Na física, podemos estender o conceito de topologia, fazendo analogia com a matemática portanto, em vez de geometria, analisamos a hamiltoniana do sistema.

3.2 Isolantes

A estrutura atômica dos materiais determina se eles são isolantes ou condutores elétricos. Os estados isolantes são os estados mais simples da matéria pois, são eletricamente inertes, ou seja, as camadas eletrônicas desses materiais estão completamente preenchidas de forma que para mover um elétron deste material requer altas energias [64].

Podemos descrever esses estados através da teoria de bandas de sólidos. Considere o sólido como sendo um cristal (um estado cristalino se caracteriza por uma repetição espacial de uma estrutura básica que pode conter um ou mais átomos ligados entre si), os íons da rede cristalina geram um potencial $U(\mathbf{r})$ que atua sobre um elétron na posição \mathbf{r} , que se move em um cristal. Os auto estados deste elétron são obtidos resolvendo a equação de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi_{n,k} = E_n \psi_{n,k}. \quad (27)$$

O teorema de Bloch determina que a função de onda ψ_k é em geral escrita como:

$$\psi_{n,k} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,k}, \quad (28)$$

onde ψ_k está definido em uma única célula unitária do cristal e u_k são funções que possuem a periodicidade da rede cristalina. As bandas de energia são definidas pelos autovalores E_n que juntos formam a estrutura de bandas do cristal, onde o índice n caracteriza a banda de energia [64].

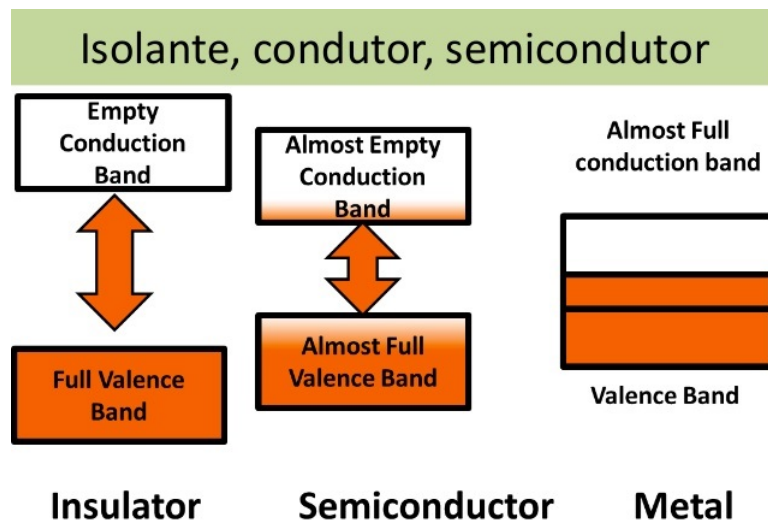


Figura 11: Comparação entre as bandas de energia do isolante, semicondutor e metal. No isolante e no semicondutor existe um *gap* de energia que separa a banda de valência e de condução porém, o *gap* do semicondutor é pequeno. Já no metal não existe esse *gap* e os elétrons da banda de valência podem ir para a de condução sem impedimentos. Fonte: Referência [9].

Cada estado eletrônico possível que o elétron pode ocupar é caracterizado por n e k ,

sendo que cada estado deste suporta dois elétrons, um com *spin* up e outro down. Pelo princípio da exclusão de Pauli, os níveis de energia devem ser preenchidos do nível mais baixo até o mais alto, onde o nível mais alto é chamado de nível de Fermi [64].

Dentro de um sólido as energias possíveis dos elétrons estão agrupadas em bandas permitidas separadas por bandas proibidas devido à periodicidade do potencial criado por íons em sólidos, figura 11. As bandas de energia mais profundas completamente ocupadas por elétrons são chamadas de bandas de valência, essas são inertes do ponto de vista elétrico e térmico. A banda parcialmente preenchida é chamada de banda de condução [64], [65].

Para um sólido, o nível de energia mais alto ocupado, nível de Fermi (E_F), está localizado dentro de uma banda permitida onde os elétrons podem então ser acelerados livremente desde que os níveis de energia mais altos sejam acessíveis a esses, esse é um *condutor*. Em um condutor os elétrons com mais altas energias se comportam, aproximadamente, como partículas livres [64], [65].

Em um sólido em que o estado fundamental é constituído por bandas permitidas inteiramente ocupadas, E_F será então igual ao limite superior de uma banda permitida. Assim os elétrons não podem ser acelerados pois, os níveis de energia imediatamente superiores são proibidos, esse é um isolante, também chamado de *vácuo* [64], [65].

Em um isolante os elétrons podem ser excitados apenas atravessando a banda proibida. Um bom isolante em uma temperatura T qualquer deve ter $\Delta E \gg k_B T$, ou seja, em temperatura ambiente, $\Delta E \gg 2eV$ [66]. Se ΔE é igual ou da ordem de $k_B T$, certo número de elétrons pode deixar a banda de valência para ocupar estados imediatamente superiores desocupados das bandas permitidas (níveis que estariam completamente desocupados no zero absoluto). O cristal possui então elétrons de condução, porém, em número restrito, este é um semicondutor intrínseco. Portanto, a condutividade de um semicondutor intrínseco cresce rapidamente com a temperatura [64], [65].

3.3 Efeito Hall Quântico (EHQ)

O Efeito Hall Quântico (EHQ) foi descoberto em 1980 [67] e foi o primeiro estado da matéria a ter um *gap* de energia no interior, como em um isolante, mas que não é topologicamente igual ao vácuo [45], [67].

A diferença entre um isolante comum e o EHQ é uma propriedade topológica do *manifold* (um espaço matemático abstrato que se parece com os espaços descritos pela geometria euclidiana) dos estados eletrônicos ocupados. A função de onda $\psi_{n,k}(\vec{k})$ que descreve os portadores de carga faz um mapeamento da zona de Brillouin, que em duas dimensões possui a topologia de um toro, devido à periodicidade do momento eletrônico \vec{k} no espaço de Hilbert, diferentemente do vácuo que possui uma topologia trivial [67], [68].

Em 1980, Klaus von Klitzing, exibiu resultados experimentais mostrando que para

temperaturas baixas (em torno de $4K$) e campos magnéticos muito intensos (da ordem de $1,5T$) a condutividade Hall, equação (1), medida em uma amostra de MOSFET apresenta valores quantizados, independente da geometria da amostra. Além disso, a quantização ocorre em planícies, figura 12, que são múltiplos inteiros de $e^2/2$, um resultado totalmente inesperado e não previsto teoricamente [10].

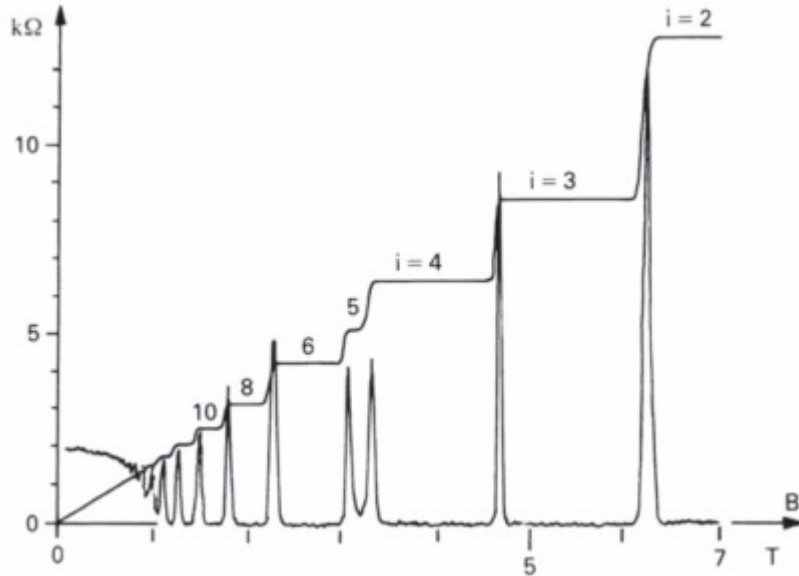


Figura 12: Gráfico da variação da resistência em relação ao campo magnético externo mostrando as planícies de condutividade no MOSFET. Fonte: Referência [10].

Para campos magnéticos menores ($B < 1T$), percebemos uma proporcionalidade entre a resistência Hall e campo magnético como era de se esperar por $R_H = -\frac{B}{nq}$, mas quando o campo ultrapassa $2T$, aparece uma estrutura estranha na curva, que para campos mais extremos, esta estrutura se revela como uma escada com degraus de crescente altura [10].

Fazendo um modelo teórico em que o elétron sem *spin* com carga e e massa m confinado em um filme fino onde espessura se encontra no eixo- z e é infinitesimal, os níveis de energia do elétron são dados por:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \quad (29)$$

com $n \in N$ e ω é a frequência ciclotron do movimento dos elétrons. Os estados correspondentes aos diferentes n são chamados níveis de Landau [10], [69].

Os níveis de Landau podem ser vistos como bandas de energia para os elétrons e , se N níveis de Landau são preenchidos e os restantes desocupados, um gap de energia separa os estados ocupados dos vazios, como em um isolante, porém, nas bordas do material os elétrons possuem um movimento diferente daqueles do interior, porque as órbitas encontram a borda do material e não se fecham, assim o elétron “ pula ” de uma órbita para a outra na superfície do material, figura 13 [11], [10], [69].

Estes saltos na borda levam a estados eletrônicos que se propagam pela borda do

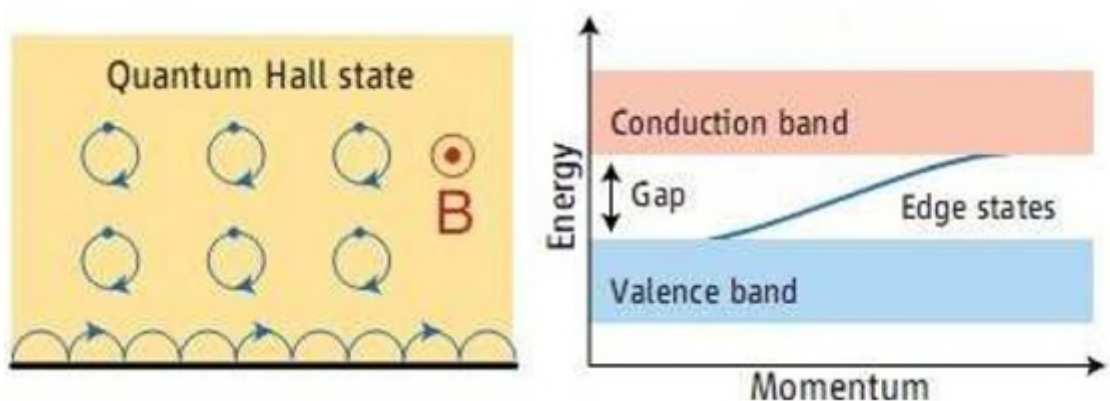


Figura 13: Órbita dos elétrons é quebrada na superfície dando origem a corrente na borda. Fonte: Referência [11].

sistema em apenas uma direção, sendo quirais e não possuem energia quantizada. Dado que estes estados não possuem *gap* de energia no espectro, são metálicos e quirais, eles podem conduzir corrente elétrica sem serem espalhados por impurezas, pois, não há estados se propagando em sentido contrário, a única opção para os elétrons são propagarem no mesmo sentido e sem perda de energia na forma de calor, pois, não podem ser espalhados. Estes efeitos são responsáveis pela quantização da condutividade Hall, equação (1) [11], [70]. Esta quantização foi medida com uma precisão de uma parte em 10^9 e é uma manifestação da natureza topológica de σ_{xy} que é um invariante topológico do sistema.

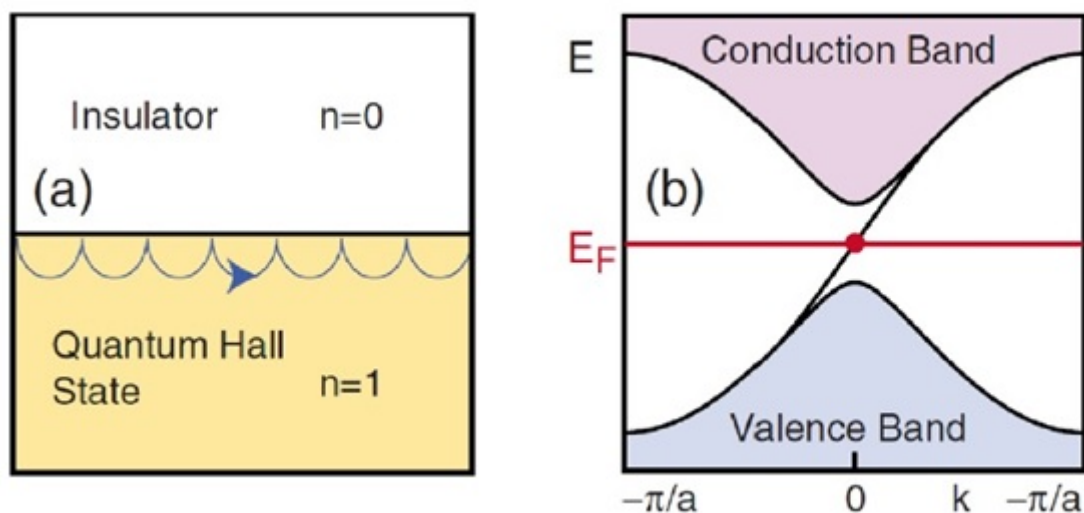


Figura 14: a) Comparação entre um isolante comum e o efeito hall quântico, proteção topológica dos estados de borda devido à mudança do invariante. b) Espectro de energia do efeito hall quântico. Fonte: Referência [12].

Vamos supor que a energia de Fermi se encontra em um *gap* enquanto a condutividade σ_{xy} é constante, concluímos que o estado Hall quântico é equivalente a um isolante comum. Porém, o EHQ é caracterizado por um número topológico n que é finito para este estado,

mas é zero para o isolante comum. Portanto, na borda da amostra o *gap* de energia deve desaparecer para que o invariante topológico possa mudar, pois, para o Efeito Hall Quântico, o invariante topológico é $\sigma_{xy} \leftrightarrow n \neq 0$, figura 14 [11], [70].

3.4 Efeito Hall Quântico de Spin ou Isolantes Topológicos Bidimensionais (EHQS)

Em 2004, um novo estado da matéria, assim como o Efeito Hall Quântico que também exhibe ordem topológica foi descoberto e chamado de Efeito Hall Quântico de *Spin* (EHQS) ou também chamado de Isolante Topológico Bidimensional. Este novo estado da matéria foi primeiramente previsto para ocorrer em poços quânticos bidimensionais [1], [48]. Posteriormente, em 2006 e 2007 ele foi observado experimentalmente em poços quânticos de HgTe/CdTe [2].

Todos os estados isolantes encontrados na natureza, que preservam a simetria de reversão temporal e possuem um estado fundamental não degenerado podem ser classificados em duas fases topologicamente distintas. O EHQS possui uma classificação topológica que o diferencia de um isolante de bandas comum. Esta fase é associada a um invariante topológico que possui uma classificação Z_2 (grupo de dois elementos inteiros 0 e 1, onde 0 representa classificação trivial e 1 não trivial) [71]. Esta classificação Z_2 definida para materiais que possuem sua dinâmica descrita por Hamiltonianas que são invariantes sob reversão temporal é análoga à classificação topológica do EQ [72].

No Efeito Hall Quântico a condutividade Hall viola a simetria de reversão temporal, assim o invariante TKNN que caracteriza o estado Hall do sistema deve anular-se em sistemas que são invariantes sob reversão temporal. Entretanto, a interação *spin*-órbita no grafeno, leva a um efeito Hall Quântico de *Spin* que é invariante sob reversão temporal, possui um *gap* de energia no *bulk* e estados metálicos na borda, que são *spins* polarizados [45]. A interação *spin*-órbita possibilita a existência de fases topologicamente não triviais que preservam a simetria de reversão temporal [73].

Para entender melhor esse novo estado topológico considere a simetria de reversão temporal T para sistemas com partículas de *spin* 1/2. Denotamos (TR) para reversão temporal e (TRS) para simetria de reversão temporal. O operador de reversão temporal Θ possui as seguintes propriedades [13]:

$$\Theta^\dagger \Theta = 1, \quad (30)$$

$$\Theta^\dagger \vec{r} \Theta = \vec{r}, \quad (31)$$

$$\Theta^\dagger \vec{p} \Theta = \Theta^\dagger m \frac{dr}{dt} \Theta = -m \frac{dr}{dt} = -\vec{p}, \quad (32)$$

$$\Theta^\dagger \vec{L} \Theta = \Theta^\dagger (\vec{r} \times \vec{p}) \Theta = (\vec{r} \times -\vec{p}) = -\vec{L}, \quad (33)$$

onde \vec{r} , \vec{p} , \vec{L} são respectivamente a posição, momento e momento angular. Trivialmente propriedade do momento angular se expande ao *spin*. Desconsiderando o *spin*, o operador TR é simplesmente o operador conjugação, \hat{K} . Dessa forma, se $\Psi(r, t)$ é uma função de onda, temos:

$$\Theta^\dagger \Psi(r, t) \Theta = \Psi^*(r, -t). \quad (34)$$

Considerando o *spin* 1/2, o operador TR têm que ser capaz de inverter o *spin* por isso ele tem a forma:

$$\theta = -i\sigma_i \hat{K}, \quad (35)$$

onde σ_i é a matriz de Pauli correspondente. Desta forma as matrizes de Pauli (que correspondem ao *spin*) se transformam como:

$$\Theta^\dagger \sigma_i \Theta = -\sigma_i. \quad (36)$$

Ter uma simetria de reversão temporal é ser invariante pelo operador $\Theta([H, \Theta]) = 0$. Desta forma, para uma hamiltoniana de bandas [13]:

$$H(-k) = \Theta H(k) \Theta^{-1}. \quad (37)$$

Se em algum ponto (Γ_i) da zona de Brillouin tem-se:

$$-\Gamma_i = \Gamma_i + n_i G_i, \quad (38)$$

onde n é 0 ou 1 e G_i é um vetor da rede recíproca, então o sistema satisfaz a condição $H(-\Gamma_i) = H(\Gamma_i)$ e ,portanto, tem simetria de reversão temporal, além disso, estes pontos sempre serão degenerados, pois, compartilham a mesma auto energia [13].

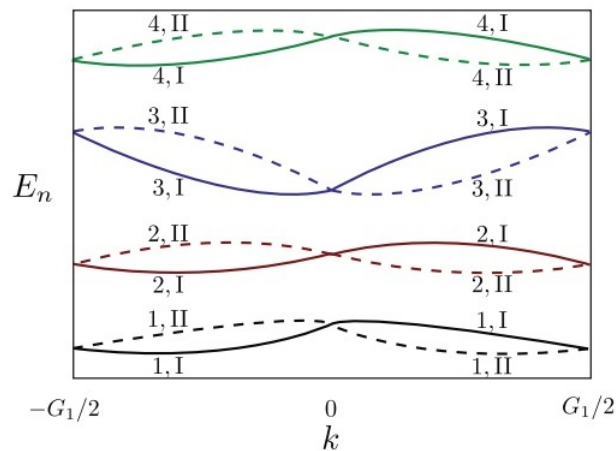


Figura 15: Pares de Kramers de uma rede quadrada . Fonte: Referência [13].

No caso de uma rede quadrada, figura 15, existem um total de 4 pontos que satisfazem essa condição. Para um sistema de *spin* 1/2 essa invariância implica que existe um número

par de estados degenerados. Numa estrutura de banda isso significa que as bandas se cruzam, um par destas bandas é chamado de par de Kramers. Sempre que existirem estes pares e eles forem separados por *gaps* de outros pares, pode-se definir um invariante topológico associado [13].

Considere uma estrutura de bandas da borda de um isolante topológico bidimensional em função do momento cristalino ao longo da borda. Como a hamiltoniana do sistema é invariante sobre reversão temporal devido ao acoplamento *spin*-órbita, o teorema de Kramer garante que para certos pontos da zona de Brillouin, existirá estados que são degenerados. Como existem estados de borda, existirão pontos onde estes estados serão degenerados, ou seja, os estados referentes aos *spins* up e down serão iguais nestes pontos, chamados de pontos de Dirac [45], [13].

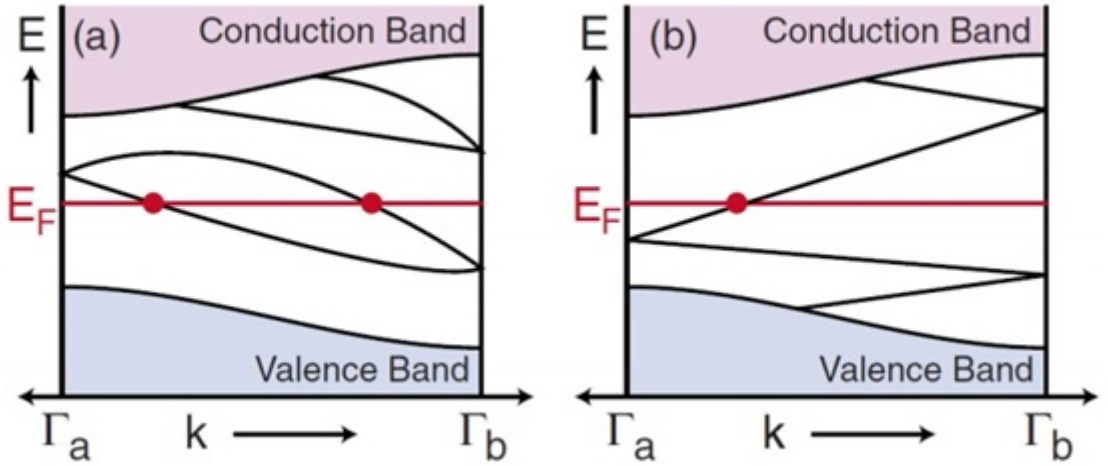


Figura 16: Dispersão eletrônica entre dois pontos na borda do isolante topológico que possuem degenerescência de Kramers. a) O número de estados de superfície cruzando a energia de Fermi entre os pontos $\Gamma_a = 0$ e $\Gamma_b = \pi/a$ é par e em b) é ímpar. Fonte: Referência [14].

Considere que os pontos $\Gamma_a(k_x = 0)$, $\Gamma_b(k_x = \pi/a)$ são pontos de Dirac. Os estados que são referentes a estes pontos podem se conectar de duas maneiras diferentes. Na figura 16-a, a banda de energia intercepta o nível de Fermi um número par de vezes, neste caso, os estados de bordas podem ser eliminados por perturbações. Por outro lado, figura 16-b, isto ocorre um número ímpar de vezes, e quando isto ocorre, os estados de borda não podem ser eliminados [14].

O Efeito Hall Quântico de *Spin* pode ser visto como duas cópias do EHQ, onde os estados com *spins* opostos se contra propagam na borda do material. Como no EHQ em regiões onde o invariante topológico muda, como na interface entre o EHQS e o vácuo existe estados metálicos figura 17.

Tais estados são chamados de helicais [74], em analogia com a correlação entre *spin* e momento de partículas com massa nula chamada de helicidade [75], formam um condu-

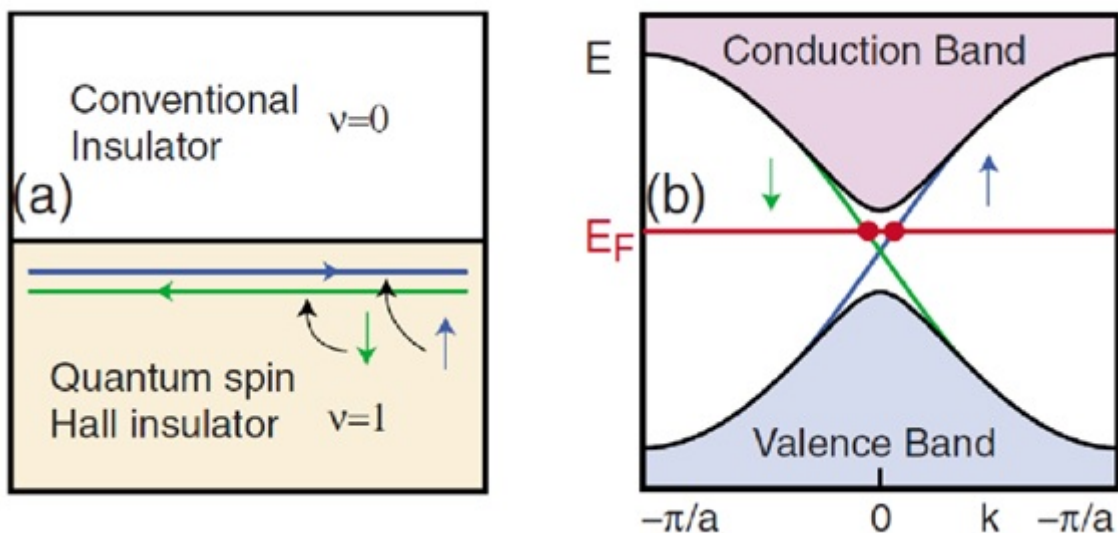


Figura 17: Estados de borda do EHQS. Em (a) interface entre um EHQS que possui $\nu = 1$ e o isolante convencional $\nu = 0$. Existem estados de borda metálicos que são *spins* polarizados, isto é, partículas com diferentes componentes up e down do *spin* se propagam em sentidos opostos sendo os dois “canais” de propagação conectados pela simetria de reversão temporal. Em (b) um esquema da estrutura de bandas onde o *gap* do *bulk* do material e os estados metálicos da borda *spins* polarizados são mostrados. Fonte: Referência [14].

tor unidimensional que é essencialmente metade de um condutor ordinário. Condutores ordinários possuem elétrons com *spin* up e down propagando em ambas as direções e são frágeis, pois, os estados são susceptíveis a localização de Anderson mesmo na presença de desordem fraca. Em contraste com isso, no EHQS os estados de borda não podem ser localizados na presença de desordem forte devido à simetria de reversão temporal do sistema, desde que essa impureza não tenha caráter magnético [71], [14].

A simetria de reversão temporal previne que os estados de borda helicoidais se espalhem, evitando assim a dissipação. Para compreender como isto ocorre, consideremos um estado helicoidal no qual uma impureza não magnética (impurezas magnéticas quebram a TRS e o material deixa de ser um isolante topológico) está presente na borda. Em princípio, ela poderia causar um retro espalhamento. No caso de um estado com *spin* up, por exemplo, movendo-se para a direita, o único estado possível em que ele poderia retro espalhar seria o estado de *spin* down que se move para a esquerda [46], [11], [73].

O modo como o elétron contorna a impureza pode ser horário ou anti horário, figura 18. Quando o elétron contorna a impureza no sentido horário, é equivalente a uma rotação de π , quando no sentido anti-horário, é equivalente a uma rotação de $-\pi$. Os dois caminhos para o espalhamento difere de uma rotação do *spin* do elétron de $\pi - (-\pi) = 2\pi$, mas a função de onda de uma partícula de *spin* 1/2 ganha um sinal negativo sob rotação de 2π [73], o elétron espalhado tem função de onda $-\psi$, enquanto os elétrons incidentes

no espalhamento têm função de onda ψ , o que por consequência gera uma interferência destrutiva, logo nenhum elétron é espalhado o que torna uma transmissão perfeita [46], [11].

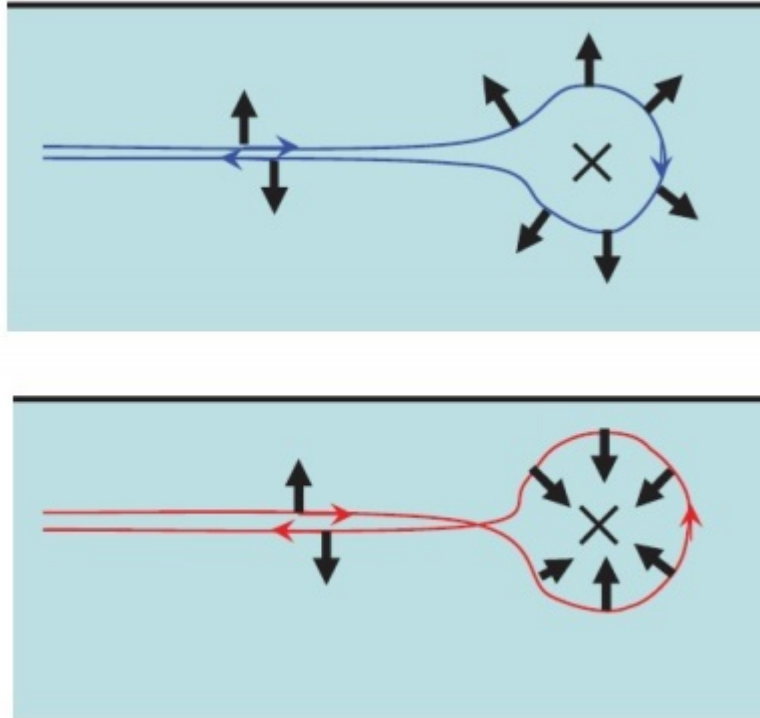


Figura 18: Espalhamento dos elétrons na borda do EHQS. O espalhamento pode ocorrer de duas formas distintas fazendo o *spin* dos portadores girar no sentido horário $-\pi$ ou no sentido anti horário π . Os dois caminhos diferem por uma rotação do *spin* do elétron por 2π e interferem destrutivamente. Fonte: Referência [11].

Note que esta situação só é possível quando temos um número ímpar de estados que possuem degenerescência, pois, se houvessem dois estados se movendo para frente e para trás, um elétron poderia ser retro espalhado sem reverter seu *spin*, o que impede que haja interferência destrutiva [76].

A primeira proposta teórica de IT bidimensional foi filmes ultrafinos de bismuto [77], devido ao forte acoplamento *spin*-órbita nesse material. Posteriormente foi proposto que poços quânticos de HgTe comprimidos entre CdTe deveria ser um IT desde que a camada de HgTe fosse superior a um valor crítico $d_c \sim 6.5 \text{ nm}$ [48]. Esta última proposta teórica foi verificada experimentalmente e constitui o primeiro exemplo de IT bidimensional [2], [78].

3.5 Isolantes Topológicos Tridimensionais

Podemos generalizar os isolantes topológicos bidimensionais para três dimensões [79]. Os isolantes topológicos tridimensionais (IT's-3D) também apresentam estados de superfície metálicos protegidos pela simetria de reversão temporal com uma ordem topológica descrita de maneira semelhante aos IT's-2D, mesmo sendo estruturalmente distintos. A liga $Bi_{1-x}Sb_x$ foi o primeiro material a exibir uma ordem topológica condizente com um IT-3D. Posteriormente, compostos como Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Se_2Te_3 , se mostraram ser excelentes IT's-3D, pois, devido aos seus fortes acoplamentos *spin*-órbita, possuem ordem topológica a temperatura ambiente, alto grau de pureza e descrição através de modelos efetivos, estes compostos formam a segunda geração de IT's-3D [51], [54].

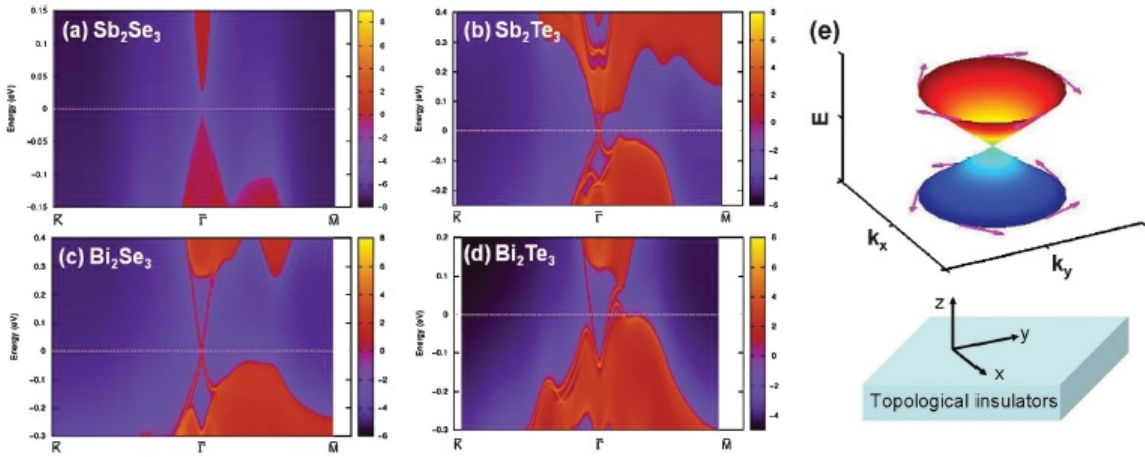


Figura 19: Dispersão da energia nas proximidades do ponto Γ , polarização e textura helical dos *spins* na superfície dos IT's-3D. (a): Dispersão de um composto isolante trivial para fins de comparação. (b)-(d): Espectro de energia dos IT's-3D da segunda geração. Apenas um cone de Dirac. (e): Polarização dos *spins* no topo da superfície de um IT-3D. As cores vermelha e azul denotam as energias e *gap* no *bulk* respectivamente. Fonte: Referência [11]

Similarmente ao que acontece em poços quânticos de $HgTe/CdTe$, a forte interação *spin*-órbita nos compostos acima, por exemplo, Bi_2Se_3 induz uma transição de fase quântica provocando a inversão de bandas nos pontos Γ da zona de Brillouin. Isso ocorre quando o parâmetro λ no termo associado a interação *spin*-órbita da Hamiltoniana ($\lambda \vec{L} \cdot \vec{S}$, onde \vec{L} e \vec{S} são os momentos angulares orbital e de *spin* respectivamente) é maior que o valor crítico, $\lambda > \lambda_c$. Este processo de inversão de paridade dos níveis eletrônicos, leva a formação de estados de superfície do tipo férmions de Dirac sem massa nos compostos da segunda geração [51], [11], [80].

A figura 19-(a-d) mostra resultados de cálculo de *ab initio* evidenciando a densidade de estados de superfície existentes nesses IT's-3D de segunda geração [55], [11]. Os estados mostrados na figura 19 estão localizados na superfície 2D dos IT's-3D. Estes estados são helicais, no sentido de que os *spins* dos elétrons são perpendiculares às direções de

movimento, figura 19-e, formando uma textura de *spins* no espaço dos momentos, além disso, no estado de superfície \vec{k} e $-\vec{k}$, possuem *spins* opostos devido à simetria de reversão temporal como exigido pelo teorema de Krammers, figura 19-f.

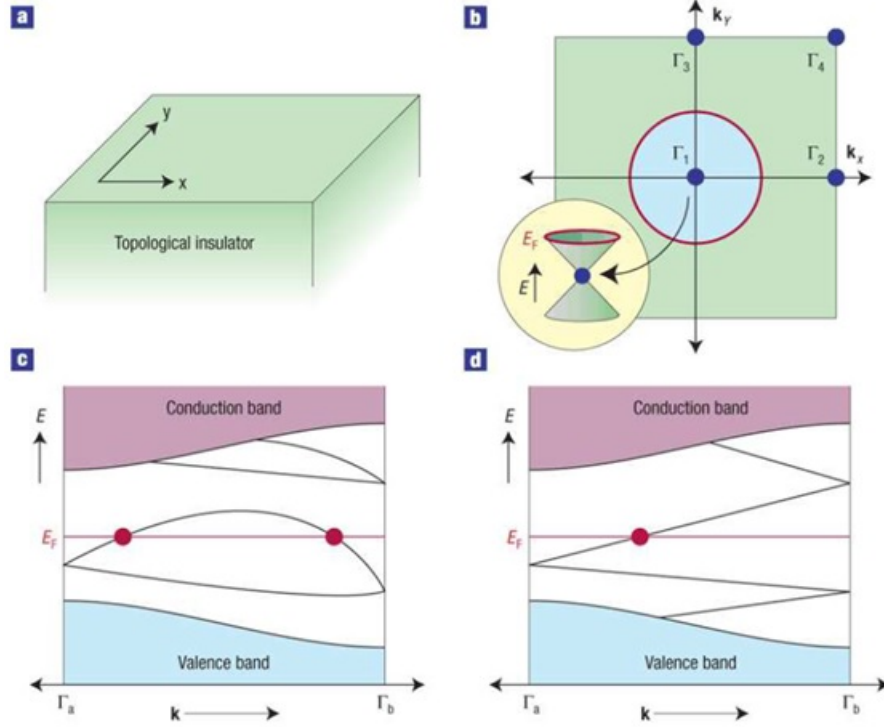


Figura 20: Em (a) é mostrada a superfície de um IT-3D no espaço real e em (b) no espaço recíproco onde os quatro pontos $\Gamma_{1,2,3,4}$ que possuem degenerescência de Krammers, são mostrados. Note que em (b) a superfície de Fermi engloba apenas um desses pontos e o respectivo cone de Dirac também é mostrado. Em (c) e (d) são mostrados a estrutura de bandas entre os dois pontos que apresentam degenerescência de Krammers, em (c) um isolante trivial e em (d) um IT-3D. Fonte: Referência [15].

Os invariantes topológicos dos IT's-3D, podem ser descritos através de uma generalização do invariante topológico do EHQS no poço quântico de $HgTe/CdTe$, IT-2D. A formulação para IT's-3D é descrita por quatro invariantes topológicos: $\nu_0, \nu_1, \nu_2, \nu_3$ ($\nu_{0,1,2,3} = \text{mod}2$) sendo que, cada um desses equivale a um ponto na zona de Brillouin que preserva a simetria de reversão temporal [51], [55], [11], [80]. Somente ν_0 é robusto na presença de desordem, o que leva a apenas duas fases topológicas distintas, possíveis de serem observadas, a $\nu_0 = 0$ que corresponde ao isolante ordinário, também chamada de isolante topológico fraco e a $\nu_0 = 1$ chamada de isolante topológico forte ou apenas isolante topológico [81]. Ambas as situações podem ser vistas na figura 20-(c-d).

Utilizando-se as simetrias dos cristais que são IT, como Bi_2Se_3 , é possível construir hamiltonianas efetivas, válidas em longos comprimentos de onda (ou baixas energias) que descrevem estes materiais. Cálculos de *ab initio* então podem ser utilizados para ajustar os parâmetros destes modelos efetivos que fornecem uma boa descrição analítica [11], [82].

Todos os três isolantes topológicos da segunda geração podem ser descritos por uma mesma Hamiltoniana efetiva dada por [54], [11], [82]:

$$H_{EF}(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k})I_{4 \times 4} + \begin{bmatrix} M(\vec{k}) & A_1 k_z & 0 & A_2(k_x - ik_y) \\ A_1 k_z & -M(\vec{k}) & A_2(k_x - ik_y) & 0 \\ 0 & A_2(k_x + ik_y) & M(\vec{k}) & -A_1 k_z \\ A_2(k_x + ik_y) & 0 & -A_1 k_z & -M(\vec{k}) \end{bmatrix}, \quad (39)$$

onde $\epsilon(\vec{k}) = C + D_1 k_z^2 + D_2 k_\perp^2$, $M(\vec{k}) = M + B_1 k_z^2 + B_2 k_\perp^2$, $I_{4 \times 4}$ é a matriz identidade 4×4 e $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$. $A_{1,2}$, $B_{1,2}$, C e $D_{1,2}$ são parâmetros determinados pelo ajuste do espectro de energia de $H_{EF}(\vec{k})$ e $k_i = -i\partial_i$ [54], [11], [80]. $M, B_{1,2} > 0$ caracteriza o regime isolante topológico.

Considerando a superfície do IT-3D no plano xy e o *bulk* na região $z < 0$ e projetando a hamiltoniana efetiva na superfície, isso nos leva a uma hamiltoniana efetiva atuando sobre os estados de superfície dada por [54], [11]:

$$H_{SUP} = C - i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}_{x,y}, \quad (40)$$

onde $v_F = A_2/\hbar \sim 10^5 m/s$. $H_{SUP}(\vec{k})$ descreve os estados de superfície com um número ímpar de cones de Dirac com degenerescência de Krammers, topologicamente no regime $\nu_0 = 1$ e protegidos pela simetria de reversão temporal [54], [11].

Estes estados superficiais possuem muitas propriedades interessantes. Por exemplo, um *gap* não pode ser aberto por impurezas não magnéticas, isto é, por aquelas que não conduzem à violação da simetria de reversão temporal, já que o teorema de Krammers garante a existência de pontos de Dirac. Por outro lado, impurezas de caráter magnético que quebram a simetria de reversão temporal, podem abrir um *gap* nos estados superficiais do material [54]. Esses estados suportam um movimento eletrônico em qualquer direção ao longo da superfície do IT tridimensional. Os *spins* dos elétrons confinados à superfície do material é correlacionado com seu momento eletrônico de tal forma que seu momento angular de *spin* é sempre perpendicular a \vec{k} e fica contido na superfície do IT. A reversão temporal obriga estados com vetores de onda opostos $-\vec{k}$ e \vec{k} terem orientações de *spins* opostas [55], [11], [4].

IT's-3D exibem propriedades eletromagnéticas exóticas quando a simetria de reversão temporal é mantida no *bulk* e, ao mesmo tempo, violada em sua superfície. Nessa situação, os estados de superfície adquirem *gap* de energia, o que leva a um EHQ na superfície do IT-3D. Isso implica em manifestações macroscopicamente mensuráveis através da resposta eletromagnética dos IT's-3D. Tais respostas carregam as características topológicas dos estados de superfície, conduzindo ao efeito magnetoelétrico topológico e introduzindo uma série de modificações no comportamento da luz ao interagir com os IT's-3D [55], [11], [83].

4 Fracionalização no Poliacetileno e Grafeno

Recentemente foi descoberto que alguns estados da matéria exibiam características incomuns referente aos férmions que constituem estes estados [57], [17], [84]. Por exemplo, em certos estados, os férmions podem se comportar de tal maneira que sua carga seja fracionada, ou seja, uma fração da carga do elétron (elétrons com carga $e/2$), também pode existir a separação da carga e do *spin*, cada uma delas associadas a outras novas “partículas” uma contendo somente a carga (chamado *chargeon*) e outra contendo somente o *spin* (chamado *spinon*) [57], [17], [85]. Esses fenômenos foram previstos para acontecer em sistemas cuja dispersão da banda energética tem caráter linear próximo à energia de Fermi e com surgimento de estados localizados e isolados no meio do *gap* aberto por um campo de interação no sistema, estes estados podem abrigar carga fracionária.

O primeiro material que exibiu estados que possuem este comportamento incomum foi o poliacetileno e posteriormente em outros materiais como o grafeno e isolantes topológicos [57], [17], [86]. Nesta seção iremos falar sobre a fracionalização de uma maneira geral, em seguida discutir sobre esse fenômeno no poliacetileno, em um sistema bidimensional formado por uma rede quadrada e no grafeno.

4.1 Fracionalização de elétrons

Dirac propôs uma equação para descrever elétrons relativísticos com *spin* 1/2:

$$H_D = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m)\Psi = i\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad (41)$$

onde $\alpha_i = \begin{bmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i \end{bmatrix}$, com $i = x, y, z$, $\beta = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\mathbf{p} = -i\nabla$ e m é o parâmetro relativo à massa e σ_i são as matrizes de Pauli e considerando unidades naturais ($\hbar = 1$) [60], [87].

O espectro de energia do autovalor E é obtido através da equação de autovalor com as autofunções Ψ_E da seguinte maneira:

$$H_D\Psi_E = (\alpha \cdot \mathbf{p} + \beta m)\Psi_E = E\Psi_E. \quad (42)$$

Isto é interpretado da seguinte maneira, considerando o vácuo, para $E > 0$ os estados estão vazios, pois, como o elétron tem energia positiva ele pode ocupar estes estados, para $E < 0$ os estados estão ocupados, pois, como estes estados possuem energia negativa, eles são inacessíveis para o elétron com energia positiva, logo tem-se essa interpretação de que todos os estados já estão ocupados e se $m \neq 0$ então m produz um *gap* de energia entre os estados vazios e os preenchidos, portanto, m nos diz os quão separados estão essas duas possibilidades [57], [86], [88].

E se agora o parâmetro de massa não for mais constante, mas sim variar com a posição, $m \rightarrow m(\mathbf{r})$, o que acontece com o espectro de energia? Rebbi e Rossi estudaram este problema e encontram que além dos estados com energia positiva e negativa, também surge um estado isolado com energia nula, também chamado de modo zero [57], [86].

Qual a importância desse estado modo zero? Como visto, estados com energia positiva são associados a estados vazios e energia negativa a estados ocupados, ou seja, os estados com energias positivas carregam carga $-Q$, pois, estão em deficit por estarem vazios e os estados com energia negativa carregam carga Q , pois, estão completamente preenchidos. O espectro de energia em torno do modo zero é simétrico, portanto, a quantidade de estados com energia positiva é a mesma com energia negativa, ou seja, a probabilidade do estado modo zero estar ocupado é a mesma dele estar vazio. Se ambas as possibilidades são igualmente prováveis é como se metade de um férmion que está no modo zero ocupar-se um estado e a outra metade tivesse “ desaparecido ”. Isto implica que só restaria metade da carga de um férmion, pois, só metade dele é possível de ocupar o estado (já que a outra metade “ desapareceu ”), assim a carga no modo zero seria $-Q/2$ caso este estado esteja vazio ou $Q/2$ caso esteja preenchido [86], [87], [88].

4.2 Poliacetileno e a instabilidade de Peierls

O poliacetileno é um material que consiste em um arranjo linear de átomos de carbono, figura 21, onde cada átomo está distante cerca de 1Å do outro. Ele foi o primeiro material estudado que demonstrou ser possível encontrar estados de modo zero [17], [58], [16].

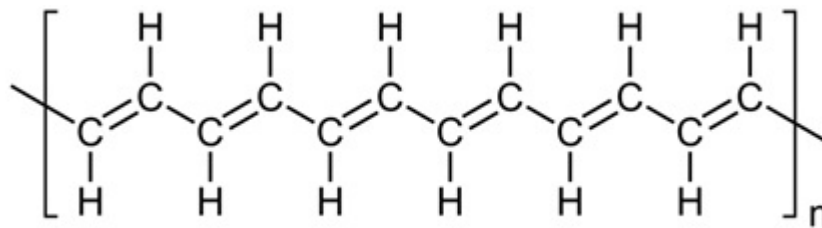


Figura 21: Arranjo linear de carbono (poliacetileno). Fonte: Referência [16].

Normalmente os átomos estão estacionários e rígidos no arranjo, ou seja, o arranjo é bem rígido e os elétrons que percorrem a cadeia não sofrem nenhum fenômeno estrutural do arranjo, entretanto, os átomos podem oscilar em torno da posição em que ele se encontra no arranjo rígido, por exemplo, por agitação térmica [57], [17], [58], [86], [87].

É conhecido que no poliacetileno o arranjo dos átomos de carbono é instável, então os átomos devem oscilar em torno da posição inicial na configuração rígida inicial. Toda via, Rudof Peierls previu que em vez de oscilar em torno do ponto inicial do arranjo rígido, os átomos primeiro se deslocam 0.4Å para a esquerda ou direita e posteriormente começam a oscilar em torno de uma nova posição, ligeiramente diferente da posição inicial do arranjo

rígido, isto é chamado de instabilidade de Peierls, figura 22 [59], [16].

Devido à simetria de reflexão do arranjo, não a preferência entre direita e esquerda no deslocamento dos átomos, o material escolhe uma das duas configurações quebrando a simetria de reflexão do arranjo e dando origem a estados fundamentais duplamente degenerados, denotaremos estes estados de A e B.

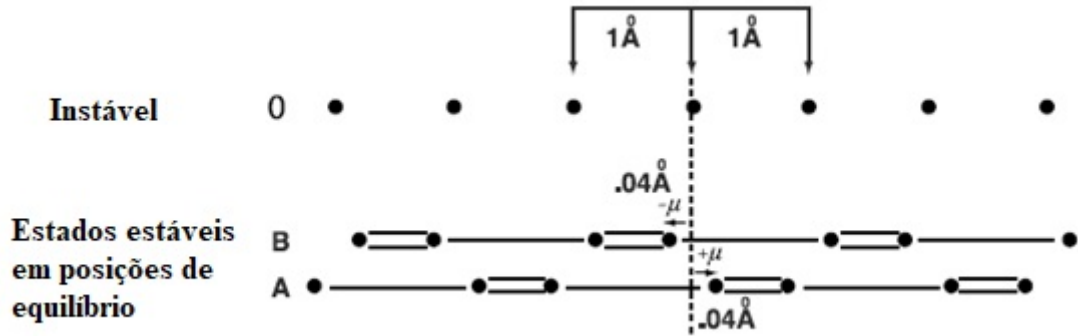


Figura 22: Em 0 os átomos estão igualmente espaçados por 1 \AA entre eles, esta configuração é instável. A e B mostra a instabilidade de Peierls ajustando a distância entre os átomos vizinhos em 0.4 \AA , estas configurações são estáveis. Fonte: Referência [17].

Supondo que este deslocamento é descrito por um campo escalar $\phi = \phi(x)$, que depende da posição ao longo do arranjo, também chamado de campo de fônon, devido à instabilidade de Peierls e após cálculos dinâmicos, a densidade de energia em função de ϕ tem a forma de um duplo poço, figura 23.

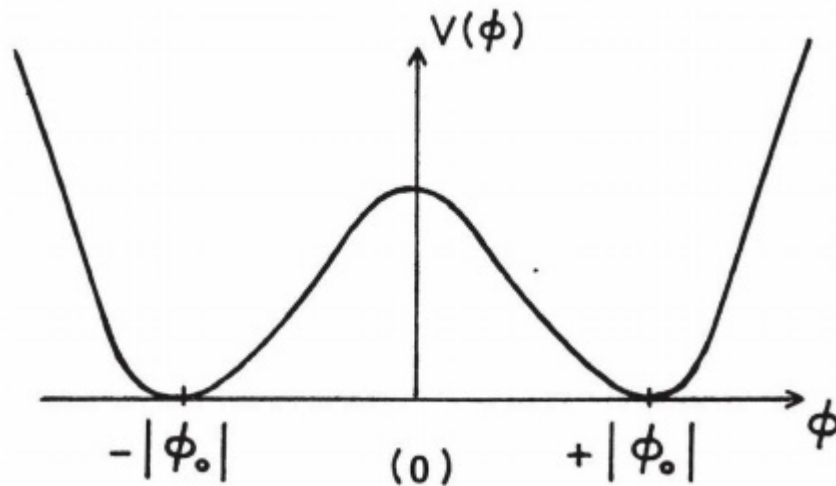


Figura 23: A densidade de energia V em função do campo escalar ϕ . O ponto simétrico estacionário $\phi = 0$ é instável. Estados estacionários estáveis são encontrados nos pontos $\phi = |\phi_0|$ e $\phi = -|\phi_0|$. Fonte: Referência [17].

O ponto simétrico $\phi = 0$ é instável, o sistema em seu estado fundamental deve escolher

entre os dois estados fundamentais equivalentes $\phi = \pm|\phi_0|$. Neste estado fundamental, o campo do fônon tem valores uniformes e independentes da posição e leva a um *gap* no espectro de excitação dos elétrons [17], [16].

Sempre que o estado fundamental é degenerado, existem estados adicionais do sistema para os quais o campo de fônon não é constante. Neste caso, ele é uma função da posição x , ele interpola, quando x passa de negativo ao infinito positivo, entre os estados fundamentais permitidos, figura 6. Os kinks (ϕ_s) são os famosos sólitons que fazem a ligação entre os dois estados degenerados fundamentais A e B, figura 6. Um representa uma ligação química padrão por uma ligação química dupla conectando átomos que estão mais próximos e a ligação simples conectando aqueles que estão mais distantes, figura 24 [17], [16].

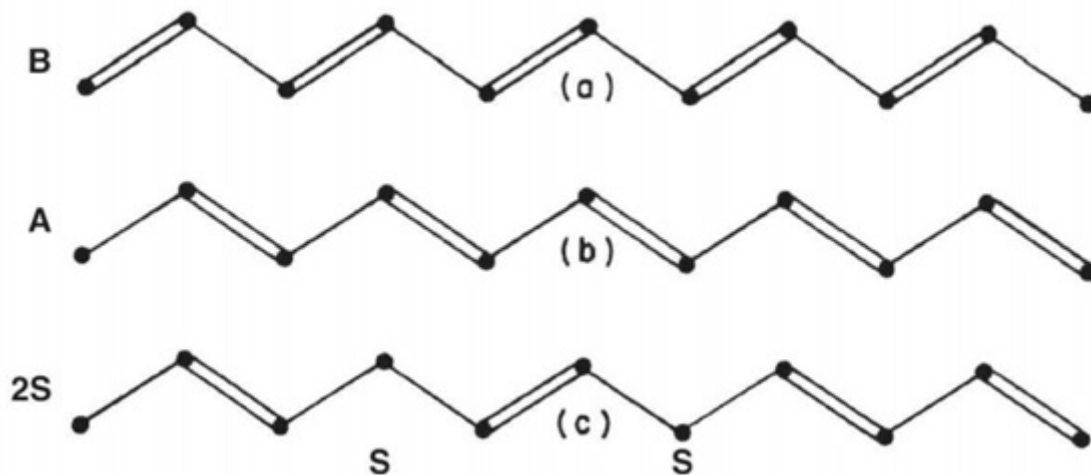


Figura 24: a) e b) Padrões de ligação química dos estados B e A, c) Dois sólitons inseridos no estado A. Fonte: Referência [16].

Considere agora uma amostra de poliacetileno no estado A e com dois sólitons ao longo do arranjo. Vamos contar o número de *links* onde os sólitons estão presentes, para isso basta examinar às duas cadeias somente nas regiões que estão diferentes. O estado fundamental A exibe 5 *links*, figura 24-b, enquanto a adição de dois sólitons o número de links é 4, figura 24-c, assim estado de sóliton exibe um déficit de um *link*. Se agora imaginarmos separar os dois sólitons a uma grande distância, de modo que um aja independente do outro, então cada sóliton carrega um deficit de metade de um *link*, e com isso metade dos números quânticos do *link*, por exemplo, a carga é dividida entre os dois estados. Esta é a essência da fracionalização do férmion [16].

Deve-se enfatizar que estamos descrevendo a situação de um elétron se movendo em torno de uma molécula de dois centros, gastando “metade” do tempo com um núcleo e “metade” com o outro. Pode-se dizer que o elétron é dividido ao meio na média, no entanto, qualquer flutuação pode ser considerada grande. No nosso exemplo, a fracionalização é

sem flutuações no limite em que os sólitons estão infinitamente separados, assim eles alcançam auto estados com autovalores fracionários [16].

Note que não foi feita menção a topologia, apenas foi feita uma contagem de *links* no arranjo. Esse conceito matemático só surge quando uma descrição analítica é feita. Devido à dispersão de energia do poliacetileno ser linear próximo ao nível de Fermi, podemos descrever o termo cinético do sistema como uma equação matricial do tipo Dirac [57], [17], [58]. A instabilidade de Peierls perturba o movimento dos férmions e átomos representado pelo campo de fônon. A equação de Dirac, equação (42), é unidimensional e envolve duas componentes correspondentes aos dois pontos de Dirac:

$$H(\phi)\psi = (\sigma_z p + \sigma_y \phi)\psi = E\psi. \quad (43)$$

O campo de fônon satisfaz a equação,

$$-\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = V'(\phi(x)), \quad (44)$$

onde V é o potencial com duplo poço figura 23.

Note que σ_x anti comuta com as matrizes na hamiltoniana de Dirac, portanto, se ψ_E é uma autofunção com autovalor E , $\sigma_x\psi_E$ carrega autovalor $-E$ e um estado isolado deve corresponder a um auto valor nulo. As soluções de energia positiva correspondem a banda de condução e as soluções de energia negativa correspondem a banda de valência, que no estado fundamental estão completamente preenchidos [17], [58], [16]. Em resumo, temos:

$$H_F = \psi^\dagger(\alpha \cdot \mathbf{p})\psi + \phi\psi^\dagger\beta\psi, \quad (45)$$

onde o primeiro termo da equação (45) é um termo cinético referente a linearização no nível de Fermi e o segundo termo se refere a instabilidade de Peierls, quando $\phi = \phi_0$ for um valor constante dará origem a uma massa efetiva que gera um *gap* $|\phi_0|$ no espectro de energia e quando $\phi = \phi_s(\mathbf{r})$, existirá um sóliton ϕ_s que suporta um estado localizado e isolado com um auto valor de energia nula que é solução da hamiltoniana. Este estado isolado é um auto estado de σ_x e ele carrega o número de elétrons $1/2$ quando está cheio e $-1/2$ quando está vazio [57], [17], [58], [16].

4.3 Fracionalização em uma rede quadrada

O grafeno é um material bidimensional, mas antes de discutirmos sobre sua fracionalização vamos analisar um sistema simples que também é bidimensional, a extensão do poliacetileno em duas dimensões que é uma rede quadrada de átomos de carbono igualmente espaçados com célula unitária contendo quatro átomos de carbono, figura 25-a.

Podemos escrever a hamiltoniana desse sistema como [18], [89]:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.). \quad (46)$$

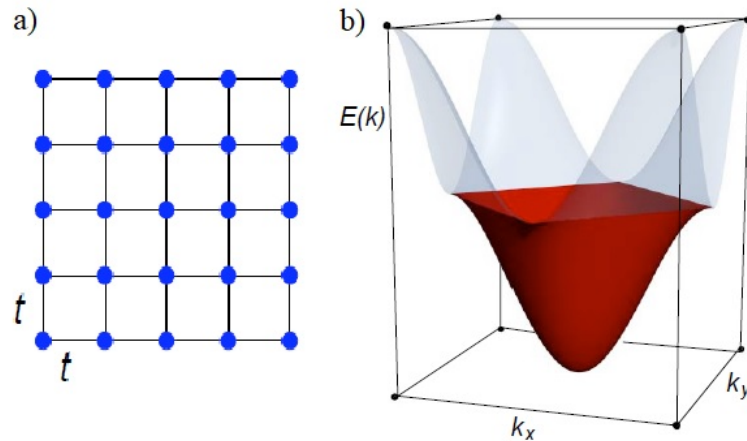


Figura 25: a) Exemplo de um rede quadrada onde os átomos de carbono estão igualmente espaçados nos vértices do quadrado. O termo t é relativo ao acoplamento entre os átomos. b) Espectro de energia na primeira zona de Brillouin, a zona em vermelho é a banda de valência e a zona transparente é a banda de condução. Fonte: Referência [18].

Note que não existe *gap* de energia entre as bandas de valência e condução, portanto, essa estrutura é um metal bidimensional. Vamos considerar agora um efeito análogo à instabilidade de Peierls, ou seja, vamos considerar que os átomos podem se acoplar de forma diferente com seu vizinho, figura 26:

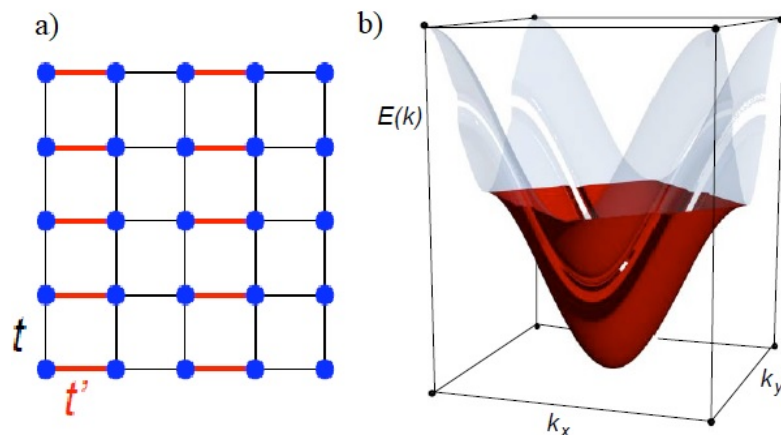


Figura 26: a) Rede quadrada com acoplamento diferente entre os primeiros vizinhos caracterizados pelos termos t e t' . b) Espectro de energia na primeira zona de Brillouin, a zona em vermelho é a banda de valência e a zona transparente é a banda de condução. Note que existem *gaps* de energias em ambas as bandas devido aos acoplamentos serem diferentes. Fonte: Referência [18].

Observe que devido ao termo de acoplamento ser diferente em relação a cada vizinho, surge *gaps* de energia na banda de valência e na banda de condução, entretanto, existem regiões onde essas duas bandas se tocam, portanto, essa estrutura ainda é um metal. Vamos considerar agora que o sistema está sujeito a ação de um campo magnético transversal e o termo de acoplamento entre os átomos vizinhos é constante, portanto, a hamiltoniana do sistema é dada por [18]:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} \left(e^{i\theta_{ij}} c_i^\dagger c_j + h.c \right), \quad (47)$$

onde $\theta_{ij} = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_i^j \vec{A} \cdot d\vec{r}$ é o fator de Peierls relativo ao fluxo magnético em cada célula de modo que $\sum \theta_{ij} = \pi$, figura 27-a [18].

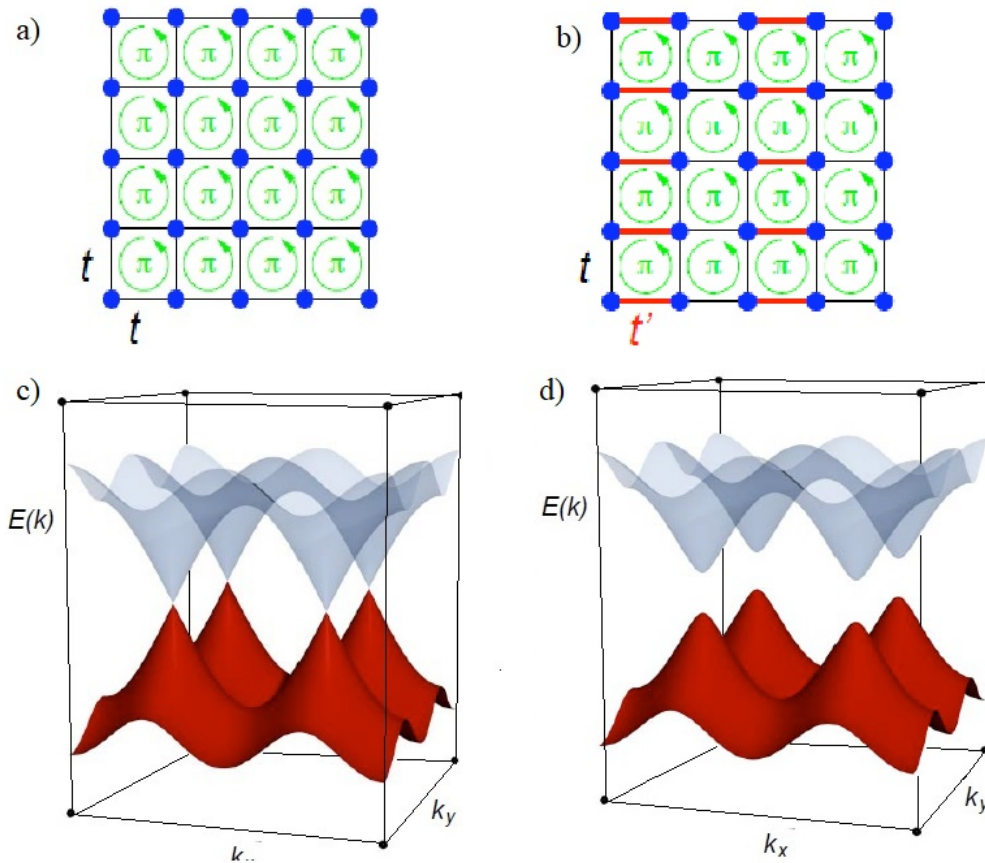


Figura 27: a) Rede quadrada sujeita a um campo magnético transversal gerando um fluxo magnético π em cada célula unitária. b) Rede quadrada sujeita a um campo magnético transversal gerando um fluxo magnético π em cada célula unitária e acoplamentos distintos entre os átomos vizinhos. c) Espectro de energia na primeira zona de Brillouin de a), a zona em vermelho é a banda de valência e a zona transparente é a banda de condução, existem quatro pontos de Dirac d)Espectro de energia de b), existem *gaps* entre a banda de valência e de condução. Fonte: Referência [18].

Observe que o a estrutura apresenta uma banda de energia de um semi-metal contendo quatro pontos de Dirac 27-c [18]. Considerando que o acoplamento entre os primeiros vi-

zinhos não é constante, similar a instabilidade de Peierls, os átomos de carbono podem acoplar com seus vizinhos de maneira forte ou fraca, figura 27-b. Devido a este acoplamento diferente, irá surgir *gaps* de energia nos quatro pontos de Dirac na banda de energia 27-d [18].

Assim como no poliacetileno, é possível existir um estado no meio do *gap* com energia nula que carrega carga fracionária. Esse estado de meio de *gap* é resultado de um defeito topológico [18]. Considere um átomo de carbono da rede quadrada, ele pode ligar fortemente com seu vizinho de quatro maneiras distintas (esquerda, direita, cima, baixo) figura 28. Cada uma dessas maneiras representa um domínio distinto, ou seja, um estado fundamental diferente [18].

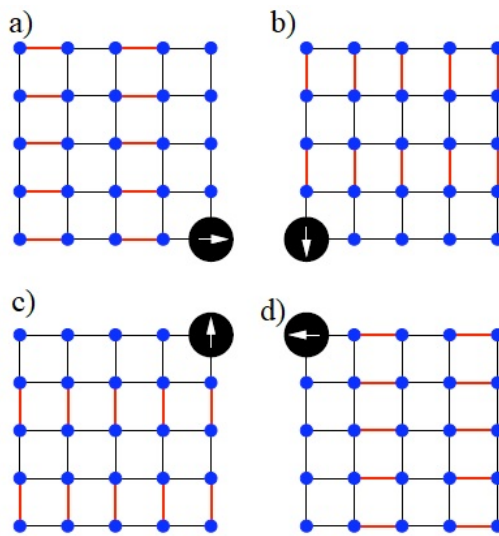


Figura 28: Diferentes formas de acoplamento. a) O acoplamento ocorre com o vizinho da direita. b) O acoplamento ocorre com o vizinho de baixo c) O acoplamento ocorre com o vizinho de cima. d) O acoplamento ocorre com o vizinho da esquerda. Fonte: Referência [18].

Se juntarmos todos esses quatro domínios distintos, resultará em um defeito topológico no modelo chamado de vórtice [18], como podemos ver na figura 29.

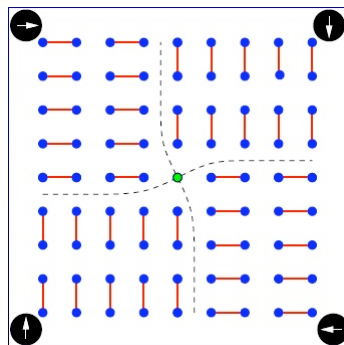


Figura 29: O conjunto dos quatro domínios formam um vórtice em torno de uma região central referente ao estado isolado no meio do *gap*. Fonte: Referência [18].

Na presença deste vórtice, poderá existir um estado ligado com energia nula e este poderá carregar carga fracionária. Na figura 30 temos o perfil da densidade de carga e da carga que o estado carrega [18], [89], [19]. Este mesmo efeito acontece no sistema bidimensional em que temos uma célula unitária na forma de hexágono, caso este do grafeno.

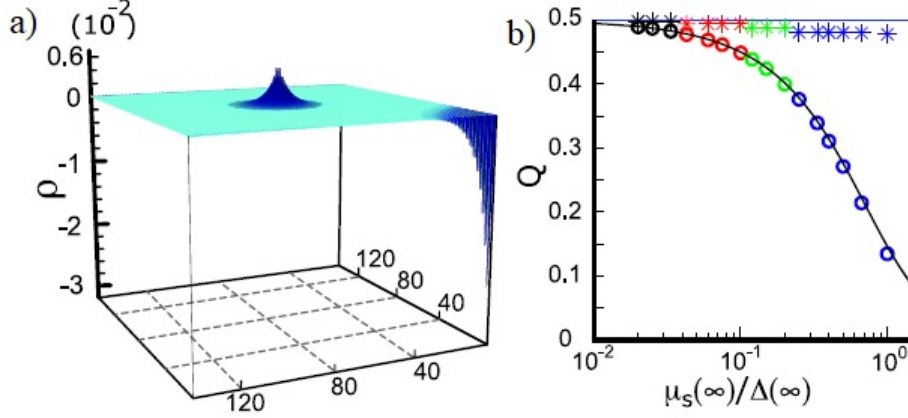


Figura 30: a) O perfil da densidade fermiônica de um vórtice com carga 1 em uma rede quadrada de tamanho 144x144 sítios. b) O número fermiônico como função da variável $\mu_s(\infty)/\Delta(\infty)$ na presença de um vórtice com carga 1 ou com a adição de um vórtice com carga 1/2. O potencial químico μ_s toma valores: $0.01t$ (Preto), $0.03t$ (vermelho), $0.06t$ (verde) e $0.1t$ (azul) Fonte: Referência [19].

4.4 Distorção de Kekulé no grafeno

Assim como na instabilidade de Peierls onde o átomo de carbono tinha duas possibilidades de acoplamento com seus vizinhos da direita e da esquerda, temos no grafeno algo semelhante, chamado de distorção de Kekulé, figura 31 [17], [20]. A distorção de Kekulé consiste em variar o parâmetro de energia t que mede a força do acoplamento entre os primeiros vizinhos, ou seja, vamos variar a distância dos átomos de carbono.

Através do modelo de tight-binding e desconsiderando o *spin*, a hamiltoniana no grafeno é [90], [91]:

$$H = - \sum_{\mathbf{r} \in \Lambda_A} \sum_{i=1}^3 (t + \delta t_{\mathbf{r},i}) a_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\mathbf{s}_i} + H.c, \quad (48)$$

onde Λ_A se refere a sub-rede A. Note que para $\delta t_{\mathbf{r},i} = 0$, retornamos para a hamiltoniana do grafeno, equação (10), portanto, a hamiltoniana (48) nada mais é do que a hamiltoniana do grafeno com um termo de perturbação no parâmetro de energia, ou seja, esta perturbação é uma variação do parâmetro de energia relativo aos primeiros vizinhos, um átomo da sub-rede A e o outro da sub-rede B (distorção de Kekulé). Podemos interpretar isto como

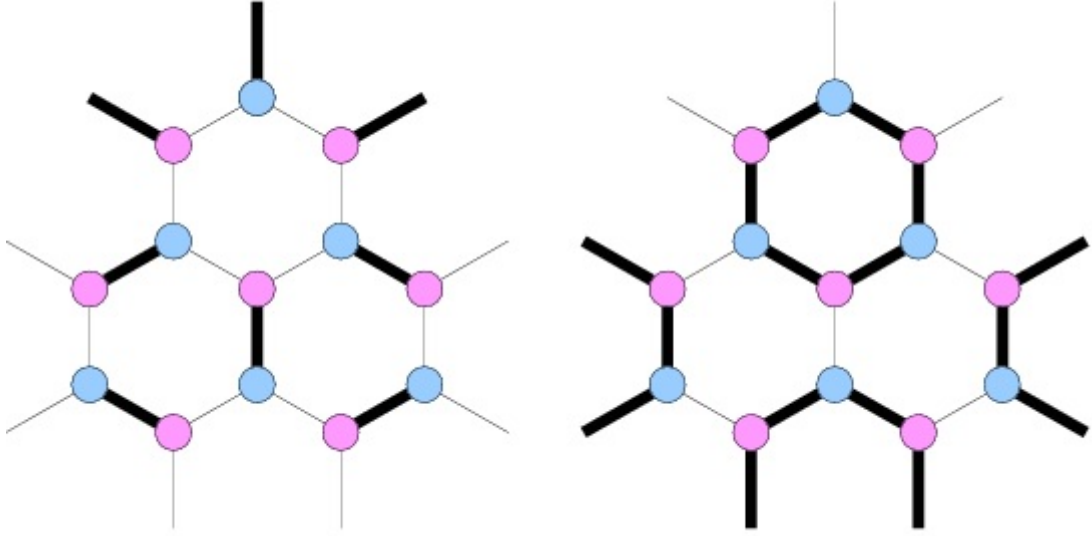


Figura 31: Esquemática da distorção de Kekulé, as linhas grossas e finas representam o forte e fraco acoplamento entre os átomos, respectivamente. Fonte: Referência [20].

uma variação da distância entre os dois cones de Dirac, assim fixando um deles e variando o outro temos a seguinte modulação [92]:

$$\delta t_{\mathbf{r},i} = \frac{1}{3} \Delta(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{s}_i} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \quad (49)$$

onde $\mathbf{G} = \mathbf{K} - \mathbf{K}'$ é o vetor que acopla os cones de Dirac, $\Delta(\mathbf{r})$ é um parâmetro complexo que controla a força do acoplamento. Esta variação abre um *gap* de energia entre as camadas de valência e condução, figura 32. Os vetores de estados que representam individualmente as sub-redes A e B são representados, respectivamente, por:

$$\psi_A^T = (u_a(\mathbf{r}), v_a(\mathbf{r})), \quad (50)$$

$$\psi_B^T = (u_b(\mathbf{r}), v_b(\mathbf{r})). \quad (51)$$

Podemos escrever o vetor de estado completo que contém as duas sub-redes como uma mistura entre os vetores de estados (50) e (51) da seguinte maneira [21]:

$$\Psi^T = (u_b(\mathbf{r}), u_a(\mathbf{r}), v_a(\mathbf{r}), v_b(\mathbf{r})). \quad (52)$$

Desta maneira, podemos reescrever a hamiltoniana (48) em termos desse vetor de estado completo como [21]:

$$H = \int d^2r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) K_D \Psi(\mathbf{r}), \quad (53)$$

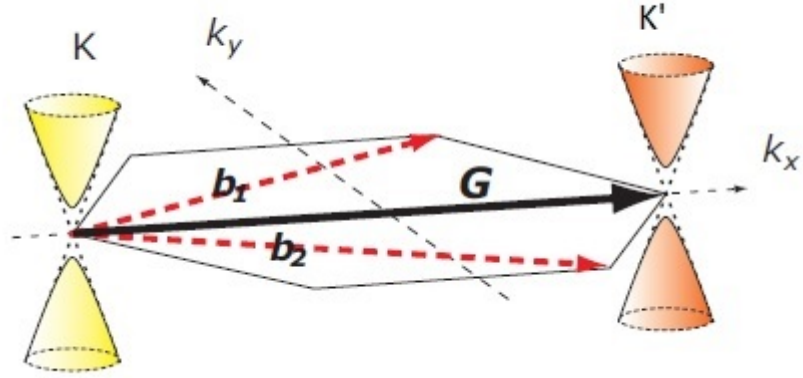


Figura 32: A primeira zona de Brillouin é mostrada com os cones de Dirac nos pontos K e K' desta zona, o vetor \mathbf{G} conecta os pontos e o termo de massa $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0(\mathbf{r})$ da distorção de Kekulé abre o *gap* de energia. Fonte: Referência [21].

$$K_D = \begin{pmatrix} 0 & -2i\partial_z & \Delta(\mathbf{r}) & 0 \\ -2i\partial_z & 0 & 0 & \Delta(\mathbf{r}) \\ \bar{\Delta}(\mathbf{r}) & 0 & 0 & 2i\partial_z \\ 0 & \bar{\Delta}(\mathbf{r}) & 2i\partial_z & 0 \end{pmatrix}, \quad (54)$$

onde K_D é o *kernel* de Dirac, $z = x + iy$ e $\partial_z = \frac{\partial_x - i\partial_y}{2}$. Se $\Delta(\mathbf{r}) = 0$, recuperamos a hamiltoniana do grafeno, se $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0(\mathbf{r})$, onde $\Delta_0 \in R$, então a dispersão de energia assume a forma $E_{\mathbf{K}}(\mathbf{p}) = \pm\sqrt{|\mathbf{p}|^2 + \Delta_0^2}$, ou seja, abrimos um *gap* de massa no espectro de energia.

O *kernel* de Dirac é simétrico sobre reversão temporal, esta simetria origina no fato dos termos de acoplamento do modelo tight-bind serem reais [21]. Além disso, a lei de transformação $a_{\mathbf{r}} \rightarrow -a_{\mathbf{r}}$ e $b_{\mathbf{r}+s_i} \rightarrow +b_{\mathbf{r}+s_i}$ de uma única partícula garante que quaisquer auto estados do *kernel* de Dirac com energia positiva pode ser associado a auto estados com energia negativa, enquanto estados de modo zero não pode ser associado a outros auto estados. Esta propriedade é chamada de propriedade de simetria de sub-rede (SLS) [21], [93], [94].

Como visto anteriormente, uma maneira possível de encontrar estados que suportam carga fracionada é verificar a existência de estados que satisfazem a equação de autovalor nulo, logo:

$$H\Psi_0 = 0, \quad (55)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -2i\partial_z & \Delta(\mathbf{r}) & 0 \\ -2i\partial_z & 0 & 0 & \Delta(\mathbf{r}) \\ \bar{\Delta}(\mathbf{r}) & 0 & 0 & 2i\partial_z \\ 0 & \bar{\Delta}(\mathbf{r}) & 2i\partial_z & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_b \\ u_a \\ v_a \\ v_b \end{pmatrix} = 0. \quad (56)$$

Assim, temos um conjunto de quatro equações, duas associadas a sub-rede A e duas a sub-rede B. Utilizando coordenadas polares ($z = re^{i\theta}$), o conjunto de equações para a sub-rede A são [21]:

$$\left(\partial_r - i\frac{\partial_\theta}{r}\right)u_a(\mathbf{r}) + i\Delta(\mathbf{r})e^{i\theta}v_a(\mathbf{r}) = 0, \quad (57)$$

$$i\Delta(\bar{\mathbf{r}})e^{-i\theta}u_a(\mathbf{r}) - \left(\partial_r + i\frac{\partial_\theta}{r}\right)v_a(\mathbf{r}) = 0. \quad (58)$$

E o conjunto de equações associadas a sub-rede B são:

$$\left(\partial_r - i\frac{\partial_\theta}{r}\right)u_b(\mathbf{r}) + i\Delta(\mathbf{r})e^{-i\theta}v_b(\mathbf{r}) = 0, \quad (59)$$

$$i\Delta(\bar{\mathbf{r}})e^{i\theta}u_b(\mathbf{r}) - \left(\partial_r + i\frac{\partial_\theta}{r}\right)v_b(\mathbf{r}) = 0. \quad (60)$$

Como $\Delta(\mathbf{r})$ é complexo, vamos escreve da seguinte maneira, $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta_0(\mathbf{r})e^{i(n\theta+\lambda)}$, onde $\Delta_0(\mathbf{r}) \in R$ e $n \in I$ está associado a quantas maneiras distintas podemos fazer o acoplamento e λ é um parâmetro de fase. Logo existem $|n|$ soluções independentes, vamos encontrar uma relativa a sub-rede A e outra para a sub-rede B. Assumindo $n = -1$ para as equações da sub-rede A têm-se:

$$\left(\partial_r - i\frac{\partial_\theta}{r}\right)u_a(\mathbf{r}) + i\Delta_0(\mathbf{r})e^{i\lambda}v_a(\mathbf{r}) = 0, \quad (61)$$

$$i\Delta_0(\mathbf{r})e^{-i\lambda}u_a(\mathbf{r}) - \left(\partial_r + i\frac{\partial_\theta}{r}\right)v_a(\mathbf{r}) = 0. \quad (62)$$

Esse par de equações tem como solução [93], [94]:

$$u_a(r, \theta) = \frac{e^{i(\frac{\lambda}{2} + \frac{\pi}{2})}}{2\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\int_0^r dr' \Delta_0(r')}}{\sqrt{\int_0^\infty dr e^{-2\int_0^r dr' \Delta_0(r')}}} \quad (63)$$

$$v_a(r, \theta) = \bar{u}_a(r, \theta) \quad (64)$$

Para a sub-rede B, vamos considerar $n = 1$. Encontramos as mesmas soluções apenas substituindo $u_a(r, \theta) \rightarrow v_b(r, \theta)$ e $v_a(r, \theta) \rightarrow u_b(r, \theta)$. Portanto, encontramos dois estados que possuem energia nula, cada um associado a uma sub-rede. O gerador desses estados é o parâmetro de energia que acopla os átomos $\Delta(\mathbf{r})$, também chamado de vórtice [21].

Para obter a carga ligada ao vórtice, vamos analisar qual foi a variação da densidade local de estados ($\delta\nu(\mathbf{r}, E) = \nu_{|n|=1}(\mathbf{r}, E) - \nu_{|n|=0}(\mathbf{r}, E)$) do *kernel* de Dirac com ($|n| = 1$) e sem ($|n| = 0$) a distorção de Kekulé. A densidade local de estados e a densidade total de estados são, respectivamente [21]:

$$\nu_{|n|}(\mathbf{r}, E) = \int dE' \psi_{|n|,E'}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{|n|,E'}(\mathbf{r}) \delta(E - E'), \quad (65)$$

$$\nu_{T|n|} = \int d^2\mathbf{r} \nu_{|n|}(\mathbf{r}, E). \quad (66)$$

Por causa da SLS, qualquer auto estado com energia negativa, $\psi_{-E}(\mathbf{r})$, corresponde a um auto estado com energia positiva, $\psi_E(\mathbf{r})$, através de uma transformação unitária. Por conta disso, a densidade local de estados é simétrica com respeito ao zero de energia, porém, quando consideramos o efeito da distorção de Kekulé, surge um estado de modo zero que não pode ser associado a nenhum outro auto estado. Assim podemos reescrever as densidades locais de estado com e sem a distorção de Kekulé como sendo, respectivamente [21]:

$$\nu_{|n|=1}(\mathbf{r}, E) = 2 \int_{-\infty}^{0-} dE' \psi_{|n|=1,E'}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{|n|=1,E'}(\mathbf{r}) \delta(E - E') + |\psi_0(\mathbf{r})|^2, \quad (67)$$

$$\nu_{|n|=0}(\mathbf{r}, E) = 2 \int_{-\infty}^{0-} dE' \psi_{|n|=0,E'}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{|n|=0,E'}(\mathbf{r}) \delta(E - E'), \quad (68)$$

onde ψ_0 é o estado modo zero que é normalizável. Portanto, a variação da densidade local de estados é:

$$\delta\nu(\mathbf{r}, E) = 2 \int_{-\infty}^{0-} dE' \left[\psi_{|n|=1,E'}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{|n|=1,E'}(\mathbf{r}) - \psi_{|n|=0,E'}^\dagger(\mathbf{r}) \psi_{|n|=0,E'}(\mathbf{r}) \right] \delta(E - E') + |\psi_0(\mathbf{r})|^2. \quad (69)$$

Vamos denotar o primeiro termo do lado direito da equação (69) por $2\delta\nu(\mathbf{r}, E < 0)$ que nada mais é do que a diferença da densidade de estados locais com e sem a distorção de Kekulé. A distorção de Kekulé muda a densidade local de estados, porém, ela não muda o número total de estados, desta forma, temos [21]:

$$\begin{aligned} \delta\nu_T &= \nu_{T|n|=1} - \nu_{T|n|=0} = \int d^2\mathbf{r} \delta\nu(\mathbf{r}, E) = 0 \\ \int d^2\mathbf{r} \delta\nu(\mathbf{r}, E) &= 2 \int d^2\mathbf{r} \delta\nu(\mathbf{r}, E < 0) + \int d^2\mathbf{r} |\psi_0(\mathbf{r})|^2 = 0 \\ 2 \int d^2\mathbf{r} \delta\nu(\mathbf{r}, E < 0) &+ \int d^2\mathbf{r} |\psi_0(\mathbf{r})|^2 = 0. \end{aligned} \quad (70)$$

Como ψ_0 é normalizável, então $\int d^2\mathbf{r} |\psi_0(\mathbf{r})|^2 = 1$, assim:

$$\int d^2\mathbf{r} \delta\nu(\mathbf{r}, E < 0) = -\frac{1}{2}. \quad (71)$$

Note que existe uma diferença entre a densidade de estados na banda de valência devido à existência do estado modo zero, metade dos estados desta banda são “ perdidos ” para compensar a existência do estado com energia nula. A diferença de carga da

camada de valência totalmente ocupada com e sem o vórtice $\Delta(\mathbf{r})$ é $-\frac{e}{2}$. Temos um par de vórtice, $n = 1$ associado a sub-rede A e $n = -1$ associado a sub-rede B, se eles estiverem desocupados, então sua carga é $-\frac{e}{2}$, se eles estiverem ocupados, então sua carga é $-\frac{e}{2} + e = \frac{e}{2}$ [21], [93], [94].

Se considerarmos o *spin* do elétron, as pseudo-partículas que correspondem aos estados modo zero irão mudar. Note que no caso sem *spin* têm-se duas soluções, cada uma associada a um cone de Dirac com carga $\pm e/2$ que depende do estado estar ou não ocupado. Se agora temos o *spin*, então o déficit de estados da equação (71) não é mais $-1/2$ mas sim -1 , pois, temos duas possibilidades de *spin*.

O primeiro caso acontece quando o estado está completamente desocupado, portanto, a carga desse estado é $-e$, pois, o deficit de estados agora é -1 . Como temos duas pseudo-partículas que compõe este estado, uma carrega *spin* up e a outra, devido à exclusão de Pauli, carregam *spin* down. Logo, este estado possui carga $-e$ e *spin* nulo, pois, o *spin* total será $S = 1/2 - 1/2 = 0$.

O segundo caso acontece quando o estado modo zero está parcialmente preenchido, ou seja, uma pseudo-partícula carrega carga $-e/2$ e a outra carrega carga $e/2$, logo este estado terá duas possibilidades finais, carga 0 e *spin* $S = \pm 1/2$.

A terceira possibilidade acontece quando o estado está completamente preenchido, ou seja, a carga é $e/2 + e/2 = e$. Devido à exclusão de Pauli, uma pseudo-partícula tem *spin* up e a outra down, logo o *spin* total do estado será $S = -1/2 + 1/2 = 0$. Portanto, quando consideramos o *spin* do elétron, a fracionalização agora não é mais da carga, mas sim ocorre uma separação *spin*-carga.

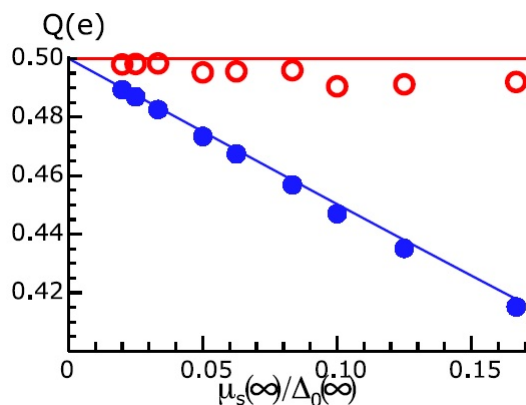


Figura 33: Fracionalização da carga Q em unidade da carga do elétron e em função da variável que relaciona o potencial químico $\mu_s(\infty)$ e o *gap* de energia Δ_0 da distorção de Kekulé na presença de um campo magnético $B = 20T$. Os círculos fechados representam um único vórtice $n \in Z$ e os círculos abertos representam semi inteiros $n \in Q$. Este modelo de rede consiste em 113x80 sítios. As linhas sólidas são resultados analíticos para quando $B = 0$. Fonte: Referência [22].

Um forte campo magnético não remove o estado modo zero figura 33. A existência

desse estado modo zero para um vórtice $n = 1$ ou antivórtice $n = -1$, implica que esses defeitos topológicos ligam metade da carga dos elétrons $\pm 1/2$. Se considerarmos o potencial químico, os estados de meio de *gap* são movidos para longe de $\mu = 0$. A carga fracionária ligada a um vórtice adquire uma dependência do valor do potencial químico figura 33. Pode-se encaixar essa dependência na presença de um campo magnético forte e na ausência do mesmo [22].

Considere uma dupla camada de grafeno separada por uma barreira dielétrica figura 34-a. Sobre a ação de um campo magnético externo é possível criar condições ideais da formação de um líquido coerente de estados ligados de elétrons em uma camada e de buracos na outra camada. Devido a isso existirão estados modo zero com vórtices associados que carregam carga fracionária [23]. Nesse sistema temos dois vales associados às duas camadas de grafeno, portanto, é esperado que tenha dois modos zero para n ímpar, ou seja, a fracionalização da carga não deve ocorrer.

Entretanto, os modo zero são divididos ligeiramente devido a uma mistura dos vales, o que por consequência gera uma carga axial fracionária ligada ao vórtice. Essa carga axial é experimentalmente mensurável e também dota o vórtice com estatísticas de troca fracionária [23]. A carga axial é a diferença de carga entre as camadas δQ e ela é proporcional ao dipolo elétrico entre as camadas.

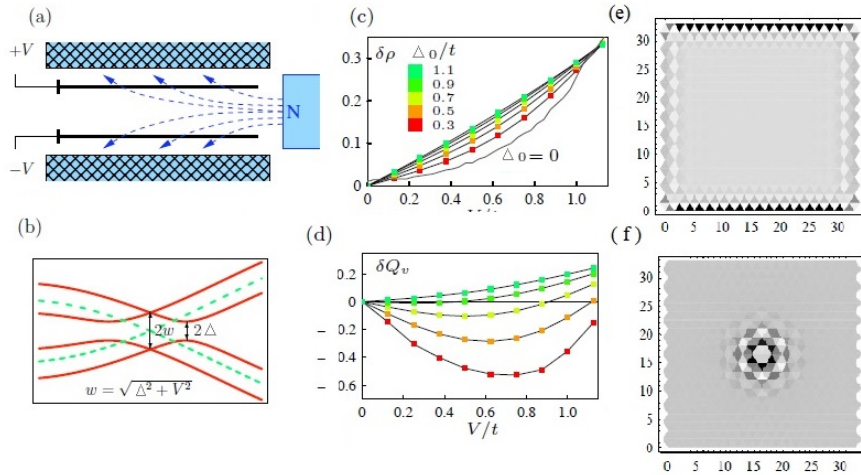


Figura 34: a) Esquematização do sistema composto por duas camadas de grafeno separadas por uma barreira dielétrica sobre a ação de um campo magnético. b) O espectro perto do ponto de Dirac onde a linha tracejada (verde) é referente ao sistema sem interação e a linha sólida (vermelho) alinha o caso de interação com os pontos deslocados devido ao potencial externo (V) e o *gap* de energia Δ . c) Densidade de um sistema uniforme. d) A carga axial ligada a um único vórtice em função de V e Δ_0 . O correspondente perfil da densidade para $V/T = 0.4$ e $\Delta_0/t = 0.3$ no (e) sistema uniforme e (f) sistema com um vórtice no centro. Em todos os *plots*, cada camada tem 39×22 sítios. A grade (e) e (f) estão no centro dos triângulos. Fonte: Referência [23].

5 Fracionalização em Isolantes Topológicos

Nessa seção vamos discutir sobre o fenômeno de fracionalização nos isolantes topológicos. Primeiramente vamos analisar o efeito da fracionalização nos estados de borda de um IT-2D. Quando esses estados de borda estão sujeitos à ação de um campo magnético transversal ou a um tunelamento que gera uma interação entre os estados das duas bordas opostas, surgirá estados modo zero localizados no interior do *gap* em cada borda. Estes estados possuem um *kink* associado a ele uma carga fracionária.

O mesmo mecanismo da fracionalização no grafeno, via distorção de Kekulé, pode ser estendido ao IT-3D, visto que a hamiltoniana do grafeno é muito similar a hamiltoniana dos estados de superfície do IT-3D, porém, o gerador da fracionalização no grafeno vem do acoplamento entre os cones de Dirac independentes, no entanto, os IT's-3D de segunda geração possuem apenas um cone de Dirac em cada superfície. Portanto, um modo de fazer este acoplamento é interagir, via um potencial externo, dois cones de Dirac de superfícies diferentes do mesmo IT-3D. Vamos demonstrar que isso gera estados de meio de *gap* que quando consideramos o potencial químico nulo, estes estados de meio de *gap* possuem energia nula, mas quando consideramos o potencial químico não nulo, estes estados de meio de *gap* possuem energia não nula. Estes estados de meio de *gap* possuem carga fracionada.

Veremos que um meio de gerar esse acoplamento é considerando o IT-3D como sendo um dielétrico dentro de um capacitor de placas paralelas. Quando as superfícies do capacitor possuem potenciais contrários, mas de igual módulo, o nível de Fermi das superfícies do IT-3D irá mudar gerando buracos e elétrons carregados em cada superfície separadamente. Dependendo da distância entre às duas superfícies, estes buracos e elétrons podem interagir formando um estado ligado chamado de exciton. Estes estados ligados fazem o papel de conectar os cones de Dirac entre as duas superfícies fazendo assim a conexão necessária para poder encontrar estados de meio de *gap* que exibem fracionalização.

5.1 Fracionalização em Isolantes Topológicos Bidimensionais

Considere um IT-2D com espessura (distância entre as duas bordas) pequena no centro e maior nas extremidades, figura 35. Ambas as bordas desse sistema possuem estados que são *spin* polarizados se propagando em sentidos contrários devido à topologia do IT-2D. Devido ao tunelamento na região central, os estados helicais de cada borda podem interagir entre si.

Considerando que os estados de borda se encontram no eixo-x, o hamiltoniano que descreve estes estados é [11]:

$$H_{Borda} = -i\hbar v_F \sum_{l=1,2} \psi_{s,l}^\dagger \partial_x \sigma_z \psi_{s,l} = -i\hbar v_F \sum_{l=1,2} \left(\psi_{\uparrow,l}^\dagger \partial_x \psi_{\uparrow,l} - \psi_{\downarrow,l}^\dagger \partial_x \psi_{\downarrow,l} \right), \quad (72)$$

onde o índice l se refere as bordas 1 (acima) e 2 (abaixo), o índice s se refere ao *spin* up e down e v_F é a velocidade de Fermi. Vamos considerar que o tunelamento conserva o *spin*, portanto, os estados com *spin* up de um superfície iram interagir com os estados de *spin* up da outra superfície e o mesmo para o *spin* down. Supondo que na borda 1 o estado com *spin* up se propaga pra direita, então ele irá interagir com o estado com *spin* up que se propaga para a esquerda na borda 2, figura 35.

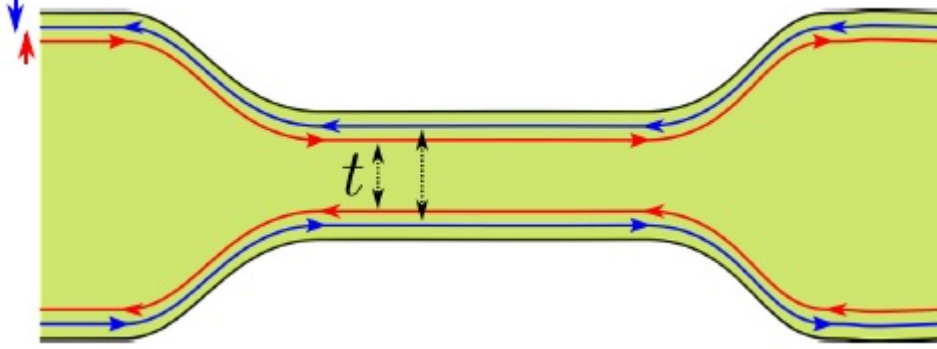


Figura 35: Esquema de um IT-2D que possui em sua região mais central uma espessura menor do que nos extremos. Os estados com *spin* up estão em vermelho e os estados com *spin* down estão em azul. Os pares de *spin* dos estados de borda são acoplados com os da outra borda via tunelamento. Fonte: Referência [24].

O parâmetro t é relativo à força dessa interação entre as bordas, portanto, podemos escrever o hamiltoniano de interação devido ao tunelamento da seguinte forma [24]:

$$H_{tun} = t \sum_s \psi_{s,1}^\dagger \psi_{s,2} = t(\psi_{\uparrow,1}^\dagger \psi_{\uparrow,2} + \psi_{\downarrow,1}^\dagger \psi_{\downarrow,2}). \quad (73)$$

A borda do IT pode ser submetida a um campo magnético ou dopada com impurezas magnéticas produzindo no local um campo magnético efetivo. A hamiltoniana de interação devido a este campo magnético é [24]:

$$H_Z = \sum_{s,s'} \Delta_n \psi_{s,1}^\dagger (\hat{n} \cdot \vec{s})_{ss'} \psi_{s',2}, \quad (74)$$

onde \hat{n} é um versor que aponta na direção do campo magnético e \vec{s} é o vetor que da direção do *spin* up e down referente ao eixo-y. Considerando que o campo magnético está no eixo-z, a equação (74) corresponde ao efeito Zeeman e podemos escrever da seguinte forma [24]:

$$H_z = \Delta_z \left(\psi_{\uparrow,1}^\dagger \psi_{\uparrow,1} - \psi_{\downarrow,1}^\dagger \psi_{\downarrow,1} - \psi_{\downarrow,2}^\dagger \psi_{\downarrow,2} + \psi_{\uparrow,2}^\dagger \psi_{\uparrow,2} \right), \quad (75)$$

onde Δ_z é o termo de acoplamento determinado pela energia de Zeeman ou pela força de interação. Se Δ_z é gerado por um campo magnético $\vec{B} = B\hat{z}$ com potencial vetor

$\vec{A} = yB\hat{x}$ aplicado perpendicularmente ao plano que contém o IT-2D, então o vetor de onda se transforma em $k \rightarrow k - (e/\hbar c)A_x$, o que conta para efeitos de órbita do campo magnético [95]. No espaço das posições também temos uma transformação, supondo que inicialmente a borda 1 está localizada em $y = d$ e a borda 2 em $y = -d$, a transformação é dada por $(-1)^l(e/\hbar c)d$.

O campo magnético aplicado perpendicularmente ao eixo de polarização do *spin*, por exemplo, no eixo-x resulta na seguinte hamiltoniana [24]:

$$H_x = \Delta_x \left(\psi_{\uparrow,1}^\dagger \psi_{\downarrow,1} + \psi_{\downarrow,2}^\dagger \psi_{\uparrow,2} \right), \quad (76)$$

onde Δ_x é a força do acoplamento no eixo-x. Logo a hamiltoniana completa do sistema é:

$$H = H_{edge} + H_{tun} + H_z + H_x. \quad (77)$$

Observe que temos quatro funções de onda que descrevem o sistema, portanto, podemos criar um vetor de onda completo que contenha essas funções de onda, seja:

$$\Psi^T = (\psi_{\uparrow,1}, \psi_{\downarrow,1}, \psi_{\uparrow,2}, \psi_{\downarrow,2}). \quad (78)$$

Logo podemos escrever a hamiltoniana (77) com base no vetor de onda (78) como $\Psi^\dagger \hat{H} \Psi$, assim temos [24]:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \partial_x \rho_3 + \Delta_x \rho_1 + \Delta_z + t \rho_1 \tau_1, \quad (79)$$

onde ρ_i são os operadores de Pauli. O espectro de energia é dado por:

$$E_{\pm}^2 = (\hbar v_F k)^2 + t^2 + \Delta_x^2 + \Delta_z^2 + 2 \pm \sqrt{\Delta_x^2 t^2 + [(\hbar v_F k)^2 + t^2] \Delta_z^2}. \quad (80)$$

Este espectro de energia prevê estados ligados e localizados na interface entre o tunelamento e as regiões com domínio do campo magnético, enquanto para E_+ sempre existirá um *gap*, para E_- o *gap* pode ser nulo quando $t^2 = \Delta_z^2 + \Delta_x^2$. Para outros valores E_- possui *gap* a não ser que $\Delta_x = 0$. Note que a interface separa duas regiões que são caracterizadas pelo sinal da expressão $t^2 - \Delta_z^2 - \Delta_x^2$ que carregam estados modo zero.

Considere a interface entre a região da esquerda com $x < 0$ e $t = 0$ e a outra região sendo $x > 0$ com $t > \Delta_x$ e $\Delta_z = 0$. Esta interface carrega estados modo zero com função de onda [24]:

$$\Psi_0^T = (f, -if, \bar{f}, i\bar{f}), \quad f(x) = i\Theta(x)e^{-x/\xi_t} + i\Theta(-x)e^{ik_z x} e^{-x/\xi_x}, \quad (81)$$

onde $\xi_t = \hbar v_F / (t - \Delta_x)$ e $\xi_x = \hbar v_F / \Delta_x$. Estes estados ligados modo zero são exemplos de da fracionalização do férmion de tipo Jackiw e Rebbi [57].

Alternativamente, estados ligados degenerados podem ocorrer para $t = \Delta_z = 0$, na

presença de uma parede de domínio magnético separando em dois domínios com $\Delta_x(x) = \theta(x)\Delta_x - \theta(-x)\Delta_x$. Tal interface carrega estados ligados modo zero para cada dois estados de borda do IT-2D. Para este caso a função de onda correspondente é [24]:

$$\Psi_0 = (i, 1)^T e^{-x/\xi_B} \quad (82)$$

onde $\xi_B = \hbar v_F / \Delta_x$. Note que o *gap* fecha duas vezes, uma vez para cada superfície, a dupla degenerescência não é protegida e os estados dividem a partir do zero se o tunelamento é incluído. Se a magnetização roda, não por π , mas por um ângulo finito χ , o estado ligado se move sempre da energia nula para a energia $E = -\Delta_x \cos(\chi/2)$ com $0 < \chi < 2\pi$ [24].

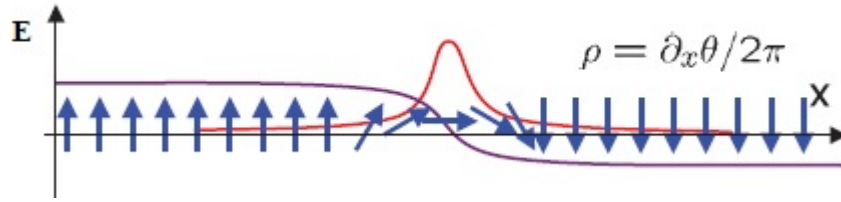


Figura 36: Esquemática da carga fracionária com a parede de domínio energética. As flechas azuis mostram a configuração da parede de domínio magnético e a linha roxa mostra o perfil do *kink* (note a semelhança com o fracionamento do poliacetileno). A curva vermelha mostra a distribuição da densidade de carga. Fonte: Adaptado da referência [11].

A densidade de carga é dada por [11], [57], [24]:

$$\rho = \frac{1}{2\pi} \partial_x \Theta(x). \quad (83)$$

Considere a região entre os pontos $[x_1, x_2]$, a carga será:

$$Q = \frac{1}{2\pi} (\Theta(x_2) - \Theta(x_1)). \quad (84)$$

Note que quando $\chi = \pm\pi$, temos que $E = 0$, então quando $\theta(x_2) - \theta(x_1) = \pm\pi$ a carga será $\pm e/2$, figura 36. Assim, a carga localizada em uma parede de domínio magnético é sempre $e/2 \text{ mod } e$, o que é uma manifestação direta do número quântico topológico Z_2 do estado isolante topológico bidimensional [11].

O campo magnético gira o momento de dipolo magnético do elétron e quando este momento fica paralelo ao eixo de propagação, exatamente quando $\chi = \pm\pi$, têm-se o pico da densidade de carga que resulta em uma carga igual a $\pm e/2$. O movimento do elétron é perpendicular ao seu *spin*, portanto, podemos interpretar que o elétron nessa situação não se propaga, ou seja, existe um acúmulo de elétrons nessa região que parecem estar parados, esse aglomerado exibe o comportamento de um único elétron com carga fracionária.

5.2 Fracionalização em Isolantes Topológicos Tridimensionais

Até aqui vimos que os requisitos para um sistema exibir o efeito de fracionalização são: o espectro de energia possui uma dispersão linear próximo ao nível de Fermi, os portadores de carga serem descritos pela hamiltoniana de Dirac e esses sistemas possuírem um acoplamento que dá origem a um termo de massa. Assim é possível encontrar estados modo zero localizados no meio do *gap* que contêm carga fracionaria ou separação *spin*-carga.

A hamiltoniana dos estados de superfície do IT-3D é semelhante à hamiltoniana do grafeno, mas com uma diferença crucial no espectro de energia dos dois. Nos IT's-3D de segunda geração, existe apenas um cone de Dirac independente na superfície, enquanto no grafeno temos dois. Na distorção de Kekulé no grafeno, o gerador da fracionalização é o acoplamento entre estes dois cones de Dirac, onde este acoplamento gera estados de modo zero que possuem fracionalização, seja fracionalização da carga quando desconsideramos o *spin* ou a separação *spin*-carga quando consideramos o *spin*. Como o IT-3D só possui um cone de Dirac na superfície, aplicar o mesmo raciocínio feito na seção parece impossível, mas como o próprio nome já diz, o IT-3D é tridimensional, logo em cada superfície dele possui um cone de Dirac independente, ou seja, para usarmos o mesmo mecanismo feito no grafeno basta acoplar dois cones de Dirac de superfícies distintas do mesmo IT-3D via uma interação gerada por um potencial externo. Com isso em mente, vamos construir um modelo para verificar a fracionalização em IT's-3D.

A hamiltoniana de superfície do IT-3D dada no capítulo 3, equação (40), inclui um parâmetro C , este parâmetro é o potencial químico μ , portanto, substituindo $k_i \rightarrow -i\partial_i$, a hamiltoniana que descreve os estados de superfície é:

$$H_{edge} = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} + \sigma^z \mu, \quad (85)$$

onde $\vec{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$, $\vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y, 0)$ [33]. Os estados de superfície possuem *spin* up e down e são descritos pela hamiltoniana (85) que é uma matriz 2×2 . Como visto no grafeno, a distorção de Kekulé gera uma conexão entre os dois cones de Dirac independentes do grafeno devido à variação da distância entre esses dois cones. No IT-3D de segunda geração, temos apenas um cone de Dirac em cada superfície, portanto, para termos o mesmo efeito do grafeno precisamos que duas superfícies de um mesmo IT interajam de forma a acoplar os dois cones de Dirac. Como isto não acontece naturalmente, vamos supor potencial externo faça esse papel, logo a hamiltoniana que descreve a dinâmica desse sistema é:

$$H = \sum_{i=1,2} \psi_i^\dagger H_i \psi_i + U(\varphi), \quad (86)$$

onde H_i é a hamiltoniana de superfície (85), ψ_i são as funções de onda que representam

os estados de superfície, $i = 1, 2$ representa as duas superfícies do IT e $U(\varphi)$ é o termo de interação entre ambas superfícies devido a potencial externo φ . O termo de interação é complexo e faz a conexão entre as duas superfícies, portanto, podemos escreve-lo de uma maneira geral como $U(\varphi) = \langle \psi_1^\dagger | \varphi I | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2^\dagger | \bar{\varphi} I | \psi_1 \rangle$, onde I é a matriz identidade 2×2 . Devido a este acoplamento entre as superfícies, podemos escrever um 4-vetor da seguinte maneira, $\Psi^T = (\psi_1, \psi_2)$. Logo a equação (86) se torna:

$$H = \Psi^\dagger \begin{pmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{pmatrix} \Psi + U(\varphi), \quad (87)$$

$$H = (\psi_1^\dagger \quad \psi_2^\dagger) \begin{pmatrix} -i\hbar v_{F1} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_z \mu_1 & \varphi \\ \bar{\varphi} & -i\hbar v_{F2} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_z \mu_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (88)$$

$$H = (\psi_1^\dagger \quad \psi_2^\dagger) \begin{pmatrix} -i\hbar v_{F1} (\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + \sigma_z \mu_1 & (\varphi_a + i\varphi_b) I_{2 \times 2} \\ (\varphi_a - i\varphi_b) I_{2 \times 2} & -i\hbar v_{F2} (\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + \sigma_z \mu_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (89)$$

onde $\varphi = \varphi_a + i\varphi_b$. Substituindo as matrizes de Pauli, obtemos então a hamiltoniana 4×4 com seus 16 elementos:

$$H = \Psi^\dagger \begin{pmatrix} \mu_1 & -i\hbar v_{F1} (\partial_x - i\partial_y) & \varphi_a + i\varphi_b & 0 \\ -i\hbar v_{F1} (\partial_x + i\partial_y) & -\mu_1 & 0 & \varphi_a + i\varphi_b \\ \varphi_a - i\varphi_b & 0 & \mu_2 & -i\hbar v_{F2} (\partial_x - i\partial_y) \\ 0 & -\varphi_a - i\varphi_b & i\hbar v_{F2} (\partial_x + i\partial_y) & -\mu_2 \end{pmatrix} \Psi \quad (90)$$

5.2.1 Estados meio do gap para potencial químico nulo

Primeiramente vamos considerar que o potencial químico é nulo. Vamos complexificar nosso espaço da seguinte maneira, seja $z = x + iy$, então $\partial_z = \frac{\partial_x - i\partial_y}{2}$ e como $\varphi = \varphi_a + i\varphi_b$ a hamiltoniana (90) se torna:

$$H = \Psi^\dagger \begin{pmatrix} 0 & -2i\hbar v_{F1} \partial_z & \varphi & 0 \\ -2i\hbar v_{F1} \partial_{\bar{z}} & 0 & 0 & \varphi \\ \bar{\varphi} & 0 & 0 & -2i\hbar v_{F2} \partial_z \\ 0 & -\bar{\varphi} & 2i\hbar v_{F2} \partial_{\bar{z}} & 0 \end{pmatrix} \Psi. \quad (91)$$

Observe que a hamiltoniana (91) é idêntica à hamiltoniana da distorção de Kekulé no grafeno, equação (56). No caso do grafeno temos que o campo escalar complexo está associado a variação da distância entre os primeiros vizinhos do grafeno, ou seja, uma interação entre os dois cones de Dirac independentes, porém, no caso do IT-3D este campo

escalar complexo pode ser visto, por exemplo, como uma interação do tipo coulombiana entre duas superfícies do IT-3D que estão próximas o suficiente para interagirem entre si [25].

O gerador do termo relativo a distorção de Kekulé ($\Delta(\mathbf{r})$) é análogo ao potencial externo ($\varphi(\mathbf{r})$) que gera a interação entre as superfícies do IT-3D. Vamos buscar soluções com auto valor da energia nula, temos que:

$$H\Psi_0 = 0, \quad (92)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -2i\hbar v_{F1}\partial_z & \varphi & 0 \\ -2i\hbar v_{F1}\partial_{\bar{z}} & 0 & 0 & \varphi \\ \bar{\varphi} & 0 & 0 & -2i\hbar v_{F2}\partial_z \\ 0 & \bar{\varphi} & -2i\hbar v_{F2}\partial_{\bar{z}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = 0. \quad (93)$$

A equação (93) nos fornece 4 equações com dois pares de equações acopladas. O primeiro par de equações envolve as componentes a_2 e a_3 :

$$-2i\hbar v_{F1}\partial_z a_2 + \varphi a_2 = 0, \quad (94)$$

$$\bar{\varphi} a_2 - 2i\hbar v_{F2}\partial_{\bar{z}} a_3 = 0. \quad (95)$$

O outro par de equações associados as componentes a_1 e a_4 são:

$$-2i\hbar v_{F1}\partial_{\bar{z}} a_1 + \varphi a_4 = 0, \quad (96)$$

$$\bar{\varphi} a_1 - 2i\hbar v_{F2}\partial_z a_4 = 0. \quad (97)$$

Utilizando coordenadas polares, o par de equação (94) e (95) se tornam:

$$\hbar v_{F1} \left(\partial_r - i \frac{\partial_\theta}{r} \right) a_2 + i\varphi(\mathbf{r})e^{i\theta} a_3(\mathbf{r}) = 0, \quad (98)$$

$$i\bar{\varphi}(\mathbf{r})e^{-i\theta} a_2(\mathbf{r}) + \hbar v_{F2} \left(\partial_r + i \frac{\partial_\theta}{r} \right) a_3(\mathbf{r}) = 0. \quad (99)$$

Escrevendo o potencial na notação de euler, $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_0(\mathbf{r})e^{i(n\theta+\omega)}$, onde $\varphi_0 \in R$ e ω é um parâmetro de fase, temos:

$$\hbar v_{F1} \left(\partial_r - i \frac{\partial_\theta}{r} \right) a_2 + i\varphi_0(\mathbf{r})e^{i[(n+1)\theta+\omega]} a_3(\mathbf{r}) = 0, \quad (100)$$

$$i\varphi_0(\mathbf{r})e^{i[(n+1)\theta+\omega]} a_2(\mathbf{r}) + \hbar v_{F2} \left(\partial_r + i \frac{\partial_\theta}{r} \right) a_3(\mathbf{r}) = 0. \quad (101)$$

Considerando que as superfícies 1 e 2 estão diametralmente opostas a velocidade de Fermi é $v_F = v_{F1} = -v_{F2}$. Observe o seguinte, para $n = -1$, as equações (100) e (101) ficam exatamente iguais às equações (61) e (62), onde $u_a \rightarrow a_2$, $v_a \rightarrow a_3$ e $\lambda \rightarrow \omega$. Portanto, as soluções das equações (100) e (101) são:

$$a_2(r, \theta) = \frac{e^{i(\frac{\omega}{2} + \frac{\pi}{2})}}{2\hbar v_F \sqrt{\pi}} \frac{e^{-\int_0^r dr' \Delta_0(r')}}{\sqrt{\int_0^\infty dr e^{-2\int_0^r dr' \Delta_0(r')}}}, \quad (102)$$

$$a_3(r, \theta) = \bar{a}_2(r, \theta). \quad (103)$$

O mesmo procedimento pode ser feito para o outro par, as equações (96) e (97) ficam exatamente iguais às equações (59) e (60) para $n = 1$.

Portando quando duas superfícies de um IT-3D interagem entre si via um potencial, considerando o potencial químico nulo, passa a existir estados localizados e isolados com energia nula em cada uma das superfícies.

5.2.2 Carga fracionária para $\mu = 0$

Vamos calcular a carga associada ao estado com energia nula. Como o estado modo zero surgiu devido à interação entre ambas superfícies, um meio de encontrar a carga é analisar a diferença da densidade de estados antes e depois da interação, logo:

$$\rho(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{0-} dE [Estados(com int) - Estados(sem int)], \quad (104)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{0-} dE [\Psi_E^\dagger \Psi_E - \Psi_{nE}^{0\dagger} \Psi_E^0]. \quad (105)$$

Pela simetria dos níveis de energia temos,

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dE [\Psi_E^\dagger \Psi_E - \Psi_E^{0\dagger} \Psi_E^0]. \quad (106)$$

Independente do acoplamento os estados são ortonormais, logo sem acoplamento temos:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_E^{0\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_E^0(\mathbf{r}'). \quad (107)$$

Com o acoplamento:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}'), \quad (108)$$

$$\begin{aligned}
\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{-\epsilon} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') + \int_{\epsilon}^{\infty} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') \right] \\
\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int_{-\infty}^{0-} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') + \int_{0+}^{\infty} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') + \int dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') \delta(E) \\
\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') + \Psi_0^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}'). \tag{109}
\end{aligned}$$

Igualando a equação (107) com a (109) temos que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_E^{0\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_E^0(\mathbf{r}) - \int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}) = \Psi_0^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}). \tag{110}$$

Substituindo a equação (110) na equação (106) obtemos:

$$\rho(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \Psi_0^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}). \tag{111}$$

Portando a carga no estado de energia nula é:

$$Q = \int d^2r \rho(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \int d^2r \Psi_0^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}. \tag{112}$$

Conclusão, quando consideramos que as superfícies diametralmente opostas de um IT-3D com potencial químico nulo interagem entre si, surge estados localizados e isolados com energia nula em cada uma das superfícies e esses estados carregam carga fracionada.

5.2.3 Estados meio do gap para potencial químico não nulo

Vamos considerar agora um potencial químico não nulo, $\mu \neq 0$. Nossa hamiltoniana volta a ser a da equação (90). Vamos mostrar que $E = 0$ não é mais autovalor de H . A equação de autovalor é:

$$\det[H - EI] = 0, \tag{113}$$

$$\begin{vmatrix}
\mu_1 - E & -2i\hbar v_F \partial_z & \varphi & 0 \\
-2i\hbar v_F \partial_{\bar{z}} & -\mu_1 - E & 0 & \varphi \\
\bar{\varphi} & 0 & -\mu_2 - E & 2i\hbar v_F \partial_z \\
0 & \bar{\varphi} & 2i\hbar v_F \partial_{\bar{z}} & \mu_2 - E
\end{vmatrix} = 0, \tag{114}$$

$$(\mu_1^2 - E^2)(\mu_2 + E^2) + |\varphi|^4 + |\varphi|^2(\mu_1 - E)(\mu_2 + E) + |\varphi|^2(\mu_1 + E)(\mu_2 - E) - 16\hbar^4 v_F^4 (\partial_{\bar{z}} \partial_z)^2 = 0. \tag{115}$$

Observe que $E = 0$ não satisfaz a equação (115), logo $E = 0$ não é um auto valor da hamiltoniana (90). Quando tínhamos $\mu = 0$, a energia de Fermi estava exatamente no ponto de Dirac e existia uma simetria entre os estados com energia positiva (estados vazios) e negativa (estados ocupados) e portanto, se existissem estados que satisfaziam $H\Psi = 0$, eles só poderiam ter $E = 0$. Por outro lado, se $E = \pm\mu_i$, então temos devido a (115), considerando uma função $f \in C^2(R)$:

$$16\hbar^4 v_F^4 \nabla_{x,y}^2 f = |\varphi|^4. \quad (116)$$

A equação (116) é uma equação de Poisson, como $\varphi(x, y) = \varphi_1(x, y) + i\varphi_2(x, y)$, para que $E = \pm\mu_i$ sejam auto valores da hamiltoniana (90) o campo escalar complexo tem que satisfazer a equação (103) de forma que exista uma função f que satisfaça (116).

É natural esperar que $E = \pm\mu_i$ sejam auto valores da hamiltoniana (90), pois, quando $\mu = 0$, a energia de Fermi era exatamente 0, porém, como agora $\mu \neq 0$ e o potencial químico muda a energia de Fermi, é de se esperar que seus autovalores sejam $E = \pm\mu_i$. Voltamos agora as atenções para a hamiltoniana (90), escrevendo essa hamiltoniana em termo das matrizes de Pauli obtemos:

$$H = \Psi^\dagger \begin{pmatrix} -i\hbar v_F (\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + \sigma_z \mu_1 & (\varphi_a + i\varphi_b) I_{2 \times 2} \\ (\varphi_a - i\varphi_b) I_{2 \times 2} & i\hbar v_F (\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + \sigma_z \mu_2 \end{pmatrix} \Psi. \quad (117)$$

Separando em uma soma de matrizes temos:

$$H = \Psi^\dagger (-iv_F \hbar) \left[\begin{pmatrix} \sigma_x \partial_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \partial_x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_y \partial_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \partial_y \end{pmatrix} \right] \Psi + \Psi^\dagger \begin{pmatrix} \sigma_z \mu_1 & 0 \\ 0 & \sigma_z \mu_2 \end{pmatrix} \Psi \\ + \Psi^\dagger \begin{pmatrix} 0 & (\varphi_a + i\varphi_b) I_{2 \times 2} \\ (\varphi_a - i\varphi_b) I_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix} \Psi. \quad (118)$$

Observe que podemos escrever o segundo e o terceiro termo como uma multiplicação de matrizes, portanto:

$$H = \Psi^\dagger (-iv_F \hbar) \left[\begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix} \partial_x + \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & -\sigma_y \end{pmatrix} \partial_y \right] \Psi \\ + \Psi^\dagger \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 \\ 0 & -\mu_2 \end{pmatrix} \Psi \\ + \Psi^\dagger \begin{pmatrix} 0 & I_{2 \times 2} \\ I_{2 \times 2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\varphi_a - i\varphi_b) I_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & (\varphi_a + i\varphi_b) I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \Psi. \quad (119)$$

Na seção 4.1 definimos as matrizes $\alpha_{x,y,z}$, β . Observe que o primeiro termo é a definição de um produto escalar entre os operadores $\vec{\alpha}$ e $\vec{\nabla}_{x,y}$, portanto, podemos escrever a hamiltoniana (119) da seguinte maneira:

$$H = \Psi^\dagger [v_F \vec{\alpha} \cdot \vec{p}_{x,y} + \alpha_z \mu_{1,2} + \beta(\varphi_a - i\gamma_5 \varphi_b)] \Psi, \quad (120)$$

onde

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}_{x,y}, \quad \gamma_5 = -i\alpha_x \alpha_y \alpha_z \quad e \quad \mu_{1,2} = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 \\ 0 & -\mu_2 \end{pmatrix}.$$

A hamiltoniana (120) é a mesma hamiltoniana da equação (90), dessa maneira é possível fazer a seguinte transformação [33]:

$$\hat{H} = THT^{-1}, \quad (121)$$

onde

$$T = \begin{pmatrix} i\sigma_- & \sigma_+ \\ -i\sigma_+ & \sigma_- \end{pmatrix}, \quad T^{-1} = T^\dagger, \quad \sigma_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \sigma_z).$$

Devido a esta transformação, \hat{H} e H são semelhantes, logo compartilham dos mesmos autovalores. A hamiltoniana \hat{H} é:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\mu_2 - \mu_1) & D \\ D^\dagger & \frac{1}{2}(\mu_1 - \mu_2) \end{pmatrix} + \frac{1}{2}(\mu_1 + \mu_2) \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{pmatrix}, \quad (122)$$

onde $D = i\hbar v_F(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + i\varphi_a + \sigma_z \varphi_b$ e $D^\dagger = i\hbar v_F(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) - i\varphi_a + \sigma_z \varphi_b$.

Nesse ponto temos que discutir sobre o potencial químico. Os índices 1 e 2 indicam as superfícies 1 e 2 do IT-3D, como estamos analisando o mesmo material e o potencial químico é um parâmetro intrínseco do material, o potencial químico tem que ser o mesmo em ambas as superfícies. Entretanto, o potencial químico está associado a energia de Fermi, logo como o material está sujeito a um potencial externo, a energia de Fermi pode mudar dependendo da forma com que esse potencial atua nas superfícies. Portanto, vamos definir que $\mu_1 - \mu_2 = 2V$ e $\mu_1 + \mu_2 = 2\mu$ onde μ é o potencial químico intrínseco do material e V é um parâmetro relativo à mudança do nível de Fermi em cada superfície devido à ação do potencial φ . Assim a equação (122) se torna:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -V & D \\ D^\dagger & V \end{pmatrix} + \mu \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}. \quad (123)$$

Considere o vetor de estado $\Psi_E^T = (u_E, v_E)$, temos que:

$$\hat{H}\Psi_{E'} = E'\Psi_{E'} = H'\Psi_E + \mu\sigma_z I\Psi_\mu, \quad (124)$$

$$\begin{pmatrix} -V & D \\ D^\dagger & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_E \\ v_E \end{pmatrix} + \mu \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\mu \\ v_\mu \end{pmatrix} = E\Psi_E + \mu\Psi_\mu. \quad (125)$$

O vetor de estado associado ao termo do potencial químico é $\Psi_\mu^T = (1, 0, 1, 0)$. Vamos encontrar os auto estados do operador H' associados a auto energia E . A equação de auto valor para H' é:

$$H'\Psi_E = E\Psi_E \iff \begin{pmatrix} -V & D \\ D^\dagger & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_E \\ v_E \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_E \\ v_E \end{pmatrix}. \quad (126)$$

A equação (126) nos fornece as seguintes equações:

$$Dv_E = (V + E)u_E, \quad (127)$$

$$D^\dagger u_E = (E - V)v_E. \quad (128)$$

Considere primeiramente que $E = V$ e $\Psi_V^T = (u_V, v_V)$ o vetor de estado associado, então pelas equações (129) e (130) temos:

$$Dv_V = 2Vu_V, \quad (129)$$

$$D^\dagger u_V = 0. \quad (130)$$

Aplicando o operador D^\dagger na equação (127) e utilizando a equação (128) obtemos:

$$D^\dagger(Dv_V) = 2VD^\dagger(u_V) = 0 \quad (131)$$

e como:

$$\int d^2r |Dv_V|^2 = \int d^2r v_V^\dagger D^\dagger Dv_V. \quad (132)$$

Temos que, combinando equações (131) e (132) encontramos:

$$Dv_V = 0. \quad (133)$$

Conhecemos o operador D , portanto, podemos determinar v_V . Seja $v_V^T = (v_V^1, v_V^2)$, substituindo o operador D e utilizando $z = x + iy$ temos:

$$i \begin{pmatrix} \bar{\varphi} & -2\hbar v_F \partial_z \\ 2\hbar v_F \partial_{\bar{z}} & \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_V^1 \\ v_V^2 \end{pmatrix} = 0, \quad (134)$$

onde $\varphi = \varphi_a + i\varphi_b$. Utilizando coordenadas polares temos o seguinte par de equações:

$$\bar{\varphi} e^{i\theta} v_V^1 - \hbar v_F \left(\partial_r - i \frac{\partial_\theta}{r} \right) v_V^2 = 0, \quad (135)$$

$$-\hbar v_F \left(\partial_r + i \frac{\partial_\theta}{r} \right) v_V^1 + \varphi e^{i\theta} v_V^2 = 0. \quad (136)$$

Considere a seguinte mudança de variável:

$$v_V^1 = a, \quad v_V^2 = ib, \quad (137)$$

onde $a, b : C^2 \mapsto C^2$. Escrevendo novamente o potencial escalar na notação de euler e multiplicando a equação (135) por i , o par de equações se torna:

$$i\varphi_0(\mathbf{r}) e^{-i[(n-1)\theta+\omega]} a - \hbar v_F \left(\partial_r - i \frac{\partial_\theta}{r} \right) b = 0, \quad (138)$$

$$-\hbar v_F \left(\partial_r + i \frac{\partial_\theta}{r} \right) a + i\varphi_0(\mathbf{r}) e^{i[(n-1)\theta+\omega]} b = 0. \quad (139)$$

Observe que para $n = 1$, obtemos o mesmo conjunto de equações (59) e (60), portanto, sabemos qual é a solução de (138) e (139). Em resumo, para a auto energia $E = V$, temos o seguinte auto estado associado:

$$\Psi_V^T = \frac{1}{2\hbar v_F \sqrt{\pi}} \left(0, \quad 0, \quad i \frac{e^{[i(\frac{\omega}{2} + \frac{\pi}{2}) - \int_0^r dr' \varphi_0(r')]} }{\sqrt{\int_0^\infty r dr e^{-2 \int_0^r dr' \varphi_0(r')}}}, \quad \frac{-e^{[-i(\frac{\omega}{2} + \frac{\pi}{2}) - \int_0^r dr' \varphi_0(r')]} }{\sqrt{\int_0^\infty r dr e^{-2 \int_0^r dr' \varphi_0(r')}}} \right). \quad (140)$$

Considerando agora a energia sendo $E = -V$ e $\Psi_{-V}^T = (u_{-V}, v_{-V})$ e substituindo nas equações (127) e (128) obtemos:

$$Dv_{-V} = 0, \quad (141)$$

$$D^\dagger u_{-V} = -2Vv_{-V}. \quad (142)$$

As equações (141) e (142) combinadas implicam que $v_{-V} = 0$ e $D^\dagger u_{-V} = 0$. Seja $u_{-V}^T = (u_{-V}^1, u_{-V}^2)$, as equações associadas ao auto valor $E = -V$ são, utilizando coordenadas polares e notação de euler para o campo escalar:

$$\varphi_0(\mathbf{r}) e^{i[(n+1)\theta+\omega]} u_{-V}^1 + \hbar v_F \left(\partial_r - i \frac{\partial_\theta}{r} \right) u_{-V}^2 = 0, \quad (143)$$

$$\hbar v_F \left(\partial_r + i \frac{\partial_\theta}{r} \right) u_{-V}^1 + \varphi_0(\mathbf{r}) e^{-i[(n+1)\theta+\omega]} u_{-V}^2 = 0. \quad (144)$$

Multiplicando a equação (143) por i e fazendo a seguinte mudança de variável, $u_{-V}^1 = ia'$ e $u_{-V}^2 = b'$ obtêm-se:

$$i\varphi_0(\mathbf{r})e^{i[(n+1)\theta+\omega]}a' + \hbar v_F \left(\partial_r - i \frac{\partial_\theta}{r} \right) b' = 0, \quad (145)$$

$$-\hbar v_F \left(\partial_r + i \frac{\partial_\theta}{r} \right) a' + i\varphi_0(\mathbf{r})e^{-i[(n+1)\theta+\omega]}b' = 0. \quad (146)$$

Note que as equações (145) e (146) para $n = -1$ são idênticas às equações (98) e (99), portanto, para a auto energia $E = -V$, temos o seguinte auto estado associado:

$$\Psi_{-V}^T = \frac{1}{2\hbar v_F \sqrt{\pi}} \left(i \frac{e^{[-i(\frac{\omega}{2} + \frac{\pi}{2}) - \int_0^r dr' \varphi_0(r')]} }{\sqrt{\int_0^\infty r dr e^{-2 \int_0^r dr' \varphi_0(r')}}}, \frac{-e^{[i(\frac{\omega}{2} + \frac{\pi}{2}) - \int_0^r dr' \varphi_0(r')]} }{\sqrt{\int_0^\infty r dr e^{-2 \int_0^r dr' \varphi_0(r')}}}, 0, 0 \right). \quad (147)$$

5.2.4 Carga fracionaria para $\mu \neq 0$

Novamente, vamos analisar a diferença da densidade de estados com e sem a interação que gera os estados de meio de *gap*, temos que:

$$\rho(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{0-} dE [Estados(com int) - Estados(sem int)], \quad (148)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{0-} dE [\Psi_E^\dagger \Psi_E - \Psi_E^{0\dagger} \Psi_E^0]. \quad (149)$$

Nesse ponto, vamos fazer uma discussão sobre o efeito do potencial V no espectro de energia. Este potencial V não é o causador da interação entre as superfícies que gera os estados de meio de *gap*, mas sim pode ser entendido como o gerador que cria estados ligados entre as superfícies e estes estados ligados é que são responsáveis pelo potencial de interação entre as superfícies. Portanto, o potencial V muda o nível de Fermi deslocando-o do 0, figura 37, porém, o 0 do sistema não é alterado de forma que a simetria entre estados com $E > 0$ e $E < 0$ continua existindo, pois, o que muda é que estados que antes estavam ocupados, agora estão vazios e vice-versa figura 37.

Pela simetria dos níveis de energia temos,

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dE [\Psi_E^\dagger \Psi_E - \Psi_E^{0\dagger} \Psi_E^0]. \quad (150)$$

Independente do acoplamento os estados são ortonormais, logo sem acoplamento temos:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_E^{0\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_E^0(\mathbf{r}'). \quad (151)$$

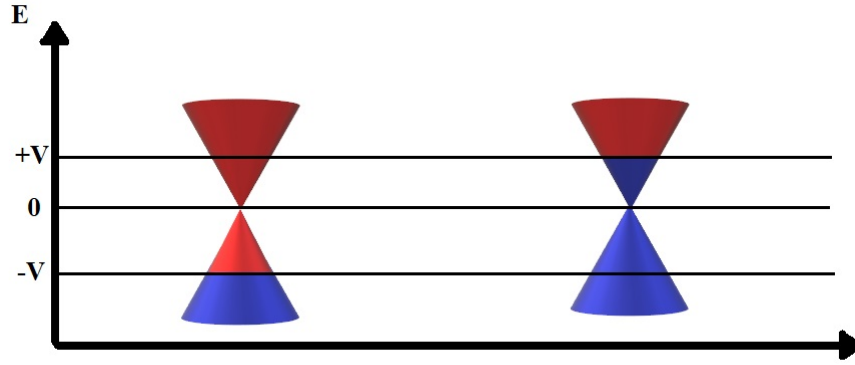


Figura 37: Espectro de energia das superfícies do IT-3D com alteração no nível de Fermi devido ao potencial externo.

Com o acoplamento:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}'), \quad (152)$$

Considere para efeito de cálculo que $\Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') = f$, então:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \lim_{\epsilon \rightarrow |V|} \left[\int_{-\infty}^{-\epsilon_-} dE f + \int_{-\epsilon_-}^{-\epsilon_+} dE f + \int_{-\epsilon_+}^0 dE f + \int_0^{\epsilon_-} dE f + \int_{\epsilon_-}^{\epsilon_+} dE f + \int_{\epsilon_+}^{\infty} dE f \right],$$

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^0 dE f + \int_0^{\infty} dE f + \int dE f \delta(E - |V|) + \int dE f \delta(E + |V|).$$

Substituindo f temos que:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} dE \Psi_E^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}') + \Psi_{-|V|}^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{-|V|}(\mathbf{r}') - \Psi_{|V|}^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{|V|}(\mathbf{r}'). \quad (153)$$

Igualando a equação (152) com a (153) e substituindo em (150) temos que:

$$\rho(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \Psi_{-|V|}^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{-|V|}(\mathbf{r}') + \frac{1}{2} \Psi_{|V|}^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{|V|}(\mathbf{r}'). \quad (154)$$

Como vimos anteriormente, $\Psi_{|V|}$ e $\Psi_{-|V|}$ são descritos pelas equações (140) e (147), respectivamente, quando consideramos $n = \pm 1$. Esses vetores de estados são auto estados da hamiltoniana H' , equação (126), mas não temos apenas soluções com $n = \pm 1$, temos n soluções para energia $E = -V$ e n soluções para energia $E = V$. Essas soluções têm em comum as equações (133) para $E = V$ e (141) para $E = -V$, onde independe o valor de n . Portanto, temos que temos $n < 0$ soluções que satisfazem:

$$H'\Psi_V = V\Psi_V \iff \begin{pmatrix} -V & D \\ D^\dagger & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ v_V \end{pmatrix} = V \begin{pmatrix} 0 \\ v_V \end{pmatrix}, \quad (155)$$

onde

$$\int d^2r \Psi_V^\dagger \Psi_V = \int d^2r |v_V|^2 = 1 \quad (156)$$

e $n > 0$ soluções que satisfazem,

$$H'\Psi_{-V} = V\Psi_{-V} \iff \begin{pmatrix} -V & D \\ D^\dagger & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{-V} \\ 0 \end{pmatrix} = V \begin{pmatrix} u_{-V} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (157)$$

onde

$$\int d^2r \Psi_{-V}^\dagger \Psi_{-V} = \int d^2r |u_{-V}|^2 = 1. \quad (158)$$

Portando a carga devido à densidade de carga (154) é:

$$Q = \int d^2r \rho(\mathbf{r}) = -\frac{\text{sinal}(V)}{2}n. \quad (159)$$

Observe que se em uma superfície o nível de Fermi está em $E = V$ e o elétron está no estado descrito pelo vetor de estado (140) que corresponde a $n = -1$, então a carga será $Q = e/2$. O mesmo ocorre na outra superfície, note que a carga será sempre uma fração da carga do elétron se n for ímpar, isto quer dizer que quando n for par, sempre podemos fazer uma mistura de soluções de forma que no final enxergamos um estado com carga completa e não quebrada.

5.3 Capacitor de placas paralelas com um dielétrico de IT-3D

Pensando em um meio de tentar verificar nossa discussão da seção anterior, o caso mais simples seria colocar um filme de IT-3D dentro de um capacitor de placas paralelas. Vamos considerar que este IT-3D possua um cone de Dirac em cada superfície. Quando o capacitor é carregado, as energias de Fermi das superfícies se alteram, uma aumenta por $+V$ em uma superfície e a outra diminui por $-V$, figura 38. Essa mudança nas energias de Fermi de cada superfície faz com que os elétrons afetados por ela possa se acoplar fazendo com que ambas superfícies interajam entre si.

Devido a isso o sistema irá formar um conjunto de pares de elétron-buraco que pode ser visto como um líquido coerente de pares de elétron-buraco que residem nas superfícies [25]. Estes pares de elétron-buraco serão nossos geradores do parâmetro de massa.

Um jeito de moldar analiticamente estes pares ligados são via interação Coulombiana entre as superfícies [25], [23]. Podemos escrever esse termo de interação da seguinte maneira:

$$H_{int} = U \left(\psi_1^\dagger \psi_1 \right) \left(\psi_2^\dagger \psi_2 \right), \quad (160)$$

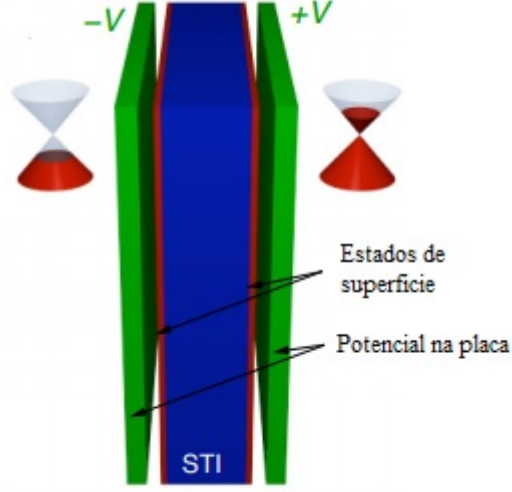


Figura 38: Esquemática do capacitor de placas paralelas com dielétrico sendo um filme fino de IT-3D. Fonte: Referência [25].

onde $\psi_l^T = (c_{l\uparrow}c_{l\downarrow})$ e $l = 1, 2$ são as funções de onda que representam os estados em cada superfície e H_1, H_2 são as hamiltonianas de superfícies do IT-3D. A hamiltoniana do sistema é:

$$H = H_1 + H_2 + H_{int}, \quad (161)$$

$$H = \sum_{l=1}^2 -i\hbar v_l \psi_l^\dagger [\sigma \cdot \nabla - \sigma_z \mu_l] \psi_l + U (\psi_1^\dagger \psi_1) (\psi_2^\dagger \psi_2), \quad (162)$$

onde $\mu_l = \mu + (-1)^l V$ é o potencial total que contém o potencial químico e o externo e $v_l = (-1)^{l+1} v_F$ representa a velocidade de Fermi em cada superfície. Para descrever o termo de interação, vamos adotar o parâmetro $M = U \langle \psi_1, \psi_2^\dagger \rangle$. Vamos escrever agora um vetor de estado completo que contenha os dois estados associados as duas superfícies da seguinte maneira, $\Psi^T = (\psi_1, \psi_2)$. Podemos reescrever a hamiltoniana (162) com base nesse vetor de estado completo como:

$$H_{cm} = \Psi^\dagger \hat{H} \psi + \frac{1}{U} \text{Tr}(M^\dagger M), \quad (163)$$

onde a matriz semelhante \hat{H} é definida como:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -i\hbar v_1 \sigma \cdot \nabla - \sigma_z \mu_1 & M \\ M^\dagger & i\hbar v_2 \sigma \cdot \nabla - \sigma_z \mu_2 \end{pmatrix}. \quad (164)$$

Existem várias formas diferentes de descrever a matriz M . Podemos escrever M como $M = m I_{2 \times 2}$, $m \in \mathbb{C}$, desde que a parte de \hat{H} que é proporcional a m anti comute com

o termo cinético [25], [23]. Logo, assumindo $m = m_1 + im_2$, $m_1, m_2 \in R$, temos que a hamiltoniana (164) se torna:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -i\hbar v_l \sigma \cdot \nabla - \sigma_z \mu_l & M \\ M^\dagger & i\hbar v_l \sigma \cdot \nabla - \sigma_z \mu_2 \end{pmatrix}, \quad (165)$$

$$H = \begin{pmatrix} \mu_1 & -i\hbar v_F (\partial_x - i\partial_y) & m_1 + im_2 & 0 \\ -i\hbar v_F (\partial_x + i\partial_y) & -\mu_1 & 0 & m_1 + im_2 \\ m_1 - im_2 & 0 & -\mu_2 & i\hbar v_F (\partial_x - i\partial_y) \\ 0 & m_1 - im_2 & i\hbar v_F (\partial_x + i\partial_y) & \mu_2 \end{pmatrix}. \quad (166)$$

Note que essa hamiltoniana é igual à hamiltoniana (90), portanto, podemos utilizar nossos resultados obtidos e aplicar a este problema. Logo quando a energia for $E = V$, teremos um estado de meio de *gap* bem localizado com vetor de estado $\Psi_{E_n=-1}$, este estado corresponde a superfície 1 do dielétrico de IT-3D. Quando a energia for $E = -V$, teremos um estado de meio de *gap* bem localizado com vetor de estado $\Psi_{E_n=1}$ correspondente a superfície 2. De acordo com nosso modelo feito na seção anterior, a carga nesses estados será dada pela equação (159). Considere o capacitor carregado, o campo elétrico resultante no capacitor é:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}_{IT}, \quad (167)$$

onde \vec{E}_0 é o campo elétrico no interior do capacitor sem dielétrico. Logo:

$$E = \frac{\sigma_0}{\epsilon_0} - \frac{\sigma_{IT}}{\epsilon_{IT}}, \quad (168)$$

$$\sigma_{IT} = \epsilon_{IT} \left(\frac{\sigma_0}{\epsilon_0} - E \right), \quad (169)$$

onde $\epsilon_0, \epsilon_{IT}$ são as constantes dielétricas do vácuo e do IT-3D, respectivamente. Logo:

$$Q = \int_S \sigma_{IT} dS = |Q_1 - Q_2|. \quad (170)$$

Portanto, deve ser possível montar um circuito com um capacitor deste tipo e verificar a fracionalização da carga através da medição do campo elétrico no interior do capacitor.

6 Conclusão

O fenômeno de fracionalização ocorre no poliacetileno via instabilidade de Peierl onde a oscilação dos átomos em torno do ponto de equilíbrio gera um estado fundamental degenerado que contém um estado modo zero. A solução que liga os dois estados degenerados são chamados de sólitons, no caso de uma dimensão, chamado de *kink*. Estes *kinks* carregam carga fracionada.

No caso da fracionalização dos estados de borda do IT-2D, é possível existir um acoplamento entre os estados de borda opostos por meio de um tunelamento fazendo com que estados de modo zero existam na borda, assim como ação de um campo magnético externo (desde que não quebre os estados de superfície). A parede de domínio ocorre na interface entre as regiões de abertura do *gap*. Por exemplo, o *gap* pode ser aberto por um campo magnético e tunelamento entre os estados de borda. Na região entre esses domínios existe o perfil de um *kink* que possui energia nula e carrega carga fracionária.

Uma “ evolução ” do poliacetileno em duas dimensões é o grafeno, pois, sua configuração estrutural também é composta por arranjos de átomos de carbono, entretanto, possui um arranjo cuja célula unitária é um hexágono onde em cada ponta do hexágono se encontra um átomo de carbono. É de se esperar que o grafeno também possa exibir a fracionalização da carga, pois, os cones de Dirac situados no espectro de energia são uma “evolução” dos pontos de Dirac do poliacetileno. Assim como temos a instabilidade de Peierls que gera os estados com energia nula no poliacetileno, no grafeno temos a chamada distorção de Kekulé. Esta distorção é vista como uma oscilação entre os dois cones de Dirac independentes da rede recíproca, que produzem como solução da hamiltoniana de interação um sólition, só que agora este sólition é chamado de vórtice. Assim como o *kink*, o vórtice também carrega carga fracionada quando não consideramos o *spin* do elétron, quando é considerado acontece a separação da carga-*spin*.

Como o IT-3D de segunda geração possui apenas um cone de Dirac em cada superfície, utilizar o mesmo mecanismo feito no grafeno de acoplar os cones de Dirac parece impossível. Porém, temos mais de uma superfície no IT-3D, assim é possível acoplar os cones de Dirac de duas superfícies de um IT-3D através de um campo externo. Quando acopladas, há um novo potencial que atua no sistema devido a este acoplamento que denotamos como $\varphi = \varphi_1 - i\varphi_2$, assim temos um cenário análogo ao do grafeno. Quando consideramos o potencial químico nulo, verificamos que a hamiltoniana do sistema composto pelas duas superfícies do IT-3D e um campo externo que gera a interação entre elas têm o mesmo corpo da hamiltoniana do grafeno com distorção de Kekulé. Quando buscamos estados modo zero para esse sistema, encontramos duas soluções independentes, onde ambos os estados possuem energia nula. Estes estados carregam carga fracionada $-n\frac{e}{2}$ caso o estado esteja desocupado e $n\frac{e}{2}$ caso esteja ocupado.

Considerando agora o potencial químico diferente de zero, entretanto, o intrínseco do

material igual a 0, encontramos novamente soluções que estão no meio do *gap*, porém, agora a energia destes estados não é mais nula e sim um estado com energia $E = V$ e outro com $E = -V$ onde V se deve a mudança nos níveis de Fermi de cada superfície devido ao potencial externo. Cada um desses estados está localizado em uma das superfícies respectivamente. Esses estados também possuem carga fracionada, porém, ela leva em conta o valor do potencial químico do IT-3D. Este modelo pode ser aplicado no caso do IT-3D ser um dielétrico dentro de um capacitor de placas paralelas. A interação entra as superfícies, devido ao potencial das placas, faz com que existam pares de elétron-buraco ligados, estes pares geram um potencial coulombiano que interagem com os elétrons na superfície do IT-3D. Quando construímos a hamiltoniana para esse sistema, verifica-se que esse potencial faz o papel do potencial escalar complexo no nosso modelo descrito na seção 5.2, portanto, nos permite aplicar todo cálculo desenvolvido nesse problema.

A partir dessas ideias e propostas será interessante procurar de quais outras maneiras podemos fazer com que duas superfícies de um IT-3D interajam entre si e como podemos montar experimentos a fim de verificar se de fato ocorre a fracionalização da carga nesses sistemas. Os portadores de carga no grafeno e na superfície do IT-3D possuem dinâmicas muito semelhantes, então se encontrarmos outro material cuja seus portadores de carga são descritos por hamiltonianas semelhantes, podemos tentar encontrar estados que exibem fracionalização.

7 Referências Bibliográficas

Referências

- [1] C. L. Kane and E. J. Mele, “**A New Spin on the Insulating State,**” *Science*, vol. **314**, no. 5806, pp. 1692–1693, 2006.
- [2] M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. Molenkamp, X. L. Qi, and S. C. Zhang, “**Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells,**” *Science Magazine*, vol. **318**, no. 766, 2007.
- [3] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, “**A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase (first experimental realization of a 3D Topological Insulator),**” *Nature Physics*, no. 970–974, 2008.
- [4] Y. L. Chen, “**Massive dirac fermion on the surface of a magnetically doped topological insulator,**” *Science Magazine*, vol. **329**, no. 659, 2010.
- [5] R. Jackiw, “**Fractional and Majorana fermions: the physics of zero-energy modes,**” *Physica Scripta*, vol. **2012**, no. T146, 2012.
- [6] J. Neilson, **Synthesis of Nitrogen-Doped Graphene on Copper from Azafullerene.** PhD thesis, California State University, Northridge, 2017.
- [7] P. R. Wallace, “**The Band Theory of Graphite,**” *Physical Review*, vol. **71**, no. 622, 1947.
- [8] A. L. Araújo, “**Investigação dos estados topologicamente protegidos em Siliceno e Germaneno,**” 2014, 104f, *Dissertação (Pós-graduação em Física), Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia*, 2014.
- [9] Slideshare, “**Casifufgrs: Teoria de bandas e semicondutores,**” Disponível em: <https://www.slideshare.net/casifufgrs/teoria-de-bandas-e-semicondutores>, Acesso em 27 dez. 2018.
- [10] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, “**New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance,**” *Physical Review Letters*, vol. **45**, no. 6, pp. 494–497, 1980.
- [11] X. Qi and S. Zhang, “**Topological insulators and superconductors,**” *Reviews of Modern Physics*, vol. **83**, no. 1057, 2011.
- [12] Z. G. Chen, “**Tunable Topological Phases in Photonic and Phononic Crystals,**” 2018, 115f, *Tese (Doctor of Philosophy), Abdullah University of Science and Technology, Thuwal, Kingdom of Saudi Arabia*, 2018.

- [13] R. L. R. C. Teixeira, “**Efeito Hall de Spin Quântico em grafeno,**” 2015, 6f, *Trabalho (Pós-graduação em física da matéria condensada), Universidade de São Paulo, São Paulo*, 2015.
- [14] M. Z. Hasan and C. L. Kane, “**Colloquium: Topological insulators,**” *Reviews of Modern Physics*, vol. **82**, no. 3045, 2010.
- [15] C. L. Kane, “**An insulator with a twist,**” *Nature Physics*, vol. **4**, pp. 348–349, 2008.
- [16] R. Jackiw, “**Topology in Physics,**” *Center for Theoretical Physics: MIT, Cambridge*, vol. **3608**, no. 02139-4307, 2005.
- [17] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, “**Soliton excitations in polyacetylene,**” *Physical Review B*, vol. **22**, no. 2099, 1980.
- [18] M. Franz, “**Fractionalization of charge and statistics in graphene and related structures,**” Disponível em: <http://www.int.washington.edu/talks/WorkShops/int-08-37W/People/Franz-M/Franz.pdf>, Acesso em 23 jun. 2019.
- [19] C. Chamon, C.-Y. Hou, R. Jackiw, C. Mudry, and S.-Y. P. A. P. Schnyder, “**Irrational vs. rational charge and statistics in two-dimensional quantum systems,**” *Physical Review Letters*, vol. 110405, no. **100**, 2008.
- [20] A. K. Geim, “**Graphene: Status and Prospects,**” *Science Magazine*, vol. **324**, no. 5934, pp. 1530–1534, 2009.
- [21] C.-Y. Hou, C. Chamon, and C. Mudry, “**Electron fractionalization in two-dimensional graphenelike structures,**” *Physical Review Letters*, vol. **98**, no. 186809, 2007.
- [22] C.-Y. Hou, C. Chamon, and C. Mudry, “**Deconfined fractional electric charges in graphene at high magnetic fields,**” *Physical Review B*, vol. 075427, no. **81**, 2010.
- [23] B. Seradjeh, J. E. Moore and, and M. Franz, “**Vortices, zero modes and fractionalization in bilayer-graphene exciton condensate,**” *Physical Review Letters*, vol. **101**, no. 246404, 2008.
- [24] J. Klinovaja and D. Loss, “**Fractional Charge and Spin States in Topological Insulator Constrictions,**” *Physical Review B*, vol. **92**, no. 121410, 2015.
- [25] B. Seradjeh, J. E. Moore and, and M. Franz, “**Exciton Condensation and Charge Fractionalization in a Topological Insulator Film,**” *Physical Review Letters*, vol. **103**, no. 066402, 2009.

- [26] wikipedia.com, “**Grafeno**,” *Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Grafeno>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [27] hipercultura.com, “**5 características que fazem do grafeno o material do futuro**,” *Disponível em: <https://www.hipercultura.com/caracteristicas-do-grafeno-o-material-do-futuro>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [28] engenheironaweb.com, “**Grafeno: O material 10x mais forte que o aço!**,” *Disponível em: <https://engenheironaweb.com/2017/01/21/grafeno-o-material-10x-mais-forte-que-o-aco>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [29] nobelprize.org, “**The Nobel Prize in Physics 2010**,” *Disponível em: <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/summary>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [30] blogs.oglobo.globo.com, “**Isolantes topológicos - Novos materiais e novas perspectivas tecnológicas!**,” *Disponível em: <https://blogs.oglobo.globo.com/ciencia-matematica/post/isolantes-topologicos-novos-materiais-e-novas-perspectivas-tecnologicas.html>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [31] J. Munkres, “**Topology**,” 2ª Edição, Estados Unidos: Prentice-Hall, 2000.
- [32] portal.if.usp.br, “**A conexão com os isolantes topológicos e o Nobel de Física**,” *Disponível em: <http://portal.if.usp.br/imprensa/pt-br/node/1658>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [33] C. Chamon, C. Y. Hou, R. Jackiw, C. Mudry, S. Y. Pi, , and G. Semenoff, “**Electron fractionalization for two-dimensional Dirac fermions**,” *Physical Review B*, vol. **77**, no. 235431, 2008.
- [34] galileu.globo.com, “**O elétron em pedaços: A descoberta que ganhou o Prêmio Nobel**,” *Disponível em: <http://galileu.globo.com/edic/90/conhecimento2.htm>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [35] nobelprize.org, “**The Nobel Prize in Physics 1998**,” *Disponível em: <http://galileu.globo.com/edic/90/conhecimento2.htm>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [36] wikipedia.org, “**Anyon**,” *Disponível em: <https://en.wikipedia.org/wiki/Anyon>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [37] wikipedia.org, “**Férmion de Majorana**,” *Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Férmion-de-Majorana>*, Acesso em 23 jun. 2019.
- [38] E. Hall, “**On a New Action of the Magnet on Electric Currents**,” *American Journal of Mathematics*, vol. **2**, no. 3, pp. 287–292, 1879.

- [39] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, “**New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance,**” *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, vol. **45**, no. 494, 1990.
- [40] F. Ezawa, “**Quantum Hall Effects: Recent Theoretical and Experimental Developments,**” 3^o edição, *Tohoku:World Scientific*, 2013.
- [41] T. Ando and Y. Matsumoto, “**Theory of Hall Effect in a Two-Dimensional Electron System,**” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. **39**, no. 2, pp. 279–288, 1975.
- [42] S. Zhang, “**Topological states of quantum matter,**” *American Physical Society*, vol. **1**, no. 6, 2008.
- [43] D. Thouless and M. Kohmoto, “**Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential,**” *Physical Review B*, vol. **49**, no. 405, 1982.
- [44] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, “**A Short Course on Topological Insulators: Band-structure topology and edge states in one and two dimensions,**” *Lecture Notes in Physics*, vol. **915**, 2015.
- [45] C. L. Kane and E. J. Mele, “**Quantum Spin Hall Effect in Graphene,**” *Physical Review Letters*, vol. **95**, no. 226801, 2005.
- [46] X. Qi and S. Zhang, “**The quantum spin Hall effect and topological insulators,**” *Physics Today*, vol. **63**, no. 1, p. 33, 2010.
- [47] D. D. dos Reis, “**Estudo das estruturas atômicas de superfície dos isolantes topológicos Bi_2Se_3 e Bi_2Te_3 , e de filmes finos de $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$,**” 2014, 125f, *Tese (Doutorado em física do estado sólido), Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte*, 2014.
- [48] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S. Zhang, “**Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells,**” *Science Magazine*, vol. **314**, no. 5806, pp. 1757–1761, 2006.
- [49] J. Maciejko, T. L. Hughes, and S. Zhang, “**The Quantum Spin Hall Effect,**” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. **2**, pp. 31–53, 2011.
- [50] F. Ortman, S. Roche, S. O. Valenzuela, L. W. Molenkamp, and A. K. Geim., “**Topological Insulators: Fundamentals and Perspectives,**” *Stephan Roche, First Edition*, 2015.
- [51] M. Hasan and J. E. Moore, “**Three-dimensional topological insulators,**” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. **2**, no. 5, 2011.

- [52] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, “**Solid State Physics,**” 1^o Edição, *Brookes Cole*, 1976.
- [53] T. M. Schmidt, R. H. Miwa, and A. Fazzio, “**Spin texture and magnetic anisotropy of Co impurities in Bi_2Se_3 topological insulators,**” *Physical Review B*, vol. **84**, no. 245418, 2011.
- [54] H. Zhang, C. X. Liu, X. L. Qi, X. Dai, Z. Fang, and S. C. Zhang, “**Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface,**” *Nature Physics*, vol. **5**, no. 438, 2009.
- [55] M. Hasan, “**Colloquium: Topological insulators,**” *Reviews of Modern Physics*, vol. **82**, no. 30458, 2010.
- [56] Y. Jompol, C. J. B. Ford, J. P. Griffiths, I. Farrer, G. A. C. Jones, D. Anderson, D. A. Ritchie, T. W. Silk, and A. J. Schofield, “**Probing spin-charge separation in a Tomonaga-Luttinger liquid,**” *Science Magazine*, vol. **325**, no. 5940, p. 597–601, 2009.
- [57] R. Jackiw and C. Rebbi, “**Solitons with fermion number 1/2,**” *Physical Review D*, vol. **13**, no. 3398, 1976.
- [58] T. H. Jozefiak, E. J. Ginsburg, C. B. Gorman, R. H. Grubbs, and N. S. Lewis, “**Voltammetric Characterization of Soluble Polyacetylene Derivatives Obtained from the Ring- Opening Metathesis Polymerization (ROMP) of Substituted Cyclooctatetraenes,**” *Journal of the American Chemical Society*, vol. **115**, pp. 4705–4713, 1993.
- [59] B. S. Hudson, “**Polyacetylene: Myth and Reality,**” *Materials (Basel)*, vol. **11(2)**, no. 242, 2018.
- [60] A. Bessa, C. Carvalho, and E. Fraga, “**Zero-mode analysis of quantum statistical physics,**” *Physical Review E*, vol. **81**, no. 011103, 2010.
- [61] J. K. Pachos, M. Stone, and K. Temme, “**Graphene with Geometrically Induced Vorticity,**” *Physical Review Letters*, vol. **100**, no. 156806, 2008.
- [62] T. Hey and P. Walters, “**The New Quantum Universe,**” 1^o Edição, *Estados Unidos: Press Syndicate of the University of Cambridge*, 2003.
- [63] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “**The electronic properties of graphene,**” *Reviews of Modern Physics*, vol. **81**, no. 109, 2009.

- [64] C. Kittel, “**Introdução à Física do Estado Sólido,**” 8ª Edição, São Paulo: LTC, 2006.
- [65] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, and F. LALOË, “**Quantum Mechanics,**” 1ª Edição, Wiley, vol. 2, pp. 1442–1446, 1977.
- [66] P. Tipler and R. A. L. Ely, “**Física Moderna,**” 3ª Edição, São Paulo: LTC, 2006.
- [67] D. J. Thouless, “**Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics,**” 1ª Edição, University of Washington, Seattle: Word Scientific, 1998.
- [68] M. Kohmoto, “**Topological invariant and the quantization of the Hall conductance,**” *Annals of Physics*, vol. 160, no. 2, pp. 343–354, 1985.
- [69] S. A. Mikhailov, “**A new approach to the ground state of quantum-Hall systems. I. Basic principles,**” *Physica B*, vol. 299, no. 1-2, pp. 6–31, 2001.
- [70] D. R. Yennie, “**Integral quantum Hall effect for nonspecialists,**” *Reviews of Modern Physics*, vol. 59, no. 781, 1987.
- [71] C. L. Kane and E. J. Mele, “ **Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect,**” *Physical Review Letters*, vol. 95, no. 146802, 2005.
- [72] J. E. Moore and L. Balents, “**Topological invariants of time-reversal-invariant band structures,**” *Physical Review B*, vol. 75, no. 121306, 2007.
- [73] J. J. Sakurai, “**Modern Quantum Mechanics,**” Edição Revisada, University of Hawaii, Manoa: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [74] B. C. Wu, A. Bernevig, and S. C. Zhang, “**Helical Liquid and the Edge of Quantum Spin Hall Systems,**” *Physical Review Letters*, vol. 96, no. 106401, 2006.
- [75] S. Weinberg, “**The Quantum Theory of Fields,**” Volume 1, University of Texas, Austin: Cambridge University Press, 1995.
- [76] S. Rachel and K. L. Hur, “**Topological insulators and Mott physics from the Hubbard interaction,**” *Physical Review B*, vol. 82, no. 075106, 2010.
- [77] S. Murakami, “**Quantum Spin Hall Effect and Enhanced Magnetic Response by Spin-Orbit Coupling,**” *Physical Review Letters*, vol. 97, no. 236805, 2006.
- [78] M. Koenig, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. L. Hughes, C. X. Liu, X. L. Qi, and S.-C. Zhang, “**The Quantum Spin Hall Effect: Theory and Experiment,**” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 77, no. 031007, 2008.

- [79] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, “**Topological Insulators in Three Dimensions**,” *Physical Review Letters*, vol. **98**, no. 106803, 2007.
- [80] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, “**Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface**,” *Nature Physics*, p. 398–402, 2009.
- [81] R. Roy, “**Topological phases and the quantum spin Hall effect in three dimensions**,” *Physical Review B*, vol. **79**, no. 195322, 2009.
- [82] C.-X. Liu, X.-L. Qi, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang, , and S.-C. Zhang, “**Model Hamiltonian for topological insulators**,” *Physical Review B*, vol. **82**, no. 045122, 2010.
- [83] A. Karch, “**Electric-Magnetic Duality and Topological Insulators**,” *Physical Review Letters*, vol. **103**, no. 171601, 2009.
- [84] S. A. Kivelson, “**Electron Fractionalization**,” *Synthetic Metals*, vol. **125**, pp. 99–106, 2002.
- [85] J. N. Fuch, D. M. Gangardt, T. Keilmann, and G. V. Shlyapnikov, “**Spin Waves in a One-Dimensional Spinor Bose Gas**,” *Physical Review Letters*, vol. **95**, no. 150402, 2005.
- [86] R. Jackiw, “**Fractional Charge from Topology in Polyacetylene and Graphene**,” *AIP Conference Proceedings*, vol. **939**, no. 341, 2007.
- [87] R. L. Liboff, “**Introductory Quantum Mechanics**,” *Cornell University, EUA: Addison-Wesley Publishing Company*, 1980.
- [88] J. Martin, S. Ilani, B. Verdene, J. Smet, V. Umansky, D. Mahalu, D. Schuh, G. Abstreiter, and A. Yacoby, “**Localization of Fractionally Charged Quasi-Particles**,” *Science*, vol. **305**, no. 5686, pp. 980–983, 2004.
- [89] C. Weeks, G. Rosenberg, B. Seradjeh, and M. Franz, “**Anyons in a weakly interacting system**,” *Nature Physics*, vol. **3**, pp. 796–801, 2007.
- [90] R. Dillenschneider, “**Kekule-distortion-induced exciton instability in graphene**,” *Physical Review B*, vol. **98**, no. 115417, 2008.
- [91] Y. Araki, “**Phase structure of monolayer graphene from effective U(1) gauge theory on honeycomb lattice**,” *Physical Review B*, vol. **85**, no. 125436, 2012.

- [92] C. Chamon, “**Solitons in carbon nanotubes,**” *Physical Review B*, vol. **62**, no. 2806, 2000.
- [93] N. Read and D. Green, “**Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum Hall effect,**” *Physical Review B*, vol. **61**, no. 10267, 2000.
- [94] R. Jackiw and P. Rossi, “**Zero modes of the vortex-fermion system,**” *Nuclear Physics*, vol. **190**, no. 4, pp. 681–691, 1981.
- [95] B. Zhou, H. Z. Lu, R.-L. Chu, S.-Q. Shen, and Q. Niu, “**Finite Size Effects on Helical Edge States in a Quantum Spin-Hall System,**” *Physical Review Letters*, vol. **101**, no. 246807, 2008.