

UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

Fracionalização de Elétrons em Isolantes Topológicos Tridimensionais

Ricardo Junior Machado
Magister Scientiae

VIÇOSA - MINAS GERAIS
2025

RICARDO JUNIOR MACHADO

Fracionalização de Elétrons em Isolantes Topológicos Tridimensionais

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*.

Orientador: Jakson Miranda Fonseca

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2025**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

M149f
2025 Machado, Ricardo Junior, 1990-
Fracionamento de carga em isolantes topológicos
tridimensionais / Ricardo Junior Machado. – Viçosa, MG, 2025.
1 dissertação eletrônica (103 f.): il. (algumas color.).

Orientador: Jakson Miranda Fonseca.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Física, 2025.

Referências bibliográficas: f. 99-103.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2025.773>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Teoria quântica de campos. 2. Matéria condensada.
3. Carga e distribuição elétrica. 4. Equações de Dirac.
5. Fermions. I. Fonseca, Jakson Miranda, 1984-. II. Universidade
Federal de Viçosa. Departamento de Física. Programa de
Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDD 22. ed. 530.143

RICARDO JUNIOR MACHADO

Fracionalização de Elétrons em Isolantes Topológicos Tridimensionais

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: 23 de outubro de 2025.

Assentimento:

Ricardo Junior Machado
Autor

Jakson Miranda Fonseca
Orientador

Essa dissertação foi assinada digitalmente pelo autor em 21/11/2025 às 14:52:47 e pelo orientador em 19/12/2025 às 15:06:00. As assinaturas têm validade legal, conforme o disposto na Medida Provisória 2.200-2/2001 e na Resolução nº 37/2012 do CONARQ. Para conferir a autenticidade, acesse <https://siadoc.ufv.br/validar-documento>. No campo 'Código de registro', informe o código **TIWS.U8G2.B2HZ** e clique no botão 'Validar documento'.

AGRADECIMENTOS

Ao tentar escrever estas linhas, percebo que é difícil traduzir em palavras a gratidão que sinto por todas as pessoas que estiveram comigo nesta trajetória. Sinto-me verdadeiramente afortunado por ter, ao meu redor, pessoas que me apoiam, compartilham comigo o entusiasmo pela descoberta e pelo aprendizado, ensinam, inspiram e me fazem querer ser melhor a cada dia. Por isso, cada passo dado nessa dissertação é resultado não apenas de dedicação individual, mas do amparo e do incentivo que recebi ao longo do caminho.

Aos meus pais, agradeço pelo amor e apoio incondicional, e por sempre acreditarem nas minhas escolhas, mesmo quando o caminho parecia incerto. Tudo o que sou carrega muito do que aprendi com o exemplo de vocês — a honestidade, a humildade, a calma diante das dificuldades, a dedicação e o valor de persistir com coragem. À minha irmã, pelo carinho, companheirismo e pelo bom humor que tanto me ajudaram a manter o ânimo.

Agradeço ao meu orientador, professor Jakson Miranda Fonseca, por todo o aprendizado ao longo destes anos na Universidade Federal de Viçosa (UFV). Agradeço por todas as discussões, pela confiança e pela liberdade que me permitiram trilhar meus próprios caminhos neste trabalho. Guardo com admiração as lições que me transmitiu e espero levá-las comigo, como exemplo, ao longo da minha vida profissional.

Aos meus amigos, alguns sempre por perto, outros acompanhando à distância, agradeço pelo apoio e incentivo constante, pelas conversas e pelas risadas que tornaram os dias mais leves, e pela compreensão nos momentos em que estive ausente. Sou profundamente grato pela companhia de cada um. Se opto por não mencionar nomes é porque seria impossível fazê-lo sem a injustiça de esquecer de alguém, mas sei que todos saberão que me refiro a eles — pessoas por quem guardo admiração, carinho e a mais genuína gratidão pela presença de vocês na minha vida.

A todos os colegas e professores que fizeram parte do meu percurso na UFV, deixo também meu sincero reconhecimento.

A todos vocês, meu muito obrigado.

Este trabalho foi realizado com o apoio das seguintes agências de pesquisa brasileiras: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

"Ficar sentado o menor tempo possível; não dar crença ao pensamento não nascido ao ar livre, de movimentos livres – no qual também os músculos não festejem."

Ecce homo: de como a gente se torna o que a gente é – Friedrich Nietzsche

RESUMO

MACHADO, Ricardo Junior, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, outubro de 2025. **Fracionalização de Elétrons em Isolantes Topológicos Tridimensionais.** Orientador: Jakson Miranda Fonseca.

A fracionalização de carga elétrica é um dos fenômenos emergentes mais intrigantes da física da matéria condensada, desafiando a noção de que a carga elétrica deva ocorrer apenas em múltiplos inteiros da carga do elétron. O conceito de carga fracionária surgiu na teoria quântica de campos, quando Jackiw e Rebbi mostraram que a equação de Dirac em espaço-tempo (1+1)-dimensional admite um modo zero quando o termo de massa sustenta uma única parede de domínio. Eles também mostraram que, ao realizar a segunda quantização da equação de Dirac na presença desse modo zero, o espectro do operador de carga fermiônica de muitas partículas é deslocado em $1/2$ em relação ao espectro do operador de carga fermiônica de muitas partículas para um termo de massa constante. Esse resultado fundamentou a compreensão do fenômeno em sistemas de matéria condensada unidimensionais, como o poliacetileno descrito pelo modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH), e motivou extensões a sistemas bidimensionais, como o modelo de Houcham-Mudry (HCM) para o grafeno com distorção de Kekulé. Este trabalho investiga a possibilidade de realizar mecanismos análogos de fracionalização de carga em isolantes topológicos tridimensionais (ITs 3D), materiais cuja superfície é descrita por férmions de Dirac sem massa protegidos pela simetria de reversão temporal. Partindo da revisão de conceitos fundamentais de física da matéria condensada e teoria quântica de campos, o estudo adapta elementos de modelos efetivos consolidados em 1D e 2D para o contexto destes materiais. São discutidos modelos de Hamiltonianos efetivos contínuos para estados de superfície de ITs 3D, a influência de campos escalares complexos na abertura de *gap* e a introdução de vórtices como potenciais nucleadores de estados ligados. Os resultados obtidos contribuem para identificar critérios teóricos que viabilizam a fracionalização de carga em ITs 3D e, além de aprofundar a compreensão fundamental do fenômeno, este estudo fornece subsídios para futuras investigações sobre possíveis realizações experimentais, especialmente a partir de heteroestruturas que combinem ITs 3D e supercondutores convencionais.

Palavras-chave: fracionalização de carga; isolantes topológicos tridimensionais; modelo de Jackiw-Rebbi; modelo SSH

ABSTRACT

MACHADO, Ricardo Junior, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, October, 2025. **Electron fractionalization in three-dimensional topological insulators.** Adviser: Jakson Miranda Fonseca.

The fractionalization of electric charge is one of the most intriguing emergent phenomena in condensed matter physics, challenging the notion that electric charge should only occur in integer multiples of the electron charge. The concept of fractional charge arose in quantum field theory, when Jackiw and Rebbi showed that the Dirac equation in (1+1)-dimensional spacetime admits a zero mode when the mass term supports a single domain wall. They also demonstrated that, upon second quantization of the Dirac equation in the presence of this zero mode, the spectrum of the many-body fermionic charge operator is shifted by $1/2$ relative to the spectrum obtained for a constant mass term. This result laid the foundation for understanding the phenomenon in one-dimensional condensed matter systems, such as polyacetylene described by the Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model, and motivated extensions to two-dimensional systems, such as the Hou-Chamon-Mudry (HCM) model for graphene with Kekulé distortion. This work investigates the possibility of realizing analogous charge-fractionalization mechanisms in three-dimensional topological insulators (3D TIs), materials whose surfaces are described by massless Dirac fermions protected by time-reversal symmetry. Building on a review of fundamental concepts in condensed matter physics and quantum field theory, the study adapts effective models originally developed in 1D and 2D to the context of these materials. It discusses effective continuous Hamiltonians for the surface states of 3D TIs, the role of complex scalar fields in opening a spectral *gap*, and the introduction of vortices as potential nucleation sites for bound electronic states. The results help identify theoretical criteria that enable charge fractionalization in 3D TIs and, beyond advancing the fundamental understanding of the phenomenon, provide a foundation for future experimental investigations, particularly in heterostructures combining 3D TIs and conventional superconductors.

Keywords: charge fractionalization; three-dimensional topological insulators; Jackiw-Rebbi model; SSH model

Lista de Figuras

- 1.1 Configurações eletrônicas do carbono. São mostradas, de cima para baixo, a hibridização sp ; a hibridização sp^2 ; e a hibridização sp^3 . Fonte: adaptado de [10]. 14
- 1.2 O trans-poliacetileno (abreviado aqui como poliacetileno) é um polímero linear composto por cadeias fracamente acopladas de unidades CH formando uma rede quase unidimensional. As linhas entre os átomos de C e H são representações pictóricas das ligações σ entre os átomos, resultantes da hibridização sp^2 de três dos quatro elétrons de valência do carbono provenientes dos orbitais atômicos $2s$ e $2p$. O quarto elétron de valência do C tem simetria de orbital atômico $2p_z$, formando ligações π que estão meio preenchidas no poliacetileno. Os painéis (a) e (b) correspondem aos dois possíveis padrões de dimerização, isto é, os dois estados fundamentais degenerados, mostrando a coordenada de dimerização u_n . Fonte: adaptado de [1, 11, 12]. 15
- 1.3 Os orbitais de valência do carbono. As ligações σ na rede hexagonal de carbono conectam fortemente os átomos de carbono e são responsáveis pela energia de ligação e pelas propriedades estruturais da folha de grafeno. As ligações π são perpendiculares à superfície da folha. Fonte: adaptado de [9]. 17
- 1.4 Rede de colmeia com distorção de Kekulé, com sub-redes representadas por esferas azuis e pretas. A amplitude de *hopping* eletrônico é aumentada nas ligações espessas em vermelho e reduzida nas ligações finas em amarelo, em relação à amplitude de *hopping* entre primeiros vizinhos t . O padrão de dimerização do tipo Kekulé abre um *gap* de energia para os níveis fermiônicos de partícula única e corresponde, no limite de contínuo, a um campo de Higgs complexo. Fonte: adaptado de [6]. 18

1.5	(a) Representação esquemática em espaço real do estado de borda helicoidal 1D de um isolante topológico bidimensional (IT 2D). (b) Dispersão de energia do estado de borda não degenerado em spin de um IT 2D, formando um cone de Dirac 1D. (c) Representação esquemática em espaço real do estado de superfície helicoidal 2D de um isolante topológico tridimensional (IT 3D). (d) Dispersão de energia do estado de superfície não degenerado em <i>spin</i> de um IT 3D, formando um cone de Dirac 2D; devido à polarização helicoidal de spin, o retroespalhamento de \mathbf{k} para $-\mathbf{k}$ é proibido. Fonte: adaptado de [17].	19
1.6	Férmions de Dirac de superfície helicoidais com acoplamento spin-momento são características marcantes dos isolantes topológicos. (a) Dados de ARPES para Bi_2Se_3 revelam estados eletrônicos de superfície com um único cone de Dirac polarizado em spin. (b) A superfície de Fermi na superfície exibe uma textura quiral de spin com quiralidade à esquerda. (c) Estrutura eletrônica de superfície de Bi_2Se_3 calculada na aproximação de densidade local. As regiões sombreadas descrevem estados de volume, e as linhas representam estados de superfície. (d) Esquema da dispersão dos estados de superfície polarizados em spin na superfície (1;000) de isolantes topológicos Bi_2X_3 . Fonte: adaptado de [19].	23
2.1	Uma rede unidimensional regular Λ com o espaçamento de rede a e a topologia de um anel imposta pelo uso de condições de contorno periódicas. O comprimento do anel é $L = Na$. Fonte: adaptado de [1].	27
2.2	(a) A dispersão de energia de partícula única da Eq. (2.12) para o Hamiltoniano com <i>hopping</i> uniforme t , definido na Eq. (2.11), ao longo da zona de Brillouin definida na Eq. (2.9), no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. (b) A mesma dispersão, mas dobrada sobre metade da zona de Brillouin, como feito na Eq. (2.24). Fonte: adaptado de [1].	28
2.3	(a) <i>Gap</i> da Eq. (2.50) como função de $\delta t/t$. (b) Dispersão da cadeia dimerizada quando $ \delta t \ll t$. (c) Dispersão da cadeia dimerizada quando $ \delta t = t$, caso em que a cadeia se decompõe em $N/2$ dímeros disjuntos. (d) Dispersão da cadeia dimerizada quando $ \delta t \gg t$. Fonte: adaptado de [1].	35
2.4	(a) Estados ligados localizados nos defeitos pontuais do padrão de dimerização. (b) Espectro eletrônico de partícula única na presença de um par sóliton/anti-sóliton suficientemente afastados. Fonte: adaptado de [1].	49
2.5	Escalas de comprimento características das funções teste $f^{\bar{s}}(x)$ e $f^s(x)$ localizadas em torno das posições $x_{\bar{s}}$ e x_s , usadas para sondar as cargas fracionárias associadas aos modos zero $\psi^{\bar{s}}(x)$ e $\psi^s(x)$ ligados a um par sóliton/anti-sóliton separado por uma distância $r_{s\bar{s}}$. Fonte: adaptado de [1].	53

2.6	(a) Decomposição do espectro do Hamiltoniano \mathcal{H}_ϕ definido na Eq. (2.231) em espectro pontual e contínuo. A simetria espectral unitária $\{\mathcal{H}_\phi, \Gamma_5\} = 0$ garante o pareamento de todos os autoestados de partícula única com autovalores não-nulos em pares com energias opostas. (b) Decomposição do espectro de \mathcal{H} definido na Eq. (2.230) em espectro pontual e contínuo. Qualquer modo zero de \mathcal{H}_ϕ se torna um estado limítrofe nas energias $\varepsilon = \pm \mu_s $. O espectro não-limítrofe de \mathcal{H} corresponde ao conjunto de todas as autoenergias com $\varepsilon^2 > \mu_s^2$. Fonte: adaptado de [1].	65
3.1	Rede de colmeia e sua zona de Brillouin. À esquerda: estrutura da rede do grafeno, composta por duas redes de Bravais triangulares interpenetradas, com vetores de base \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , e vetores de ligação com vizinhos mais próximos δ_i , com $i = 1, 2, 3$. Os sítios da sub-rede A estão indicados por pontos azuis e os da sub-rede B por pontos amarelos. À direita: zona de Brillouin correspondente, com vetores de base recíprocos \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 . Os pontos altamente simétricos Γ , K_+ , K' e M também são indicados. Fonte: adaptado de [50].	70
3.2	Bandas eletrônicas π e π^* do grafeno. A relação de dispersão linear próxima aos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- da primeira zona de Brillouin 2D dá origem aos “cones de Dirac”, como mostrado à direita. Note que, próximo a esses cones, k_x e k_y são usados para denotar o desvio em relação ao ponto de Dirac correspondente. Fonte: adaptado de [9].	72
3.3	Primeira zona de Brillouin da rede triangular, mostrada juntamente com os pontos de Dirac K_\pm , o vetor recíproco \mathbf{G} que os conecta e a dispersão relativística massiva centrada em torno de K_\pm que se abre devido a uma distorção de Kekulé com $\Delta(r) = \Delta_0$. Fonte: adaptado de [7].	76
4.1	Estrutura cristalina do Bi_2Se_3 com três vetores primitivos de rede denotados por $\mathbf{t}_{1,2,3}$. (a) Estrutura de uma camada quántupla com a sequência $\text{Se1} - \text{Bi1} - \text{Se2} - \text{Bi1}' - \text{Se1}'$, indicada pelo retângulo vermelho. (b) Vista superior ao longo da direção z . A rede triangular em uma camada quántupla possui três posições distintas, denotadas por A, B e C. (c) Vista lateral da estrutura de camada quántupla. Sob uma operação de inversão, na qual os átomos de Se2 atuam como centros de inversão, Bi1 é mapeado em Bi1' e Se1 é mapeado em Se1'. Fonte: adaptado de [29]. . .	80
4.2	Representação esquemática da origem da estrutura de bandas do Bi_2Se_3 . Partindo dos orbitais atômicos de Bi e Se, são necessários três passos para entender a estrutura de bandas: (I) a hibridização dos orbitais de Bi e Se, (II) a formação dos estados ligantes e antiligantes devido à simetria de inversão, (III) a divisão por campo cristalino e a influência do acoplamento spin-órbita (SOC). A linha tracejada azul representa a energia de Fermi. Fonte: adaptado de [29].	81

Sumário

1	Introdução	12
2	Fracionalização de carga em sistemas unidimensionais	25
2.1	Fenomenologia do poliacetileno e modelo <i>tight-binding</i>	25
2.1.1	Modelo <i>tight-binding</i> ao longo de uma cadeia	25
2.1.2	Dobramento espectral	30
2.1.3	Um modelo para o poliacetileno	33
2.2	O Modelo Su-Schrieffer-Heeger	35
2.3	Limite contínuo e teoria de campos efetiva	39
2.4	O Trabalho pioneiro de Jackiw e Rebbi	42
2.4.1	Fundamentos teóricos	42
2.4.2	Quantização do campo de Dirac em <i>background</i> solitônico	45
2.5	Fracionalização no poliacetileno	49
2.5.1	Modos de energia zero no limite contínuo	54
2.5.2	Fracionalização via teoria de espalhamento	57
2.5.3	Assimetria espectral e fracionalização	61
3	Fracionalização de carga em sistemas bidimensionais	69
3.1	Propriedades eletrônicas do grafeno	69
3.2	Fracionalização de carga no grafeno com distorção de Kekulé	75
4	Isolantes topológicos tridimensionais	79
4.1	Modelo efetivo para estados de superfície	79
5	Resultados	83
5.1	Modelo proposto	83
5.1.1	Análise detalhada da existência e estrutura dos modos zero	86
6	Conclusões e perspectivas futuras	94
	Referências	99

Capítulo 1

Introdução

Na física da matéria condensada, estamos interessados nos blocos fundamentais da matéria constituídos por átomos. Os átomos, por sua vez, são feitos de núcleos e elétrons. A escala de comprimento microscópica característica dessa matéria é a distância média entre o núcleo e o elétron em um átomo de hidrogênio, isto é, o raio de Bohr. Nessa escala de comprimento, núcleos e elétrons são partículas pontuais. Por um lado, núcleos e elétrons têm propriedades intrínsecas, como massa, carga elétrica, momento linear, momento angular e energia, que são compartilhadas com partículas pontuais da mecânica clássica. Por outro lado, núcleos e elétrons possuem atributos de onda, números quânticos discretos e graus de liberdade internos que só podem ser descritos dentro do domínio da mecânica quântica [1].

Como a matéria de interesse é composta por um número astronômico grande de núcleos e elétrons, ela deve ser descrita dentro do formalismo da física de muitas partículas. O estado fundamental é um estado quântico de muitas partículas, bem como as excitações que são construídas a partir dele. Ora, o estado fundamental quântico de muitas partículas e seus estados excitados podem ser muito diferentes de seus equivalentes quando todas as interações (eletromagnéticas) entre núcleos e elétrons são desligadas. O tratamento mais simples das interações entre núcleos e elétrons é assumir que os núcleos estão localizados nos sítios de uma rede (não necessariamente periódica) e que suas interações com os elétrons são aproximadas por um potencial clássico de um corpo, para elétrons que, de outra forma, não interagem [1, 2]. Mesmo nesse limite, o estado fundamental de muitas partículas para os elétrons pode adquirir propriedades exóticas no limite termodinâmico.

A fracionalização de carga representa um dos fenômenos mais intrigantes da física moderna, desafiando a intuição de que cargas elétricas devem aparecer como múltiplos inteiros da carga eletrônica fundamental. O conceito de carga fracionária emergiu da teoria quântica de campos em 1976, quando Jackiw e Rebbi [3] mostraram que a equação de Dirac massiva, em espaço-tempo com (1+1) dimensões, admite um modo fermiônico ligado de energia zero quando o termo de massa suporta uma parede de domínio simples. Após a segunda quantização da equação de Dirac na presença desse modo zero, como eles também mostraram, o espectro do operador de carga fermiônica de muitas partículas é deslocado em $1/2$ em relação ao do operador de carga

de muitas partículas com um termo de massa constante [1, 4, 5].

Como também demonstrado por Jackiw e Rebbi [3], no caso tridimensional, quando se acoplam campos de Yang-Mills através de um acoplamento mínimo com campos de Higgs e com férmions de Dirac, a quantização dos férmions de Dirac no fundo estático de um monopolo de 't Hooft-Polyakov nucleia um estado ligado fermiônico com carga fracionária igual a $1/2$ a um custo finito em energia [4, 6].

Este trabalho pioneiro estabeleceu as bases teóricas para a compreensão de como propriedades topológicas não triviais dos campos envolvidos podem levar à fracionalização de números quânticos fundamentais, um fenômeno que vai além da descrição convencional de partículas elementares em sistemas físicos. As condições adequadas para que o mecanismo de fracionalização ocorra são as seguintes: (i) a própria noção de carga fracionária demanda que o número de férmions seja um bom número quântico; (ii) os campos bosônicos envolvidos devem disparar a quebra espontânea de uma simetria que abre um *gap* no espectro fermiônico de partícula única; (iii) os campos bosônicos devem sustentar defeitos topológicos locais que possibilitem nuclear estados ligados fermiônicos de partícula única na vizinhança imediata dos defeitos [6, 7].

A fracionalização da carga fermiônica é uma propriedade de baixa energia e de longo alcance do sistema de muitas partículas. Isso sugere que as lições aprendidas com teorias de campos quânticos poderiam ser aplicadas de maneira mais geral a modelos microscópicos contidos na física da matéria condensada, abrindo inclusive a possibilidade de uma medição da carga fracionária [6, 7].

Em alguns sistemas de matéria condensada, o espectro de excitação de elétrons próximo à superfície de Fermi pode ser determinado a partir de uma equação matricial do tipo Dirac. Esta equação não surge de considerações relativísticas, mas sim da linearização da dispersão de energia próxima a um número finito de interseções da dispersão de energia com o nível de Fermi (chamadas de pontos de Dirac). Tais sistemas podem exibir fracionalização de férmions, satisfeitas as condições apontadas anteriormente, se a equação de Dirac possuir estados ligados isolados no *gap* entre estados de energia negativa (banda de valência) e estados de energia positiva (banda de condução) [8].

O carbono é um dos elementos mais versáteis da tabela periódica em termos do número de compostos criados a partir dele, principalmente devido aos tipos de ligações que pode formar (simples, duplas e triplas) e ao número de átomos diferentes com os quais pode se ligar [9]. Considerando sua configuração eletrônica no estado fundamental ($1s^2 2s^2 2p^2$), o carbono possui dois elétrons de núcleo ($1s$) que não estão disponíveis para ligação química e quatro elétrons de valência ($2s$ e $2p$) que podem participar da formação de ligações. O carbono pode rearranjar a configuração dos elétrons de valência para maximizar o número de ligações formadas, pois a formação de ligações químicas induz uma diminuição na energia do sistema. Esse rearranjo, chamado hibridização, afeta apenas os elétrons $2s$ e $2p$. Uma forma possível de hibridização consiste em misturar os quatro orbitais atômicos (um orbital $2s$ e três orbitais $2p$), formando quatro orbitais híbridos sp^3 , cada um contendo apenas um elétron, como na Figura 1.1. Para

minimizar a repulsão, esses quatro orbitais híbridos otimizam sua posição no espaço, levando a uma geometria tetraédrica, na qual quatro ligações são formadas com átomos vizinhos de carbono, cada uma com um ângulo de $109,5^\circ$ em relação às demais. Outro esquema de hibridização é a mistura de três orbitais atômicos (um $2s$ e dois $2p$), formando três orbitais híbridos sp^2 , cada um com um elétron, também mostrado na Figura 1.1. Esses orbitais se arranjam em geometria trigonal planar, com ângulos de 120° , formando três ligações.

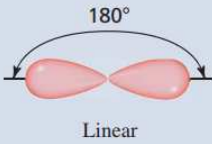
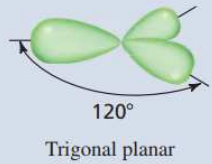
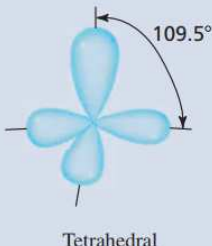
Pure Atomic Orbitals of the Central Atom	Hybridization of the Central Atom	Number of Hybrid Orbitals	Shape of Hybrid Orbitals
s, p	sp	2	 <p>Linear</p>
s, p, p	sp^2	3	 <p>Trigonal planar</p>
s, p, p, p	sp^3	4	 <p>Tetrahedral</p>

Figura 1.1: Configurações eletrônicas do carbono. São mostradas, de cima para baixo, a hibridização sp ; a hibridização sp^2 ; e a hibridização sp^3 . Fonte: adaptado de [10].

Sistemas quase unidimensionais são bastante comuns em matéria condensada. Uma classe desses sistemas consiste em polímeros, que são moléculas grandes em forma de cadeia com átomos de carbono formando a “espinha dorsal”, acoplados por forças intercadeias relativamente fracas. Os elétrons podem se mover muito mais facilmente ao longo da cadeia do que saltando entre as cadeias, e seu movimento pode ser considerado efetivamente unidimensional. Um exemplo particularmente importante é o poliacetileno, que é feito de cadeias de átomos de carbono e hidrogênio com fórmula química $(CH)_x$ ($x \rightarrow \infty$). Entre os vários arranjos espaciais dos átomos de carbono e hidrogênio, o mais estável é o $\text{trans-}(CH)_x$, mostrado na Figura 1.2. Cada célula unitária contém dois carbonos e dois hidrogênios, e, portanto, dez elétrons de valência (dois dos hidrogênios e oito dos carbonos). Para cada átomo de carbono na cadeia, sua configuração eletrônica de valência é $2s^2 2p^2$. Os orbitais $2s$, $2p_x$ e $2p_y$ misturam-se por efeito do campo cristalino imposto pelos vizinhos mais próximos, originando três orbitais híbridos sp^2 . Esses orbitais híbridos orientam-se em um plano e formam três ligações σ com os

átomos vizinhos. No poliacetileno, essa coordenação é adaptada à sua geometria linear: cada carbono liga-se a dois outros carbonos e a um hidrogênio por meio dessas ligações σ . O orbital remanescente $2p_z$, perpendicular ao plano da cadeia, não participa do processo de hibridização sp^2 . Esses orbitais p_z se sobrepõem lateralmente ao longo da cadeia, formando um sistema estendido de ligações π . Cada carbono contribui com um elétron π , que é deslocalizado ao longo da cadeia, sendo esse sistema de elétrons deslocalizados responsável pelo comportamento de baixa energia do poliacetileno [11].

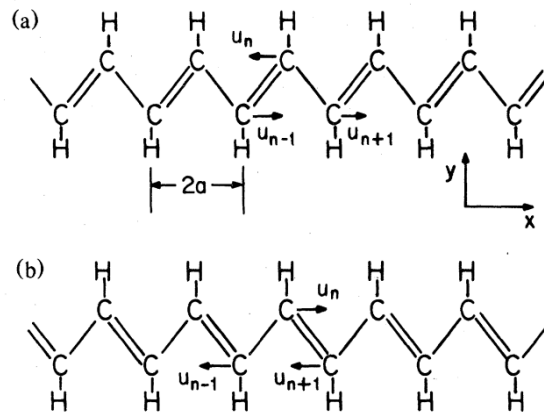


Figura 1.2: O trans-poliacetileno (abreviado aqui como poliacetileno) é um polímero linear composto por cadeias fracamente acopladas de unidades CH formando uma rede quase unidimensional. As linhas entre os átomos de C e H são representações pictóricas das ligações σ entre os átomos, resultantes da hibridização sp^2 de três dos quatro elétrons de valência do carbono provenientes dos orbitais atômicos $2s$ e $2p$. O quarto elétron de valência do C tem simetria de orbital atômico $2p_z$, formando ligações π que estão meio preenchidas no poliacetileno. Os painéis (a) e (b) correspondem aos dois possíveis padrões de dimerização, isto é, os dois estados fundamentais degenerados, mostrando a coordenada de dimerização u_n . Fonte: adaptado de [1, 11, 12].

O poliacetileno sofre uma transição de Peierls, induzida pelo acoplamento elétron-fônon. Em temperaturas suficientemente baixas, o custo de energia elástica de uma distorção na rede é compensado pelo ganho em energia eletrônica através da abertura de um *gap* na energia de Fermi [1]. A instabilidade de Peierls dita que a cadeia de carbono dimeriza espontaneamente, resultando em duas configurações de estado fundamental degeneradas, como mostrado nas Figuras (1.2)(a) e (b) [11]. Os efeitos combinados do *hopping* de elétrons π e da dimerização da rede no poliacetileno são adequadamente descritos através do modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH).

O fenômeno da fracionalização no poliacetileno foi previsto teoricamente por Su, Schrieffer e Heeger em 1979 [5, 12]. A distorção da rede subjacente perturba o movimento dos elétrons de modo a abrir um *gap* no espectro de energia. Na descrição de baixas energias e longos comprimentos de onda do comportamento eletrônico por equação de Dirac, isso é alcançado acoplando o campo de Dirac Ψ a um campo escalar Φ , que é uma medida da distorção da rede. O campo Φ possui uma simetria \mathbb{Z}_2 com dois estados fundamentais nos quais assume

valores homogêneos $\pm\Phi_0$. Mas Φ também pode assumir um perfil de *kink* dependente da posição Φ_s que interpola entre os dois vácuos $\pm\Phi_0$. Esta “torção” do termo de massa descreve um defeito na distorção da rede. A equação de Dirac com o perfil de *kink* Φ_s substituindo o homogêneo possui um autoestado isolado no meio do *gap* (energia zero). Isso dá origem ao número fermiônico fracionário $1/2$ para os elétrons [8]. Em trabalhos subsequentes, mostrou-se que a fracionalização de carga em sistemas quânticos de muitas partículas unidimensionais não está restrita a valores fracionários mas pode ser continuamente ajustada por uma pequena quebra da simetria de reflexão do espectro de energia assumida nas Refs. [3] e [12].

A extensão destes conceitos para sistemas bidimensionais trouxe novos desafios e oportunidades. Com a descoberta dos efeitos Hall quânticos inteiro e fracionário, um paradigma diferente para a fracionalização de carga, em que a quebra espontânea de simetria não desempenha papel algum, foi proposto por Laughlin [40] para sistemas bidimensionais com uma forte quebra da simetria de reversão temporal por um campo magnético externo. Central para este paradigma está a noção de ordem topológica, que constitui uma propriedade global que caracteriza um estado incompressível da matéria através da degenerescência finita do estado fundamental quando o sistema é definido sobre uma superfície de topologia não trivial, com a degenerescência dependendo do *genus* da superfície. A carga fracionária está intimamente conectada a esta degenerescência do estado fundamental, que não permite variação contínua da carga fracionária [6, 7].

Materiais de carbono em nanoescala também revelam um rico polimorfismo de vários alótropos, exibindo todas as possíveis dimensionalidades: molécula de fulereno (0D), nanotubos (1D), grafite e fitas de grafeno (2D) e nanodiamante (3D) são alguns exemplos [9]. Devido a essa extraordinária versatilidade de materiais, que exibem diferentes propriedades físicas e químicas, as nanoestruturas de carbono desempenham um papel importante na ciência fundamental e na nanotecnologia.

Grafeno é o nome dado à folha plana idealmente perfeita e infinita de um átomo de espessura, composta por átomos de carbono com ligação sp^2 , dispostos em uma rede cristalina em forma de favo de mel, como representado na Figura 1.3. O grafeno monocamada bidimensional serve como bloco de construção para as demais nanoestruturas mencionadas (exceto o nanodiamante) podem ser derivadas dele. Nanofitas de grafeno podem ser vistas como estruturas quase unidimensionais, com uma dimensão lateral curta o suficiente para gerar efeitos de confinamento quântico. Nanotubos de carbono podem ser construídos dobrando nanofitas de grafeno em cilindros, e o grafite resulta do empilhamento de um grande número de monocamadas de grafeno fracamente ligadas. Na verdade, acreditava-se que o grafeno puro não poderia existir livremente, sendo instável em relação à formação de estruturas curvas como fulerenos e nanotubos. No entanto, em 2004, amostras de grafeno foram sintetizadas por esfoliação mecânica (remoção repetida por fita adesiva) a partir de grafite [13, 14]. Ao mesmo tempo, foi relatada a rota para controlar o crescimento epitaxial de multicamadas de grafeno sobre carbeto de silício (SiC) por decomposição térmica [15], o que eventualmente levou à fabricação de monocamadas únicas de

grafeno com qualidade variável.

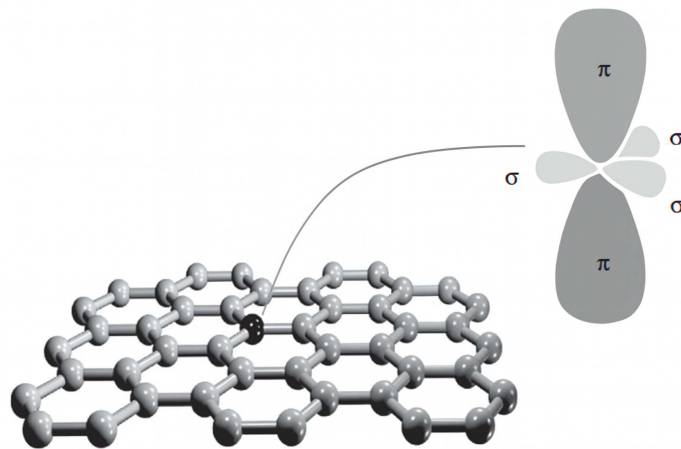


Figura 1.3: Os orbitais de valência do carbono. As ligações σ na rede hexagonal de carbono conectam fortemente os átomos de carbono e são responsáveis pela energia de ligação e pelas propriedades estruturais da folha de grafeno. As ligações π são perpendiculares à superfície da folha. Fonte: adaptado de [9].

A relativa facilidade de produção do grafeno usando o método da fita adesiva e a possibilidade de transferir uma única camada atômica de carbono do grafite para um substrato adequado para medições de propriedades elétricas levaram a um interesse renovado nesse que foi considerado um sistema bidimensional teórico prototípico. O grafeno apresenta propriedades eletrônicas incomuns decorrentes do confinamento dos elétrons em duas dimensões e de características geométricas peculiares. Suas propriedades eletrônicas básicas já eram bem conhecidas desde o trabalho seminal de Wallace [16] no final da década de 1940, e os modelos teóricos prevêem que a dispersão eletrônica linear característica perto dos cantos da zona de Brillouin (pontos de Dirac) dá origem a elétrons e buracos que se propagam como férmions de Dirac sem massa, com velocidade da ordem de centésimos da velocidade da luz. Essas excitações próximas ao nível de Fermi podem ser descritas formalmente como partículas relativísticas sem massa obedecendo à equação de Dirac, com um novo grau de liberdade derivado de simetrias inerentes (degenerescência de sub-rede), que aparece nos estados eletrônicos: o pseudospin.

A superfície de Fermi em meio preenchimento para uma folha de grafeno consiste em dois pontos inequivalentes isolados. O espectro de excitação ao redor desses dois pontos de Dirac dota os elétrons de banda com uma estrutura de Dirac de quatro componentes [50]. É exatamente essa propriedade que abre a porta para a fracionalização de carga, sem a quebra da simetria de reversão temporal, por meio de quebra espontânea de simetria, como mostrado por Hou *et al.* [7]. As flutuações sobre as amplitudes de *hopping* uniformes entre vizinhos mais próximos no grafeno, particularmente as do tipo denominado de distorção de Kekulé (Figura 1.4), no limite de contínuo, podem ser representadas por um campo de Higgs com valor complexo que interage com os férmions de Dirac de quatro componentes [7, 6]. Um valor constante desse

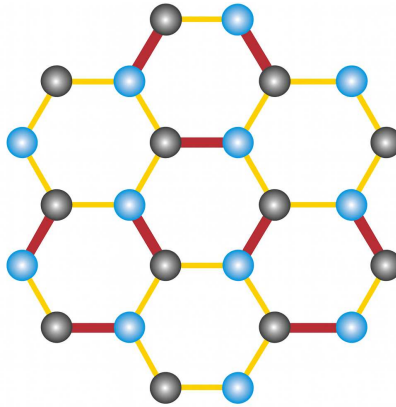


Figura 1.4: Rede de colmeia com distorção de Kekulé, com sub-redes representadas por esferas azuis e pretas. A amplitude de *hopping* eletrônico é aumentada nas ligações espessas em vermelho e reduzida nas ligações finas em amarelo, em relação à amplitude de *hopping* entre primeiros vizinhos t . O padrão de dimerização do tipo Kekulé abre um *gap* de energia para os níveis fermiônicos de partícula única e corresponde, no limite de contínuo, a um campo de Higgs complexo. Fonte: adaptado de [6].

campo de Higgs com valor complexo quebra espontaneamente uma simetria axial $U(1)$ efetiva do limite de contínuo e abre um *gap* no espectro fermiônico de partícula única. Se a fase desse campo de Higgs com valor complexo é defeituosa de tal forma a sustentar um perfil de vórtice, esta estrutura topológica nucleia estados ligados fermiônicos de partícula única que carregam a carga fracionária $\pm 1/2$ por estado. O custo de energia não é finito, no entanto.

Jackiw e Pi [8] mostraram que o custo de energia de um vórtice no campo de Higgs com valor complexo pode ser tornado finito se os férmions de Dirac e o campo de Higgs acoplarem-se minimamente a dois campos bosônicos reais que realizam os dois componentes vetoriais de um campo de *gauge* axial, e se esse campo de *gauge* também sustentar vórtices [6].

O progresso na física da matéria condensada frequentemente é impulsionado por descobertas de novos materiais. Nesse sentido, materiais que apresentam propriedades quânticas únicas são de particular importância [17]. Nas últimas duas décadas, emergiu um novo campo na física da matéria condensada baseado na realização de que a interação spin-órbita pode levar a fases eletrônicas topologicamente isolantes e na previsão e observação dessas fases em materiais reais [19]. Um isolante topológico (IT), como um isolante comum, possui um *gap* de energia no volume (*bulk*), que separa a banda eletrônica ocupada mais alta da banda vazia mais baixa. A interface de um isolante topológico - ou seja, a superfície em três dimensões e a borda em duas dimensões, no entanto, possui necessariamente estados sem *gap* que são protegidos pela simetria de reversão temporal, como representado na Figura 1.5. Esses estados de interface originam um comportamento condutor com propriedades únicas, distintas das encontradas nos sistemas eletrônicos unidimensionais ou bidimensionais mais conhecidos. Além de seu interesse fundamental, as propriedades especiais desses estados são previstas de serem possivelmente úteis para aplicações que vão desde a spintrônica até a computação quântica [19].

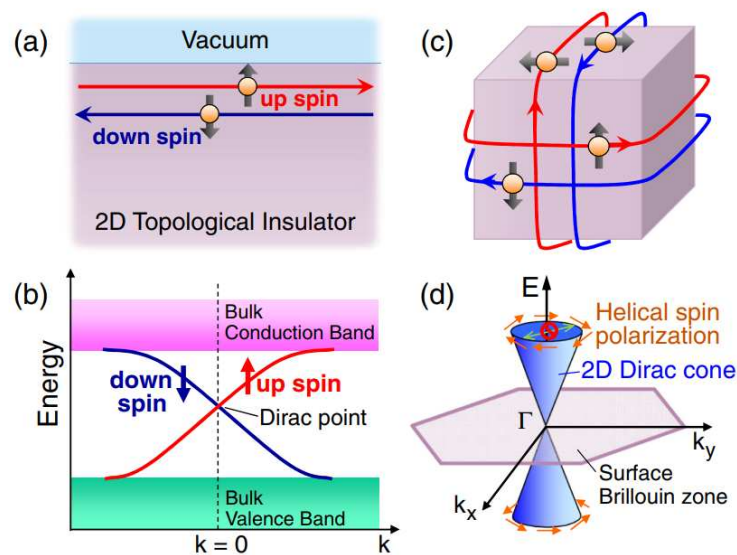


Figura 1.5: (a) Representação esquemática em espaço real do estado de borda helicoidal 1D de um isolante topológico bidimensional (IT 2D). (b) Dispersão de energia do estado de borda não degenerado em spin de um IT 2D, formando um cone de Dirac 1D. (c) Representação esquemática em espaço real do estado de superfície helicoidal 2D de um isolante topológico tridimensional (IT 3D). (d) Dispersão de energia do estado de superfície não degenerado em *spin* de um IT 3D, formando um cone de Dirac 2D; devido à polarização helicoidal de spin, o retrospalhamento de \mathbf{k} para $-\mathbf{k}$ é proibido. Fonte: adaptado de [17].

O estudo dos isolantes topológicos emergiu de uma sequência de descobertas fundamentais na física da matéria condensada, relacionadas ao papel da topologia na descrição de propriedades eletrônicas de materiais. Em 1980, von Klitzing *et al.* [20] descobriram o efeito Hall quântico (QHE) em um semiconductor bidimensional de alta mobilidade sob altos campos magnéticos. A ocorrência deste efeito é normalmente limitada a baixas temperaturas, onde os elétrons se movem em órbitas de Landau quantizadas, o que leva ao desaparecimento da condutividade longitudinal σ_{xx} , enquanto a condutividade Hall σ_{xy} é quantizada em múltiplos inteiros de e^2/h quando o potencial químico está localizado entre os níveis de Landau. Essa quantização dos coeficientes de transporte apontou para um fenômeno quântico macroscópico, e logo se percebeu que o efeito Hall quântico poderia ser descrito por uma topologia de espaço de momento [17]. O efeito Hall de spin, que consiste no aparecimento de uma corrente transversal de spin em resposta a um campo elétrico longitudinal, já vinha sendo discutido teoricamente desde a década de 1970, mas sua confirmação experimental, por Kato *et al.* [21] em 2004, deu um grande impulso à pesquisa nessa área. Mais tarde, Murakami, Nagaosa e Zhang [22] propuseram o conceito de isolante Hall de spin, que é um isolante com *gap*, de condutividade elétrica nula, mas que apresenta uma condutividade Hall de spin finita, devido a uma fase de Berry finita associada aos estados ocupados [17]. Essa ideia levou a propostas subsequentes de uma versão quantizada, o isolante Hall quântico de spin (QSH), de Kane e Mele [23]. Os isolantes QSH são essencialmente

duas cópias do sistema de Hall quântico, nas quais o estado de borda quiral é polarizado em spin, e os dois estados formam um par relacionado por reversão temporal, restaurando assim a simetria de reversão temporal (TRS). O modelo deles é essencialmente o modelo do grafeno com acoplamento spin-órbita (SOC) [17].

Mais importante ainda, Kane e Mele reconheceram que os estados eletrônicos do isolante Hall quântico de spin podem ser caracterizados por uma nova topologia, descrita por um invariante \mathbb{Z}_2 , que expressa se o número de cruzamentos de estados de borda entre 0 e π é par ou ímpar [24]. Bernevig, Hughes e Zhang (BHZ) [25] previram que um poço quântico de CdTe/HgTe/CdTe deveria exibir o efeito QSH. Essa previsão foi verificada em 2007 por König *et al.* [26], que observaram σ_{xx} quantizado em $2e^2/h$ sob campo magnético nulo, quando o potencial químico era ajustado dentro do *gap* da banda de *bulk*. Esse foi o primeiro sucesso experimental na confirmação de uma fase topológica invariante por reversão temporal caracterizada pelo índice \mathbb{Z}_2 [17].

Antes mesmo da verificação experimental da topologia \mathbb{Z}_2 em 2D, teóricos notaram que essa classificação topológica poderia ser estendida a sistemas tridimensionais, nos quais existem quatro invariantes \mathbb{Z}_2 que descrevem completamente a topologia [17]. Em 2006, Fu e Kane [27] fizeram a predição concreta de que a liga $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, no regime isolante, seria um isolante topológico tridimensional, e que a topologia não trivial poderia ser verificada observando-se os estados de superfície via espectroscopia de fotoemissão angular (ARPES) e contando o número de vezes que esses estados cruzam o nível de Fermi entre dois pontos invariantes por reversão temporal. O experimento conduzido por Hsieh *et al.* [28] em 2008 confirmou que $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ é, de fato, um isolante topológico 3D [17].

Uma consequência importante de uma topologia não trivial associada às funções de onda de um isolante é justamente que estados sem *gap* na interface necessariamente aparecem quando o isolante é fisicamente truncado e entra em contato com um isolante comum (incluindo o vácuo). Isso ocorre porque a topologia não trivial é uma característica discreta dos estados com *gap*, e enquanto o *gap* de energia permanece aberto, a topologia não pode mudar. Portanto, para a topologia mudar na interface para uma trivial, o *gap* deve fechar na interface. Assim, os ITs tridimensionais (3D) sempre estão associados a estados de superfície sem *gap*, e os ITs bidimensionais (2D) têm estados de borda sem *gap*. Esse princípio para a ocorrência necessária de estados sem *gap* na interface é chamado de correspondência *bulk*-fronteira em fases topológicas [17].

Materiais da família Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , e Sb_2Te_3 representam realizações experimentais bem caracterizadas de isolantes topológicos tridimensionais [29, 30, 31, 32]. Suas propriedades eletrônicas são bem descritas por modelos efetivos de quatro bandas que capturam a física essencial dos estados de superfície. Nesses sistemas, o acoplamento spin-órbita induz uma inversão de bandas no ponto Γ do centro da zona de Brillouin. Na fase topologicamente não trivial, existe um estado de superfície topologicamente protegido, consistindo em um único férmion de Dirac bidimensional sem massa. Este férmion de Dirac é helicoidal, no sentido de

que o spin aponta perpendicularmente ao momento, formando uma textura helicoidal no espaço de momentos, como mostrado na Figura 1.5(d). Perturbações de partícula única invariantes sob reversão temporal não podem abrir um *gap* para o estado de superfície, sendo necessário, para isso, que uma perturbação que quebra a reversão temporal seja introduzida na superfície. Nesse caso, o sistema torna-se totalmente isolante, tanto no *bulk* quanto na superfície, dando origem a novos fenômenos, como o efeito magnetoelétrico topológico [31].

Essa simplicidade da estrutura do estado de superfície torna esses materiais bastante apropriados para experimentos que abordam as propriedades topológicas superficiais. Os experimentos de transporte de carga mostram-se problemáticos em materiais tridimensionais, pois a assinatura da condutividade associada ao caráter topológico dos estados de superfície é mais sutil em três dimensões. Além disso, é difícil separar a contribuição da superfície daquela proveniente do *bulk*. O método de ARPES é o ideal para investigar o caráter topológico dos estados de superfície [19]. A técnica de ARPES utiliza fótons para ejetar elétrons de um cristal e, em seguida, determina a estrutura eletrônica de superfície ou de *bulk* a partir da análise do momento do elétron emitido. ARPES de alta resolução, realizada com energia de fóton modulada, permite isolar de forma clara os estados de superfície daqueles do *bulk*, pois aqueles não se dispersam na direção perpendicular à superfície, enquanto estes sim. Além disso, diferentemente dos experimentos de transporte, o ARPES realizado em modo de resolução de spin pode medir a distribuição das orientações de spin na superfície de Fermi, o que permite estimar a fase de Berry associada à superfície. A sensibilidade ao spin é fundamental para sondar a existência do acoplamento spin-momento esperado na superfície como consequência da ordem topológica do *bulk*. As propriedades características dos estados topológicos de superfície foram demonstradas, por exemplo, a partir de dados de ARPES para o Bi_2Se_3 , que apresenta o cone de Dirac mais simples e um *gap* de banda grande em relação aos isolantes topológicos conhecidos, como mostrado na Fig. 1.6 [17].

Um tema importante na pesquisa de materiais isolantes topológicos é a redução dos portadores de carga não intencionais presentes no *bulk*, os quais dificultam a observação das propriedades de transporte de superfície. Cristais naturais de Bi_2Se_3 são sempre do tipo *n*, com densidade típica de portadores de $n_{3D} \sim 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, devido à presença termodinamicamente inevitável de vacâncias de selênio ($\text{V}_{\text{Se}}^{\bullet\bullet}$) ou a defeitos de antisítio de selênio ($\text{Se}_{\text{Bi}}^{\bullet}$). A dopagem com Ca^{2+} no sítio de Bi^{3+} mostrou-se útil para reduzir o tipo *n* e alcançar uma transição *n-para-p*. No entanto, a dopagem com Ca introduz centros de espalhamento fortes, reduzindo a mobilidade. A otimização das condições de crescimento e a dopagem isovalente de Sb no sítio de Bi são relatadas como úteis para reduzir a densidade de portadores n_{3D} até cerca de 10^{16} cm^{-3} , mantendo alta mobilidade eletrônica, o que permitiu a observação de oscilações de Shubnikov–de Haas (SdH) de superfície, embora a transição de tipo *n* para tipo *p* não tenha sido alcançada por esses métodos. Além disso, cristais de Bi_2Se_3 do tipo *p* com alta mobilidade foram crescidos combinando dopagem com Cd e uma condição de crescimento rica em Se. O *annealing* subsequente desses cristais permitiu compensar os portadores tipo *p* pelos elétrons

provenientes das vacâncias de Se, tornando possível obter amostras tanto do tipo n quanto do tipo p com baixa densidade de portadores no *bulk*, nas quais oscilações SdH de superfície foram observadas. Em contraste com Bi_2Se_3 , o composto Bi_2Te_3 pode ser crescido tanto no tipo n quanto no tipo p . Contudo, é difícil obter amostras de Bi_2Te_3 com baixa densidade de portadores n_{3D} [17].

O composto $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ pode ser muito mais isolante do que Bi_2Se_3 ou Bi_2Te_3 quando crescido em uma condição ligeiramente rica em Se. Isso ocorre porque o $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ cristaliza naturalmente em uma estrutura ordenada composta por camadas quántuplas do tipo Te–Bi–Se–Bi–Te. Essa estrutura peculiar resolve simultaneamente os problemas das vacâncias de Se em Bi_2Se_3 e dos defeitos de antisítio Bi/Te em Bi_2Te_3 . Primeiro, como o Se está confinado na região central da camada quántupla, a formação de vacâncias de Se é muito mais difícil do que em Bi_2Se_3 . Segundo, como a eletronegatividade do Se é maior do que a do Te, o Bi liga-se mais fortemente ao Se do que ao Te, o que desencoraja a ocorrência de defeitos de antisítio Bi/Te. Como resultado, o $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ pode ser considerado razoavelmente isolante no *bulk*. Além disso, sua estrutura ordenada garante alta mobilidade eletrônica e, conseqüentemente, o estado topológico de superfície pode ser facilmente estudado por meio das propriedades de transporte desse material [17].

Questões fundamentais sobre as condições para a viabilidade da fracionalização de carga em isolantes topológicos tridimensionais permanecem, contudo, menos compreendidas e pouco exploradas, especialmente fora do paradigma das fortes correlações eletrônicas. Os modelos efetivos contínuos que descrevem os estados de superfície de isolantes topológicos tridimensionais, descritos anteriormente, apresentam características que os tornam candidatos promissores para a adaptação de conceitos consolidados em dimensões mais baixas. Assim, estes modelos podem oferecer um ponto de partida adequado para investigar condições análogas às que levam à fracionalização em sistemas uni e bidimensionais, permitindo estudar a viabilidade de mecanismos similares no contexto tridimensional. Há, no entanto, diferenças conceituais importantes entre os sistemas de baixa dimensionalidade e os isolantes topológicos tridimensionais que afetam diretamente as abordagens teóricas. Enquanto, em 1D e 2D, a fracionalização emerge de propriedades específicas de modelos de rede, como a formação de sólitons em cadeias dimerizadas ou a distorção de Kekulé em redes de colmeia, os isolantes topológicos tridimensionais são tipicamente descritos por Hamiltonianos de Dirac efetivas que não fazem referência explícita à rede subjacente. Essa distinção exige o desenvolvimento de novas estratégias para incorporar a fracionalização nesse regime, conciliando a descrição contínua com os mecanismos topológicos capazes de gerar modos zero isolados em um *gap* aberto no espectro e cargas fracionárias. Trabalhos como o de Seradjeh, Moore e Franz [33] exemplificam essa abordagem, mostrando que filmes finos de ITs 3D podem hospedar condensados excitônicos topológicos que nucleiam modos zero e carregam carga fracionária associada a um parâmetro de ordem com perfil de vórtice. Tal cenário sugere um amplo potencial para avanços conceituais e contribuições inéditas.

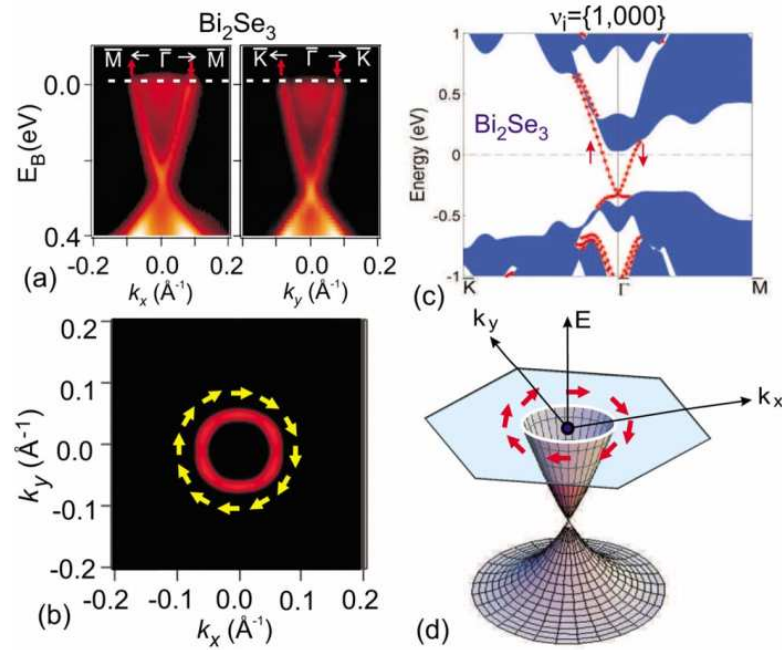


Figura 1.6: Férmons de Dirac de superfície helicoidais com acoplamento spin-momento são características marcantes dos isolantes topológicos. (a) Dados de ARPES para Bi_2Se_3 revelam estados eletrônicos de superfície com um único cone de Dirac polarizado em spin. (b) A superfície de Fermi na superfície exibe uma textura quiral de spin com quiralidade à esquerda. (c) Estrutura eletrônica de superfície de Bi_2Se_3 calculada na aproximação de densidade local. As regiões sombreadas descrevem estados de volume, e as linhas representam estados de superfície. (d) Esquema da dispersão dos estados de superfície polarizados em spin na superfície (1;000) de isolantes topológicos Bi_2X_3 . Fonte: adaptado de [19].

Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo investigar os mecanismos de fracionamento de elétrons em sistemas de matéria condensada, com foco na adaptação de elementos conceituais e formais de modelos teóricos consolidados para sistemas unidimensionais e bidimensionais para descrever possíveis manifestações do fenômeno em isolantes topológicos tridimensionais. Especificamente, busca-se revisar e aprofundar a compreensão sobre os mecanismos de fracionamento de elétrons em sistemas unidimensionais e bidimensionais, incluindo a análise do modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) para o poliacetileno e do modelo de Houchamon-Mudry (HCM) para o grafeno. Pretende-se, por meio deste estudo, identificar as condições necessárias para a formação de modos de energia zero associados a configurações topológicas e para a emergência de estados de muitas partículas com fracionamento de carga. Busca-se, ainda, investigar os estados topológicos da matéria, com foco nos isolantes topológicos tridimensionais, analisando as propriedades fundamentais de seus estados de superfície, como a estrutura eletrônica protegida por simetria de reversão temporal, a dispersão linear típica de férmions de Dirac em baixas energias e outras propriedades que possam suportar condições semelhantes às propostas para a fracionamento em baixa dimensionalidade. Por fim, busca-se

identificar as condições necessárias para a emergência de estados fracionários em isolantes topológicos tridimensionais, e propor um modelo teórico que descreva o fenômeno.

A pesquisa visa responder à questão central: *É possível realizar fracionalização de carga em isolantes topológicos tridimensionais através da introdução de campos que geram configurações topológicas estáveis, e quais são as condições teóricas e experimentais necessárias para tal realização?*

Para abordar esta questão, será adotada uma abordagem teórica baseada em métodos analíticos da física da matéria condensada e da teoria quântica de campos aplicada. A metodologia incluirá a revisão sistemática e aprofundamento da compreensão sobre mecanismos de fracionalização em sistemas de dimensionalidade inferior, bem como de modelos teóricos efetivos propostos na literatura para a descrição de isolantes topológicos tridimensionais, visando o desenvolvimento de um modelo que incorpore campos escalares e, eventualmente, de *gauge*, e a análise das condições de estabilidade e, porventura, detectabilidade experimental dos estados fracionários propostos.

A relevância deste trabalho reside na possibilidade de expandir o conhecimento fundamental sobre a fracionalização de carga em diferentes dimensionalidades, contribuindo para a elucidação das condições necessárias para a emergência e detecção de estados fracionários nos materiais que são objeto deste estudo. Além disso, os resultados podem ter implicações práticas para o desenvolvimento de tecnologias quânticas baseadas em materiais topológicos, incluindo aplicações em computação quântica topológica e spintrônica.

A dissertação está organizada em seis capítulos. Os Capítulos 2, 3 e 4 contêm a fundamentação teórica, revisando conceitos essenciais de física da matéria condensada e de teoria quântica de campos. São discutidos, em particular, modelos efetivos que descrevem o poliacetileno, o grafeno - com ênfase no caso com distorção de Kekulé - e os isolantes topológicos tridimensionais. É apresentada uma revisão abrangente dos mecanismos de fracionalização em sistemas unidimensionais e bidimensionais. O Capítulo 5 apresenta os resultados obtidos para o modelo teórico estudado nesta pesquisa, incluindo a caracterização dos modos zero associados a vórtices e a discussão das implicações físicas em termos de fracionalização de carga. Por fim, no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões, destacando as contribuições do trabalho, suas limitações e indicando perspectivas para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Fracionalização de carga em sistemas unidimensionais

2.1 Fenomenologia do poliacetileno e modelo *tight-binding*

O poliacetileno é um polímero semicondutor com um *gap* de energia da ordem de 1,8 eV. Em temperaturas suficientemente baixas, a condutividade dc ao longo das cadeias de poliacetileno excede em ordens de magnitude a condutividade nas direções transversais às cadeias [1]. Devido a esta grande anisotropia, o transporte eletrônico é denominado quase unidimensional no poliacetileno e, como explicaremos a seguir, pode ser modelado com um Hamiltoniano de *tight-binding* unidimensional na aproximação que negligencia todo o transporte eletrônico nas direções transversas às cadeias do poliacetileno.

2.1.1 Modelo *tight-binding* ao longo de uma cadeia

O método *tight-binding* constitui uma abordagem para estudar a estrutura eletrônica de um material partindo das funções de onda orbitais de átomos isolados e superpondo estes orbitais para construir as funções de onda dos elétrons itinerantes. É útil imaginar a montagem do sólido aproximando átomos isolados progressivamente. Quando os orbitais eletrônicos situados em diferentes átomos começam a se sobrepor, eles se hibridizam e formam as bandas eletrônicas do sólido [1].

Em modelos *tight-binding*, o elemento de matriz para um elétron fazer tunelamento entre dois átomos é conhecido como amplitude de *hopping*. O *hopping* dos elétrons entre os orbitais π de um par de sítios de carbono no poliacetileno origina uma banda orbital π , enquanto as ligações sp^2 mantêm as cadeias unidas. Uma vez que as funções de onda atômicas são exponencialmente localizadas próximas aos átomos, com uma escala de comprimento característico da ordem do raio de Bohr, a sobreposição entre dois orbitais em átomos distantes é exponencialmente pequena. A condutividade dc fortemente anisotrópica no poliacetileno é explicada por apresentar amplitudes de *hopping* intracadeia muito maiores que as amplitudes de *hopping* intercadeia [1].

Enumeramos os átomos de carbono em uma cadeia de N átomos por um índice i . Em uma primeira aproximação, vamos ignorar o *hopping* dos elétrons em orbitais π pertencentes a átomos de carbono situados em diferentes cadeias. Assumimos simplesmente que os elétrons em orbitais π estão restritos a tunelar entre átomos pertencentes à mesma cadeia. Ou seja, o movimento eletrônico no poliacetileno é predominantemente unidimensional (1D). Ainda, o elemento de matriz de *hopping* mais importante é o que conecta dois átomos adjacentes na mesma cadeia [1]. Desta forma, chegamos ao Hamiltoniano 1D:

$$\hat{H} := - \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(t_i \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right). \quad (2.1)$$

A notação H.c. denota conjugação hermitiana de todos os termos precedentes. O índice i rotula um sítio de carbono ao longo da cadeia representada na Figura 2.1. O índice σ designa o número quântico de spin de um elétron ao longo de algum eixo de quantização no espaço de spin. O número $t_i \in \mathbb{C}$, dependente do sítio, constitui a amplitude de tunelamento entre dois sítios consecutivos ao longo de uma cadeia unidimensional. Um circunflexo sobre uma letra latina enfatiza que esta letra descreve um objeto matemático que é um operador, ao invés de ser um mero número \mathbb{C} [1].

Os operadores $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$ e $\hat{c}_{i,\sigma}$ criam e aniquilam, respectivamente, um elétron no orbital que está exponencialmente localizado no espaço de posição em torno de \mathbf{r}_i com o número quântico de spin σ . Pares destes operadores satisfazem as relações de anticomutação fermiônicas:

$$\left\{ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \right\} = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad \left\{ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'} \right\} = \left\{ \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \right\} = 0. \quad (2.2)$$

O Hamiltoniano (2.1) atua sobre o espaço de Fock \mathfrak{F} com a base ortonormal obtida por qualquer aplicação de produtos de operadores de criação ao estado vazio $|0\rangle$ que é aniquilado por todos os $\hat{c}_{i,\sigma}$. Mais precisamente:

$$\mathfrak{F} := \text{span} \left\{ \prod_{i=1}^N \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \right)^{n_{i,\sigma}} |0\rangle, \quad n_{i,\sigma} = 0, 1, \quad \hat{c}_{i,\sigma} |0\rangle = 0 \right\}. \quad (2.3)$$

É frequentemente útil escolher condições de contorno periódicas de modo a identificar o sítio $i = N + 1$ com o sítio $i = 1$:

$$\hat{c}_{i+N,\sigma}^\dagger = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \quad \hat{c}_{i+N,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}. \quad (2.4)$$

Desta forma, a cadeia é transformada em um anel, conforme representado na Figura 2.1.

Muitas propriedades do Hamiltoniano (2.1) dependem sensivelmente da dependência da amplitude de *hopping* t_i com o índice do sítio i . Por exemplo, se o Hamiltoniano (2.1) obedece a condições de contorno periódicas, ele adquire então uma simetria de translação no limite

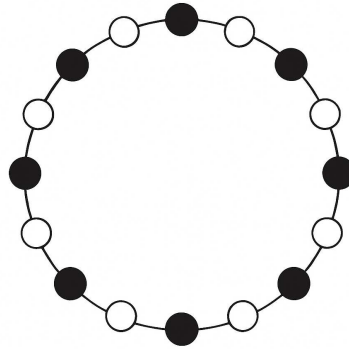


Figura 2.1: Uma rede unidimensional regular Λ com o espaçamento de rede a e a topologia de um anel imposta pelo uso de condições de contorno periódicas. O comprimento do anel é $L = Na$. Fonte: adaptado de [1].

uniforme $t_i = t$ para $i = 1, \dots, N$, isto é, o Hamiltoniano (2.1) torna-se invariante sob a transformação [1]

$$a \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger + b \hat{c}_{i,\sigma} \mapsto a \hat{c}_{i+n,\sigma}^\dagger + b \hat{c}_{i+n,\sigma}, \quad a, b \in \mathbb{C}, \quad (2.5)$$

para qualquer inteiro n (não apenas N , como seria exigido pelas condições de contorno periódicas). Como veremos, um modelo que explica as propriedades espectrais observadas no poliacetileno é aquele em que as amplitudes de *hopping* são alternadas, isto é,

$$t_i = t + (-1)^i \delta t, \quad (2.6)$$

onde o número adimensional positivo $|\delta t|/t$ quantifica o grau de dimerização em relação à largura de banda (o intervalo de energias na banda), enquanto o sinal de $\delta t/t$ seleciona como a simetria de translação no limite uniforme $\delta t = 0$ é quebrada por um espaçamento de rede.

Quando o *hopping* é uniforme, isto é, quando $t_i = t > 0$ para todos os sítios, o Hamiltoniano (2.1) torna-se

$$\hat{H} = -t \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right). \quad (2.7)$$

Impondo as condições de contorno periódicas (2.4), a invariância sob as translações discretas (2.5) é mantida. O Hamiltoniano (2.7) pode ser diagonalizado com o auxílio da transformação de Fourier unitária¹ [1]

$$\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger e^{+iki}, \quad \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*} \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger e^{-iki}, \quad (2.8)$$

¹Estamos usando unidades com $\hbar = a = 1$, onde \hbar é a constante de Planck e a é o espaçamento da rede.

onde, para impor as condições de contorno, deve-se escolher k de um conjunto chamado zona de Brillouin. A zona de Brillouin compatível com as condições de contorno periódicas (2.4) é o conjunto² [1]

$$\Lambda_{\text{BZ}}^* := \left\{ k = \frac{2\pi}{N} n, n = -\left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor + 1, -\left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor + 2, \dots, -\left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor + N \right\}. \quad (2.9)$$

Os operadores $\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger$ e $\hat{c}_{k,\sigma}$ criam e aniquilam um estado eletrônico de partícula única com momento k e número quântico de spin σ , respectivamente. Eles obedecem às relações de anticomutação

$$\{\hat{c}_{k,\sigma}, \hat{c}_{k',\sigma'}^\dagger\} = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad \{\hat{c}_{k,\sigma}, \hat{c}_{k',\sigma'}\} = \{\hat{c}_{k,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{k',\sigma'}^\dagger\} = 0. \quad (2.10)$$

Trabalhar no espaço de momento leva à representação mais econômica

$$\hat{H} = \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \varepsilon_k \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma}, \quad (2.11)$$

onde a relação de dispersão de energia de partícula única ε_k é degenerada devido ao spin. No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, ela é dada por

$$\varepsilon_k = -2t \cos k, \quad |k| \leq \pi. \quad (2.12)$$

A dispersão de energia de partícula única (2.12) do Hamiltoniano de *hopping* uniforme de vizinhos mais próximos em uma dimensão, definida sobre a zona de Brillouin (2.9) no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, possui energias mínimas e máximas de $-2t$ e $+2t$, respectivamente, de modo que a largura de banda é $4t$ [1], como mostrado na Figura 2.2(a).

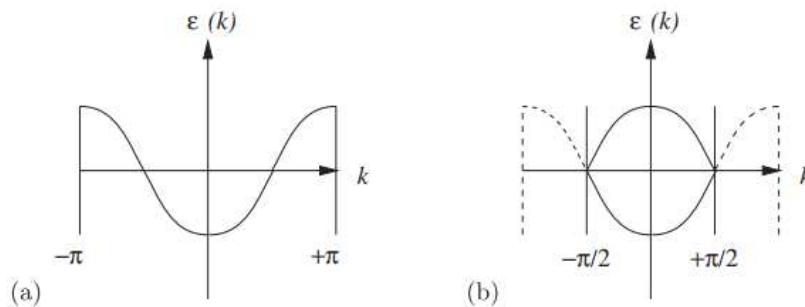


Figura 2.2: (a) A dispersão de energia de partícula única da Eq. (2.12) para o Hamiltoniano com *hopping* uniforme t , definido na Eq. (2.11), ao longo da zona de Brillouin definida na Eq. (2.9), no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. (b) A mesma dispersão, mas dobrada sobre metade da zona de Brillouin, como feito na Eq. (2.24). Fonte: adaptado de [1].

²A função piso $\lfloor x \rfloor$ retorna o maior inteiro menor ou igual a x .

À temperatura zero, o estado fundamental de muitas partículas para $1 \leq N_e \leq 2N$ elétrons é obtido preenchendo os N_e estados de partícula única com as menores energias possíveis. Esses estados preenchidos formam o mar de Fermi [1]:

$$|\Psi_{\text{FS}}\rangle \equiv \prod_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*}^{|k| \leq k_F} \hat{c}_{+k, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-k, \downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (2.13)$$

Então, o estado fundamental do Hamiltoniano (2.11) é obtido preenchendo sucessivamente todos os pares degenerados de Kramers

$$|k, \sigma\rangle = \hat{c}_{k, \sigma}^\dagger |0\rangle, \quad |-k, -\sigma\rangle = \hat{c}_{-k, -\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (2.14)$$

de estados de partícula única, começando do fundo da dispersão de energia de partícula única (2.12) até atingir a energia de Fermi:

$$\varepsilon_F := -2t \cos k_F, \quad k_F := \frac{2\pi}{N} \times n_e, \quad (2.15)$$

onde $n_e > 0$ é um inteiro. A energia do estado fundamental de muitas partículas do mar de Fermi (2.13) é

$$E_{\text{FS}} = 2 \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*}^{|k| \leq k_F} \varepsilon_k. \quad (2.16)$$

É prática comum introduzir a densidade de estados de partícula única por sítio

$$\nu(\varepsilon) := \frac{1}{N} \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*} \delta(\varepsilon - \varepsilon_k). \quad (2.17)$$

No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ ou mediante uma regularização da delta de Dirac (por exemplo, por uma Gaussiana ou uma Lorentziana), é possível tornar $\nu(\varepsilon)$ uma função suave de ε . Em termos de $\nu(\varepsilon)$, a energia do estado fundamental de muitas partículas, E_{FS} , torna-se [1]

$$E_{\text{FS}} = 2N \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \nu(\varepsilon) \varepsilon. \quad (2.18)$$

O mar de Fermi (2.13) descreve dois estados distintos de matéria dependendo do valor assumido pela fração de preenchimento

$$\nu_e := \frac{N_e}{2N}. \quad (2.19)$$

Quando $\nu_e = 0$ ou $\nu_e = 1$, o mar de Fermi não preenche nenhum estado ou preenche completamente todos os estados de partícula única, respectivamente. A ação de remover um elétron com momento k e spin σ e criar um elétron com momento $k' \neq k$ ou spin $\sigma' \neq \sigma$ aniquila

este mar de Fermi. Consequentemente, este mar de Fermi não acopla a nenhuma perturbação que interaja com os elétrons por meio dos operadores $\hat{c}_{k',\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k,\sigma}$ [1], de modo que este mar de Fermi é um estado fundamental isolante e magneticamente inerte, não susceptível de suportar excitações de carga ou spin em temperatura zero.

Quando $0 < \nu_e < 1$, o mar de Fermi não preenche todos os estados de partícula única da zona de Brillouin. Assim, a ação de remover um elétron com momento k e spin σ e criar um elétron com momento $k' \neq k$ ou spin $\sigma' \neq \sigma$ não necessariamente aniquila este mar de Fermi, que é, portanto, um estado fundamental metálico, pois é susceptível a excitações de carga ou spin em temperatura zero quando perturbado por fótons, múons ou nêutrons, por exemplo [1].

O modelo (2.1) prediz um estado fundamental metálico para qualquer preenchimento parcial da banda representada na Figura 2.2(a). Isso não é consistente com o fato de que o poliacetileno é um semicondutor, isto é, é um isolante a temperatura zero, com um gap de energia da ordem de 1.8 eV, menor que a largura da banda π da ordem de 12 eV. No entanto, veremos que é possível modificar o Hamiltoniano (2.1) pela introdução de uma segunda escala de energia além da largura da banda π de $4t \sim 12$ eV, que abre um gap de energia de partícula única $2\Delta \sim 1.8$ eV dentro da banda representada na Figura 2.2(a) [1].

2.1.2 Dobramento espectral

Antes de identificarmos aquelas perturbações do Hamiltoniano (2.11) que abrem um gap de energia de partícula única e quais são compatíveis com o gap de energia medido no poliacetileno, observamos primeiro que a dispersão (2.12) possui a seguinte simetria de espelho:

$$\varepsilon_k = -\varepsilon_{k \pm \pi}. \quad (2.20)$$

Introduzindo os espinores de criação e aniquilação de dois componentes para cada momento k e para cada número quântico de spin σ :

$$\hat{\chi}_{k,\sigma}^\dagger := \begin{pmatrix} \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger \\ \hat{c}_{k-\pi,\sigma}^\dagger \end{pmatrix}^\top, \quad \hat{\chi}_{k,\sigma} := \begin{pmatrix} \hat{c}_{k,\sigma} \\ \hat{c}_{k-\pi,\sigma} \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

pode-se reescrever o Hamiltoniano (2.11) como [1]

$$\hat{H} = \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}^{|k| \leq \pi/2} \hat{\chi}_{k,\sigma}^\dagger \mathcal{H}_k \hat{\chi}_{k,\sigma}, \quad (2.22)$$

com a matriz hermitiana de partícula única 2×2 resolvida em momento

$$\mathcal{H}_k = \varepsilon_k \tau_3. \quad (2.23)$$

Aqui, restringimos a zona de Brillouin pela condição $|k| \leq \pi/2$, enquanto introduzimos a matriz

de Pauli 2×2 τ_3 ³.

Existem duas bandas com energias opostas, pois τ_3 tem autovalores ± 1 . As energias dessas duas bandas, rotuladas por \pm , no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), são

$$\varepsilon_{k,\pm} = \pm|\varepsilon_k|, \quad |k| \leq \pi/2. \quad (2.24)$$

Para a zona de Brillouin reduzida pela metade, $|k| \leq \pi/2$, para cada autoestado de energia de partícula única com energia $+\varepsilon$, existe um autoestado espelhado com energia $-\varepsilon$. Esta simetria espectral é consequência do fato de que a transformação quiral [1],

$$\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \mapsto \hat{c}_{i,\sigma}'^\dagger = (-1)^i \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \quad \hat{c}_{i,\sigma} \mapsto \hat{c}_{i,\sigma}' = (-1)^i \hat{c}_{i,\sigma}, \quad (2.25)$$

ou, no espaço de momento,

$$\hat{c}_{k+\pi,\sigma}'^\dagger = \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger, \quad \hat{c}_{k+\pi,\sigma}' = \hat{c}_{k,\sigma}, \quad (2.26)$$

e que pode ser representada na base (2.21) por

$$\hat{\chi}_{k,\sigma} \mapsto \tau_1 \hat{\chi}_{k,\sigma}, \quad (2.27)$$

obedece à relação de anticomutação

$$\mathcal{H}_k \mapsto \tau_1 \mathcal{H}_k \tau_1 = -\mathcal{H}_k. \quad (2.28)$$

Agora vamos relacionar explicitamente a simetria espectral (2.28) à existência de duas sub-redes interpenetrantes na cadeia linear e conectá-la à transformação quiral (2.25). A cadeia unidimensional

$$\Lambda := \{\mathbf{r}_i = i\mathbf{e}_1, \quad i = 1, \dots, N\} \quad (2.29)$$

com N par pode ser dividida igualmente em sub-redes A e B definidas por

$$\Lambda^A := \{\mathbf{r}_i = i\mathbf{e}_1, \quad i = 1, 3, \dots, N-1\}, \quad (2.30)$$

e

$$\Lambda^B := \{\mathbf{r}_i = i\mathbf{e}_1, \quad i = 2, 4, \dots, N\}. \quad (2.31)$$

³Esta matriz é independente do momento k e do spin σ . No caso presente, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ age apenas sobre os graus de liberdade de spin, e $\tau = \pm$ age sobre os índices de banda \pm que surgem do dobramento espectral em metade da zona de Brillouin. As três matrizes de Pauli podem ser representadas como:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Definimos a zona de Brillouin associada à sub-rede Λ^A por [1]

$$\Lambda_{\text{BZ}}^{A*} := \left\{ k = \frac{2\pi}{N}n, \quad n = -\left\lfloor \frac{N}{4} \right\rfloor + 1, \dots, -\left\lfloor \frac{N}{4} \right\rfloor + \frac{N}{2} \right\}. \quad (2.32)$$

Qualquer $k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}$ corresponde a um $k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*$ no intervalo $|k| \leq \pi/2$. Em outras palavras, Λ_{BZ}^{A*} é a zona de Brillouin reduzida à metade mostrada na Fig. 2.2(b).

Se introduzirmos a notação

$$\hat{a}_{j,\sigma} := \hat{c}_{2j-1,\sigma}, \quad \hat{b}_{j,\sigma} := \hat{c}_{2j,\sigma}, \quad (2.33)$$

para $j = 1, \dots, N/2$ e aproveitarmos as condições de contorno periódicas, podemos escrever

$$\hat{H} = -t \sum_{j=1}^{N/2} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[\hat{a}_{j,\sigma}^\dagger (\hat{b}_{j,\sigma} + \hat{b}_{j-1,\sigma}) + \hat{b}_{j,\sigma}^\dagger (\hat{a}_{j+1,\sigma} + \hat{a}_{j,\sigma}) \right]. \quad (2.34)$$

Para diagonalizar esse Hamiltoniano, introduzimos as transformadas de Fourier unitárias [1]

$$\hat{a}_{j,\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}} e^{+ik2j} \hat{a}_{k,\sigma}, \quad \hat{a}_{k,\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{j=1}^{N/2} e^{-ik2j} \hat{a}_{j,\sigma}, \quad (2.35)$$

e

$$\hat{b}_{j,\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}} e^{+ik2j} \hat{b}_{k,\sigma}, \quad \hat{b}_{k,\sigma} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{j=1}^{N/2} e^{-ik2j} \hat{b}_{j,\sigma}. \quad (2.36)$$

Agora, o Hamiltoniano (2.34) pode ser levado para a representação

$$\hat{H} = \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{\psi}_{k,\sigma}^\dagger \widetilde{\mathcal{H}}_k \hat{\psi}_{k,\sigma}, \quad (2.37)$$

onde a estrutura de sub-rede pode ser codificada em dois graus de liberdade com o auxílio dos espinores de dois componentes [1]

$$\hat{\psi}_{k,\sigma}^\dagger := \left(\hat{a}_{k,\sigma}^\dagger, \hat{b}_{k,\sigma}^\dagger \right), \quad \hat{\psi}_{k,\sigma} := \begin{pmatrix} \hat{a}_{k,\sigma} \\ \hat{b}_{k,\sigma} \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

A matriz hermitiana de partícula única 2×2 resolvida em momento é

$$\widetilde{\mathcal{H}}_k = -t [1 + \cos(2k)] \tau_1 - t \sin(2k) \tau_2. \quad (2.39)$$

Os autovalores do Hamiltoniano de partícula única (2.39) são

$$\varepsilon_{k,\pm} = \pm 2t \cos k, \quad k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}. \quad (2.40)$$

Novamente, para cada autoestado de partícula única com energia $+\varepsilon$, existe um autoestado espelhado com energia $-\varepsilon$. Esta simetria espectral é consequência do fato de que a transformação quiral (2.25), que na base (2.38) é representada por

$$\hat{\psi}_{k,\sigma} \mapsto (-\tau_3)\hat{\psi}_{k,\sigma}, \quad (2.41)$$

obedece à relação de anticomutação

$$\widetilde{\mathcal{H}}_k \mapsto (-\tau_3)\widetilde{\mathcal{H}}_k(-\tau_3) = -\widetilde{\mathcal{H}}_k. \quad (2.42)$$

2.1.3 Um modelo para o poliacetileno

Agora veremos como é possível abrir um *gap* de energia de partícula única na dispersão (2.24) ao mesmo tempo em que se reduz a simetria de translação discreta (2.5) de modo que

$$a \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger + b \hat{c}_{i,\sigma} \mapsto a \hat{c}_{i\pm 2n,\sigma}^\dagger + b \hat{c}_{i\pm 2n,\sigma}, \quad a, b \in \mathbb{C}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (2.43)$$

para qualquer $i \in \Lambda$. Observe que a simetria sob translação por dois espaçamentos de rede de Λ é a mesma que a simetria sob translação por um espaçamento de rede de Λ^A , ou seja, ela gera a simetria

$$\begin{aligned} c \hat{a}_{j,\sigma}^\dagger + d \hat{a}_{j,\sigma} &\mapsto c \hat{a}_{j\pm n,\sigma}^\dagger + d \hat{a}_{j\pm n,\sigma}, \\ c \hat{b}_{j,\sigma}^\dagger + d \hat{b}_{j,\sigma} &\mapsto c \hat{b}_{j\pm n,\sigma}^\dagger + d \hat{b}_{j\pm n,\sigma}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

para quaisquer $c, d \in \mathbb{C}$, $n \in \mathbb{Z}$, e $j = 1, \dots, N/2$.

No modelo mais simples para o transporte eletrônico no poliacetileno, considera-se uma cadeia unidimensional e introduz-se uma segunda escala de energia característica, a amplitude de *hopping* alternado entre vizinhos mais próximos $\delta t \in \mathbb{R}$, além da amplitude de *hopping* uniforme entre vizinhos mais próximos $t > 0$. Isso fornece o Hamiltoniano efetivo eletrônico e não interagente de *tight-binding* [1]

$$\begin{aligned} \widehat{H}_{\text{polya}} &:= - \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{\psi}_{k,\sigma}^\dagger ([t_1 + t_2 \cos(2k)] \tau_1 + t_2 \sin(2k) \tau_2) \hat{\psi}_{k,\sigma} \\ &= - \sum_{j=1}^{N/2} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left\{ \hat{a}_{j,\sigma}^\dagger [(t - \delta t) \hat{b}_{j,\sigma} + (t + \delta t) \hat{b}_{j-1,\sigma}] + \text{H.c.} \right\}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde

$$t_1 := t - \delta t, \quad t_2 := t + \delta t. \quad (2.46)$$

Os componentes dos espinores obedecem à álgebra fermiônica

$$\{\hat{\psi}_{k,\sigma,\alpha}, \hat{\psi}_{k',\sigma',\alpha'}^\dagger\} = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\alpha,\alpha'}, \quad \{\hat{\psi}_{k,\sigma,\alpha}, \hat{\psi}_{k',\sigma',\alpha'}\} = \{\hat{\psi}_{k',\sigma',\alpha'}^\dagger, \hat{\psi}_{k,\sigma,\alpha}^\dagger\} = 0, \quad (2.47)$$

para $k, k' \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}$, $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$, e $\alpha, \alpha' = A, B$. Nesta base, a transformação quiral é diagonal e representada pela Eq. (2.41).

Um autoestado de energia de partícula única $|k, +, \sigma\rangle$ [1] de $\widehat{H}_{\text{polya}}$ com a autoenergia positiva duplamente degenerada

$$\varepsilon_{k,+} := +2\sqrt{t^2 \cos^2 k + (\delta t)^2 \sin^2 k}, \quad (2.48)$$

pode sempre ser pareado com um autoestado de energia $|k, -, \sigma\rangle$ de $\widehat{H}_{\text{polya}}$ com a autoenergia negativa duplamente degenerada

$$\varepsilon_{k,-} := -2\sqrt{t^2 \cos^2 k + (\delta t)^2 \sin^2 k}, \quad (2.49)$$

por meio da transformação quiral (2.41).

O máximo da banda inferior ($\varepsilon_{k,-}$) e o mínimo da banda superior ($\varepsilon_{k,+}$) estão separados por um *gap* de partícula única,

$$2\Delta := \begin{cases} \min_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}} \varepsilon_{k,+} - \max_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}} \varepsilon_{k,-} = 4|\delta t|, & \text{se } |\delta t|/t < 1, \\ \min_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}} \varepsilon_{k,+} - \max_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^{A*}} \varepsilon_{k,-} = 4t, & \text{se } |\delta t|/t \geq 1. \end{cases} \quad (2.50)$$

Esse *gap* é mostrado na Figura 2.3(a). As dispersões para diferentes razões de $|\delta t|/t$ são mostradas nas Figuras 2.3(b)–2.3(d). O *gap* (2.50) é um *gap* direto, isto é, o máximo da banda inferior e o mínimo da banda superior ocorrem ou no momento $k = \pi/2 \pmod{\pi}$ quando $|\delta t| < t$, ou no momento $k = 0 \pmod{\pi}$ quando $|\delta t| > t$. Quando $|\delta t| = t$, as bandas inferior e superior são planas, isto é, independentes do momento k , e a cadeia se decompõe em dímeros independentes. Para o poliacetileno, a fenomenologia dita que $4t \sim 12$ eV, $\delta t \sim 0,5$ eV, e $\varepsilon_F = 0$.

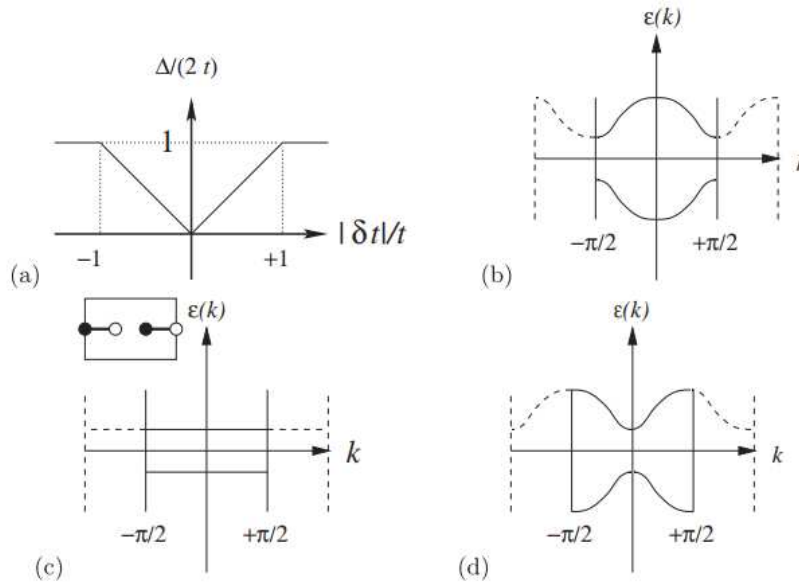


Figura 2.3: (a) *Gap* da Eq. (2.50) como função de $\delta t/t$. (b) Dispersão da cadeia dimerizada quando $|\delta t| \ll t$. (c) Dispersão da cadeia dimerizada quando $|\delta t| = t$, caso em que a cadeia se decompõe em $N/2$ dímeros disjuntos. (d) Dispersão da cadeia dimerizada quando $|\delta t| \gg t$. Fonte: adaptado de [1].

2.2 O Modelo Su-Schrieffer-Heeger

Introduzimos agora o modelo de rede unidimensional mais simples possível que acopla os elétrons da banda π do poliacetileno às moléculas de acetileno que entram em sua fórmula química. Este modelo é denominado modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) [1, 12].

Primeiramente, consideramos deformações elásticas da cadeia de poliacetileno ilustrada na Figura 1.2. Negligenciamos a torção da cadeia, isto é, assumimos deformações tais que os orbitais sp^2 permanecem em um plano, com o orbital π perpendicular a este plano. Nestas condições, a sobreposição dos orbitais π vizinhos depende apenas da distância entre os átomos de carbono adjacentes. O i -ésimo átomo de carbono, dentre N , está localizado na posição $r_i = R_i + u_i \in \mathbb{R}$, onde $R_i = ia$ é a posição de equilíbrio do átomo e u_i é o seu deslocamento em relação a essa posição. O outro grau de liberdade do átomo de carbono de massa M é seu momento linear $p_i \in \mathbb{R}$ ao longo da direção unidimensional da cadeia [1].

Em segundo lugar, associamos à cadeia do poliacetileno o Hamiltoniano quântico \hat{H}_{phonons} para uma cadeia harmônica linear, pelo qual \hat{H}_{phonons} é definido por [1, 12]:

$$\hat{H}_{\text{phonons}} := \sum_{i=1}^N \left[\frac{\hat{p}_i^2}{2M} + \frac{\kappa}{2} (\hat{u}_i - \hat{u}_{i+1})^2 \right] \quad (2.51)$$

com as relações de comutação canônicas de tempo igual:

$$[\hat{u}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j} \quad (2.52)$$

para qualquer par $i, j = 1, \dots, N$ e com as condições de contorno periódicas de tempo igual:

$$\hat{u}_i = \hat{u}_{i+N}, \quad \hat{p}_i = \hat{p}_{i+N}. \quad (2.53)$$

A constante adimensional $\kappa > 0$ constitui a constante elástica ou de mola. Ela origina-se implicitamente dos elétrons da ligação σ .

Os modos normais de $\widehat{H}_{\text{phonons}}$ são denominados fônons. Eles são dados por [1]:

$$\hat{u}_i(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N \sqrt{\frac{\hbar}{2M\varpi_l}} \left[\hat{a}_l e^{+i(q_l \cdot i - \varpi_l t)} + \hat{a}_l^\dagger e^{-i(q_l \cdot i - \varpi_l t)} \right], \quad (2.54)$$

$$\hat{p}_i(t) = \frac{-i}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N \sqrt{\frac{\hbar M \varpi_l}{2}} \left[\hat{a}_l e^{+i(q_l \cdot i - \varpi_l t)} - \hat{a}_l^\dagger e^{-i(q_l \cdot i - \varpi_l t)} \right], \quad (2.55)$$

para $i = 1, \dots, N$. A relação de dispersão é dada por:

$$\varpi_l := \sqrt{\frac{2\kappa}{M}(1 - \cos q_l)}, \quad q_l := \frac{2\pi l}{N}, \quad (2.56)$$

especificadas certas condições iniciais pelos N pares de operadores \hat{a}_l^\dagger e \hat{a}_l . Estes operadores obedecem à álgebra bosônica:

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_{l'}^\dagger] = \delta_{l,l'}, \quad [\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_{l'}^\dagger] = [\hat{a}_l, \hat{a}_{l'}] = 0, \quad (2.57)$$

para $l, l' = 1, \dots, N$, e geram o espaço de Fock bosônico:

$$\mathfrak{F}_{\text{phonons}} := \text{span} \left\{ \prod_{l=1}^N \frac{(\hat{a}_l^\dagger)^{n_l}}{\sqrt{n_l!}} |0\rangle, \quad n_l = 0, 1, \dots, \quad \hat{a}_l |0\rangle = 0 \right\}. \quad (2.58)$$

Estes fônons são sem *gap* com a dispersão linear $\varpi_l = \sqrt{\kappa/M} q_l + \mathcal{O}(q_l^2)$, isto é, $\sqrt{\kappa/M}$ desempenha o papel de uma velocidade característica.

Em terceiro lugar, os únicos elétrons que iremos manter explicitamente são os elétrons π . Postula-se que sua dinâmica quântica, no limite em que estão desacoplados das moléculas das

quais se originam, é governada pelo Hamiltoniano [1]

$$\widehat{H}_{\text{electrons}} := -t \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\widehat{c}_{i,\sigma}^\dagger \widehat{c}_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right) - \mu \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \widehat{c}_{i,\sigma}^\dagger \widehat{c}_{i,\sigma}. \quad (2.59)$$

Os operadores de criação e aniquilação para os elétrons obedecem à álgebra (2.2) e às condições de contorno periódicas (2.4). Eles geram o espaço de Fock (2.3), que renomeamos como $\mathfrak{F}_{\text{electrons}}$. Aqui, também introduzimos o potencial químico de valor real μ .

Em quarto lugar, o modelo SSH postula uma interação entre os fônons e os elétrons π que é governada pelo Hamiltoniano:

$$\widehat{H}_{\text{e-p}} := -\alpha \sum_{i=1}^N (\widehat{u}_i - \widehat{u}_{i+1}) \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\widehat{c}_{i,\sigma}^\dagger \widehat{c}_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right) \quad (2.60)$$

com o acoplamento elétron-fônon α carregando a dimensão de energia por unidade de comprimento. Este Hamiltoniano atua sobre o produto tensorial:

$$\mathfrak{F}_{\text{SSH}} := \mathfrak{F}_{\text{phonons}} \otimes \mathfrak{F}_{\text{electrons}}. \quad (2.61)$$

Ao todo, chegamos ao Hamiltoniano SSH:

$$\widehat{H}_{\text{SSH}} := \widehat{H}_{\text{phonons}} + \widehat{H}_{\text{electrons}} + \widehat{H}_{\text{e-p}} \quad (2.62)$$

atuando sobre o espaço de Fock $\mathfrak{F}_{\text{SSH}}$. A função de partição é definida por [1]:

$$Z_{\text{SSH}} := \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathfrak{F}_{\text{SSH}}} \left(e^{-\beta \widehat{H}_{\text{SSH}}} \right), \quad \beta = \frac{1}{k_{\text{B}}T}. \quad (2.63)$$

Aqui, o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ é tomado mantendo-se a fração de preenchimento por spin

$$\nu_e := \frac{1}{2N\beta} \frac{\partial Z_{\text{SSH}}}{\partial \mu} \quad (2.64)$$

fixada em qualquer número entre 0 e 1. As Eqs. (2.62), (2.63) e (2.64) definem o modelo SSH em equilíbrio termodinâmico na temperatura inversa $\beta = 1/(k_{\text{B}}T)$.

A solução do modelo SSH (2.62) no limite $\alpha = 0$, para o qual os fônons se desacoplam dos elétrons, já foi apresentada na Subseção 2.1.3. O modelo SSH não é exatamente solúvel (integrável) quando $\alpha \neq 0$ e M é finito. Contudo, a integrabilidade para qualquer acoplamento elétron-fônon não nulo $\alpha \neq 0$ pode ser recuperada se assumirmos que o estado fundamental de muitas partículas para os fônons não apresenta flutuações quânticas, isto é, no limite clássico $M \rightarrow \infty$ para os fônons. Nessa aproximação, os fônons são tratados, então, como um fundo clássico para os elétrons. Esse limite foi resolvido em forma fechada, dentro de uma aproximação de ponto de sela, tanto por SSH na rede quanto por Takayama, Lin-Liu e Maki [34] no limite

contínuo.

O limite clássico para os fônons pode ser obtido comparando-se o movimento de ponto zero dos íons ao espaçamento de rede, o que produz a condição [1]:

$$c\sqrt{\frac{\hbar}{M\kappa}} < a^2 \quad (2.65)$$

com c uma constante numérica. Esta condição é trivialmente satisfeita no limite em que $\hbar \rightarrow 0$. É também satisfeita no limite de massas de acetileno pesadas, $M \rightarrow \infty$. No último caso, podemos substituir os operadores \hat{u}_i por qualquer autovalor real u_i . Ao fazê-lo, seleciona-se o subespaço:

$$\mathfrak{F}_{\text{SSH}}^{\text{sc}} \subset \mathfrak{F}_{\text{SSH}} \quad (2.66)$$

que é isomórfico a $\mathfrak{F}_{\text{electrons}}$. Este limite nos permite substituir o Hamiltoniano de fônons (2.51) pelo Hamiltoniano clássico:

$$H_{\text{phonons}} := \sum_{i=1}^N \left[\frac{\kappa}{2} (u_i - u_{i+1})^2 \right]. \quad (2.67)$$

Podemos também substituir o Hamiltoniano elétron-fônon (2.60) pelo Hamiltoniano semiclássico:

$$\hat{H}_{\text{e-p}}^{\text{sc}} = - \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \alpha(u_i - u_{i+1}) \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right). \quad (2.68)$$

O Hamiltoniano $\hat{H}_{\text{e-p}}^{\text{sc}}$ não é mais que o Hamiltoniano (2.1) com a identificação $t_i \rightarrow \alpha(u_i - u_{i+1})$. Assim, o limite semiclássico (2.65) do modelo SSH (2.62) é:

$$\hat{H}_{\text{SSH}}^{\text{sc}} := H_{\text{phonons}} + \hat{H}_{\text{electrons}} + \hat{H}_{\text{e-p}}^{\text{sc}} \quad (2.69)$$

com a função de partição:

$$Z_{\text{SSH}}^{\text{sc}} := \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathfrak{F}_{\text{SSH}}^{\text{sc}}} \left(e^{-\beta \hat{H}_{\text{SSH}}^{\text{sc}}} \right), \quad \beta = \frac{1}{k_{\text{B}}T}. \quad (2.70)$$

onde o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ deve ser tomado mantendo-se a fração de preenchimento por spin (2.64) fixada em qualquer número entre 0 e 1.

Embora o Hamiltoniano combinado

$$\hat{H}_{\text{electrons}} + \hat{H}_{\text{e-p}}^{\text{sc}} = - \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left\{ [t + \alpha(u_i - u_{i+1})] \times \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \right) + \mu \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right\} \quad (2.71)$$

seja consideravelmente mais simples que $\widehat{H}_{\text{electrons}} + \widehat{H}_{\text{e-p}}$, ele também não pode ser resolvido em forma fechada para escolhas arbitrárias de u_1, \dots, u_N . Contudo, a escolha alternada (recordando a Eq. (2.46)):

$$u_i - u_{i+1} = (-1)^i u \Leftrightarrow t_i := t + (-1)^i \delta t, \quad \delta t := \alpha u, \quad (2.72)$$

com u qualquer número real, fornece a solução fechada obtida para o modelo na Eq. (2.45)).

2.3 Limite contínuo e teoria de campos efetiva

Agora, desejamos passar do modelo de rede discreta para uma descrição contínua de baixa energia e longo comprimento de onda. Para isso, definimos o limite de escala da cadeia Λ no qual o número de sítios

$$N \rightarrow \infty \quad (2.73)$$

e o espaçamento de rede

$$a \rightarrow 0, \quad (2.74)$$

sob as duas condições de que o comprimento

$$L = Na \quad (2.75)$$

e a fração de preenchimento

$$0 < \nu_e < 1 \quad (2.76)$$

definida na Eq. (2.19) são mantidos fixos. No limite de escala, o corte de momento ultravioleta

$$\frac{\Lambda_{UV}}{2} := \frac{\pi}{2a} \quad (2.77)$$

fixado pela zona de Brillouin Λ_{BZ}^{A*} diverge.

No limite de escala, fazemos as identificações [1]

$$\left\{ j = 1, \dots, \frac{N}{2}, \quad \Delta j = 1 \right\} \Rightarrow \left\{ -\frac{L}{2} \leq x \leq +\frac{L}{2}, \quad \frac{dx}{2a} = 1 \right\}, \quad (2.78)$$

e

$$\left\{ k = \frac{2\pi}{N}, \dots, \pi, \quad \Delta k = \frac{2\pi}{N} \right\} \Rightarrow \left\{ -\frac{\pi}{2a} \leq p \leq +\frac{\pi}{2a}, \quad \frac{dp}{2\pi/L} = 1 \right\}. \quad (2.79)$$

Isto sugere absorver o fator multiplicativo $(2\pi/L)^{-1}$ pela reescalonagem

$$\hat{\psi}_{k,\sigma} \rightarrow \sqrt{2\pi/L} \hat{\psi}_\sigma(p) \iff \hat{\psi}_\sigma(p) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi/L}} \hat{\psi}_{k,\sigma}, \quad (2.80)$$

quando relacionamos operadores de rede a operadores de campo para o elétron.

Se exigirmos que $\mathcal{H}(p)$ iguale \mathcal{H}_k em

$$\hat{H} := \sum_{k \in \Lambda_{\text{BZ}}^*} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{\psi}_{k,\sigma}^\dagger \mathcal{H}_k \hat{\psi}_{k,\sigma} \quad (2.81)$$

sempre que $ap = k$ para $[-\pi/2, +\pi/2[$, pode-se inferir a identificação [1]

$$\hat{H} \longrightarrow \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_{-\Lambda_{\text{UV}}/2}^{+\Lambda_{\text{UV}}/2} dp \hat{\psi}_\sigma^\dagger(p) \mathcal{H}(p) \hat{\psi}_\sigma(p), \quad (2.82)$$

no limite de escala. Os operadores de campo obedecem à álgebra

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{\psi}_{\sigma,\alpha}(p), \hat{\psi}_{\sigma',\alpha'}^\dagger(p') \right\} &= \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\alpha,\alpha'} \delta(p - p'), \\ \left\{ \hat{\psi}_{\sigma,\alpha}(p), \hat{\psi}_{\sigma',\alpha'}(p') \right\} &= \left\{ \hat{\psi}_{\sigma',\alpha'}^\dagger(p'), \hat{\psi}_{\sigma,\alpha}^\dagger(p) \right\} = 0. \end{aligned} \quad (2.83)$$

Além disso, dado que a fração de preenchimento é mantida fixa no limite de escala, o módulo do momento de Fermi adimensional

$$k_F \equiv a |p_{F,\pm}| \quad (2.84)$$

definido na Eq. (2.15) também é fixo neste limite. O índice \pm distingue os dois pontos de Fermi

$$p_{F,\pm} := \pm k_F / a \quad (2.85)$$

sob a suposição de que cada ramo das dispersões de partícula única

$$\varepsilon_{k,\pm} \rightarrow \varepsilon_\pm(p) \quad (2.86)$$

é uma função estritamente monótona do centro da zona $p = 0$ até cada um dos limites da zona $p = \pm\pi/(2a)$, além de ser periódica sobre a zona de Brillouin $[-\pi/(2a), +\pi/(2a)[$ [1]. Esta suposição é verificada para as dispersões (2.48) e (2.49) usadas para modelar o transporte eletrônico em poliacetileno se, e somente se, $|\delta t| \neq t$.

Quando $\nu_e = 1/2$, o momento de Fermi está localizado ou em $p_F = 0$ ou em $p_F = -\pi/(2a)$, os únicos pontos da zona de Brillouin que são invariantes sob a inversão $k \rightarrow -k$ até o momento recíproco π . Portanto, há apenas um ponto de Fermi p_F com a energia de Fermi ε_F em meia ocupação [1]. Denotamos por $U_{F,\Omega}$ o intervalo de tamanho $\Omega \ll \Lambda_{\text{UV}}$ centrado nesse ponto de Fermi. Introduzimos também as notações abreviadas:

$$\hat{\psi}_{F,\sigma}^\dagger(p) := \hat{\psi}_\sigma^\dagger(p_F + p), \quad \hat{\psi}_{F,\sigma}(p) := \hat{\psi}_\sigma(p_F + p), \quad (2.87)$$

com a convenção para a transformada de Fourier dada por

$$\hat{\psi}_{F,\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\Omega/2}^{+\Omega/2} dp e^{+ipx} \hat{\psi}_{F,\sigma}(p) = e^{-ip_F x} \hat{\psi}_{\sigma}(x). \quad (2.88)$$

e, da mesma forma, definimos

$$\hat{\chi}_{F,\sigma}^{\dagger}(p) := \hat{\chi}_{\sigma}^{\dagger}(p_F + p), \quad \hat{\chi}_{F,\sigma}(p) := \hat{\chi}_{\sigma}(p_F + p), \quad (2.89)$$

com a convenção para a transformada de Fourier dada por

$$\hat{\chi}_{F,\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\Omega/2}^{+\Omega/2} dp e^{+ipx} \hat{\chi}_{F,\sigma}(p) = e^{-ip_F x} \hat{\chi}_{\sigma}(x). \quad (2.90)$$

O setor de baixa energia e longo comprimento de onda do Hamiltoniano (2.81) é então capturado, para os espinores no espaço orbital e de Bloch, respectivamente, com o Hamiltoniano efetivo

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{eff}} &:= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_{-\Omega/2}^{+\Omega/2} dp \hat{\psi}_{F,\sigma}^{\dagger}(p) \mathcal{H}(p_F + p) \hat{\psi}_{F,\sigma}(p) \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{a=\pm} \int_{-\Omega/2}^{+\Omega/2} dp \hat{\chi}_{F,\sigma,a}^{\dagger}(p) \varepsilon_a(p_F + p) \hat{\chi}_{F,\sigma,a}(p), \end{aligned} \quad (2.91)$$

onde se entende que ou a matriz Hermitiana 2×2 de partícula única $\mathcal{H}(p_F + p)$ ou os autovalores de energia $\varepsilon_a(p_F + p)$ devem ser expandidos em potências de p até a primeira ordem não nula além da ordem zero [1].

No caso do modelo (2.45) do poliacetileno em meio-preenchimento, expandindo o Hamiltoniano de partícula única

$$\mathcal{H}(p) := - [t_1 + t_2 \cos((p_F + p) 2a)] \tau_1 - t_2 \sin((p_F + p) 2a) \tau_2, \quad (2.92)$$

onde

$$t_1 := t - \delta t, \quad t_2 := t + \delta t, \quad |\delta t| < t, \quad (2.93)$$

e

$$p_F := \frac{\pi}{2a}. \quad (2.94)$$

em potências de p até a ordem dominante, seu setor de baixa energia e longo comprimento de onda é capturado pelo Hamiltoniano efetivo [1]:

$$\hat{H}^{\text{eff}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_{-\Omega/2}^{+\Omega/2} dp \hat{\psi}_{F,\sigma}^{\dagger}(p) \left(v_F p \tau_2 + m_F v_F^2 \tau_1 \right) \hat{\psi}_{F,\sigma}(p) \quad (2.95)$$

na base orbital do espaço de Fock, ou equivalentemente:

$$\widehat{H}^{\text{eff}} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \int_{-\Omega/2}^{+\Omega/2} dp \hat{\chi}_{F,\sigma}^\dagger(p) [(v_F p)^2 + m_F^2 v_F^4]^{1/2} \tau_3 \hat{\chi}_{F,\sigma}(p) \quad (2.96)$$

na base de Bloch do espaço de Fock. A velocidade de Fermi é dada por [1]:

$$v_F := 2at, \quad (2.97)$$

e a “energia de repouso relativística” é:

$$m_F v_F^2 := 2\delta t. \quad (2.98)$$

2.4 O Trabalho pioneiro de Jackiw e Rebbi

2.4.1 Fundamentos teóricos

O trabalho seminal de Jackiw e Rebbi em 1976 [3] estabeleceu as bases teóricas para a compreensão da fracionalização do número fermiônico em teorias de campo relativísticas. Seus resultados demonstraram que campos bosônicos podem induzir estados com carga fracionária $1/2$, constituindo uma descoberta fundamental que transcendeu a física de altas energias e encontrou aplicações diretas em sistemas de matéria condensada.

Vamos considerar um conjunto de Hamiltonianos de Dirac definidos na reta real, começando com o caso invariante por translação, representado por um Hamiltoniano de referência dado por [1, 3]:

$$\mathcal{H}_\infty := -i\tau_2 \frac{d}{dx} + \tau_1 \phi_\infty, \quad (2.99)$$

onde $\phi_\infty > 0$ constitui um parâmetro com dimensão de comprimento inverso, e τ_1, τ_2 são matrizes de Pauli. O Hamiltoniano conjugado por carga é:

$$\tau_2 \mathcal{H}_\infty \tau_2 := -i\tau_2 \frac{d}{dx} - \tau_1 \phi_\infty. \quad (2.100)$$

Para investigar a fracionalização, Jackiw e Rebbi estudaram configurações com defeitos topológicos através dos Hamiltonianos:

$$\mathcal{H}_s := -i\tau_2 \frac{d}{dx} + \tau_1 \phi_s(x) \quad (2.101)$$

e

$$\mathcal{H}_{\bar{s}} := -i\tau_2 \frac{d}{dx} - \tau_1 \phi_s(x) = \tau_2 \mathcal{H}_s \tau_2, \quad (2.102)$$

onde o perfil do sóliton é dado por:

$$\phi_s(x) := \phi_\infty \tanh[\phi_\infty(x - x_s)]. \quad (2.103)$$

Para o sistema uniforme, as soluções de partícula única do problema de autovalores:

$$\mathcal{H}_\infty \psi_{\infty,\pm}(p, x) = \varepsilon_{\infty,\pm}(p) \psi_{\infty,\pm}(p, x) \quad (2.104)$$

possuem energias:

$$\varepsilon_{\infty,\pm}(p) := \pm \sqrt{p^2 + \phi_\infty^2} \equiv \pm \varepsilon_\infty(p). \quad (2.105)$$

Estas soluções podem ser normalizadas de forma que satisfaçam [1, 3, 35, 36]:

$$\int dp \psi_{\infty,\sigma}^\dagger(p, x) \psi_{\infty,\sigma'}(p, x') = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(x - x'), \quad (2.106)$$

$$\int dx \psi_{\infty,\sigma}^\dagger(p, x) \psi_{\infty,\sigma'}(p', x) = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(p - p'). \quad (2.107)$$

A transição para uma teoria de muitas partículas é realizada através da definição do Hamiltoniano e dos campos fermiônicos de segunda quantização [1, 3, 35, 36]:

$$\hat{H}_\infty := \int dx \hat{\Psi}_\infty^\dagger(t, x) \mathcal{H}_\infty \hat{\Psi}_\infty(t, x), \quad (2.108)$$

$$\hat{\Psi}_\infty^\dagger(t, x) := \sum_{\sigma=\pm} \int dp e^{+i\varepsilon_{\infty,\sigma}(p)t} \psi_{\infty,\sigma}^\dagger(p, x) \hat{c}_\sigma^\dagger(p), \quad (2.109)$$

$$\hat{\Psi}_\infty(t, x) := \sum_{\sigma=\pm} \int dp e^{-i\varepsilon_{\infty,\sigma}(p)t} \psi_{\infty,\sigma}(p, x) \hat{c}_\sigma(p), \quad (2.110)$$

onde os operadores de criação e aniquilação obedecem à álgebra fermiônica, sendo

$$\{\hat{c}_\sigma(p), \hat{c}_{\sigma'}^\dagger(p')\} = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(p - p'). \quad (2.111)$$

os únicos anticomutadores não-nulos. O campo de Dirac e o seu adjunto satisfazem relações de anticomutação de tempos iguais onde

$$\{\hat{\Psi}_{\infty,\alpha}(t, x), \hat{\Psi}_{\infty,\alpha'}^\dagger(t, x')\} = \delta_{\alpha,\alpha'} \delta(x - x') \quad (2.112)$$

são os únicos anticomutadores em tempos iguais não-nulos para qualquer par de índices de spinor $\alpha, \alpha' = 1, 2$ e para qualquer par x e x' na reta real.

O Hamiltoniano de muitas partículas também pode ser escrito em termos destes operadores como:

$$\hat{H}_\infty := \int dp \varepsilon_\infty(p) [\hat{c}_+^\dagger(p) \hat{c}_+(p) - \hat{c}_-^\dagger(p) \hat{c}_-(p)]. \quad (2.113)$$

O estado fundamental do sistema, quando a energia de Fermi está dentro do *gap* do espectro de partícula única, corresponde ao estado obtido preenchendo todos os estados de partícula única de energia negativa:

$$|\text{vac}\rangle := \prod_p \hat{c}_-(p) |0\rangle, \quad (2.114)$$

onde $|0\rangle$ é aniquilado por todos os $\hat{c}_\sigma(p)$ [1, 3, 35].

Como vimos anteriormente, a teoria de Dirac possui uma carga total conservada (??), cujo operador correspondente na teoria quantizada é [1, 35]

$$\hat{Q} := \int dx \hat{\Psi}_\infty^\dagger(t, x) \hat{\Psi}_\infty(t, x). \quad (2.115)$$

O operador de carga total \hat{Q} comuta com o Hamiltoniano de Dirac \hat{H} :

$$[\hat{Q}, \hat{H}] = 0. \quad (2.116)$$

Assim, os autoestados do Hamiltoniano \hat{H} possuem uma carga bem definida.

É conveniente realizar uma transformação que preserva a álgebra fermiônica canônica (2.111), ao mesmo tempo garantindo que o estado fundamental seja aniquilado por todos os operadores de aniquilação. A transformação conveniente que atende a esses critérios é dada definindo os operadores de criação e aniquilação de férmions $\hat{c}(p)$, $\hat{c}^\dagger(p)$ e $\hat{d}(p)$, $\hat{d}^\dagger(p)$ como [35]

$$\begin{aligned} \hat{c}(p) &= \hat{c}_+(p), \\ \hat{d}(p) &= \hat{c}_-(p), \end{aligned} \quad (2.117)$$

de modo que

$$\hat{c}(p) |\text{vac}\rangle = \hat{d}(p) |\text{vac}\rangle = 0. \quad (2.118)$$

Esta redefinição corresponde a uma transformação partícula-buraco para os estados de energia negativa. Esta transformação produz as representações [1, 35]:

$$\hat{H}_\infty = + \int dp \varepsilon_\infty(p) [\hat{c}^\dagger(p) \hat{c}(p) - \hat{d}(p) \hat{d}^\dagger(p)], \quad (2.119)$$

$$\hat{P} = \int dp p [\hat{c}^\dagger(p) \hat{c}(p) - \hat{d}(p) \hat{d}^\dagger(p)], \quad (2.120)$$

$$\hat{Q} = \int dp [\hat{c}^\dagger(p) \hat{c}(p) + \hat{d}(p) \hat{d}^\dagger(p)]. \quad (2.121)$$

É desejável trazer todos os operadores de aniquilação para a direita dos operadores de criação para evitar ambiguidades de ordenamento. Isso pode vir ao custo de números complexos \mathbb{C} , possivelmente infinitos, que provocam mudanças de energia rígidas nos espectros de muitas partículas, ao se realizar essa operação em formas bilineares de operadores de criação e aniquilação [1]. Para eliminar termos infinitos indesejados, aplica-se o ordenamento normal,

denotado por $: \cdots :$, que posiciona todos os operadores de criação à esquerda dos operadores de aniquilação. Este procedimento equivale a tratar os operadores como números de Grassmann durante o reordenamento. Para os operadores normal-ordenados em relação ao vácuo, obtém-se:

$$\begin{aligned} : \widehat{H}_\infty : &= + \int dp \varepsilon_\infty(p) [\hat{c}^\dagger(p) \hat{c}(p) + \hat{d}^\dagger(p) \hat{d}(p)] \\ &= \widehat{H}_\infty + \delta(q=0) \int dp \varepsilon_\infty(p), \end{aligned} \quad (2.122)$$

$$\begin{aligned} : \widehat{P} : &= \int dp p [\hat{c}^\dagger(p) \hat{c}(p) + \hat{d}^\dagger(p) \hat{d}(p)] \\ &= \widehat{P} + \delta(q=0) \int dp p, \end{aligned} \quad (2.123)$$

$$\begin{aligned} : \widehat{Q} : &= + \int dp [\hat{c}^\dagger(p) \hat{c}(p) - \hat{d}^\dagger(p) \hat{d}(p)] \\ &= \widehat{Q} - \delta(q=0) \int dp 1. \end{aligned} \quad (2.124)$$

Os operadores com ordenamento normal exibem propriedades de simetria notáveis sob conjugação de carga ($\hat{c} \leftrightarrow \hat{d}$):

- O Hamiltoniano (2.122) e o momento (2.123) são pares;
- A carga (2.124) é ímpar.

Esta última propriedade alinha-se com a intuição física: a conjugação de carga troca partículas por antipartículas, invertendo o sinal da carga.

A carga com ordenamento normal (2.124) admite uma representação integral no espaço de posição [1, 35]:

$$\begin{aligned} : \widehat{Q} : &\equiv \frac{1}{2} \int dp \{ [\hat{c}^\dagger(p), \hat{c}(p)] - [\hat{d}^\dagger(p), \hat{d}(p)] \} \\ &= \frac{1}{2} \int dx \sum_{\alpha=1,2} \left[\widehat{\Psi}_{\infty,\alpha}^\dagger(t,x), \widehat{\Psi}_{\infty,\alpha}(t,x) \right]. \end{aligned} \quad (2.125)$$

Aplicando o ordenamento normal, verifica-se que o estado fundamental $|\text{vac}\rangle$ satisfaz:

$$: \widehat{H}_\infty : |\text{vac}\rangle = : \widehat{P} : |\text{vac}\rangle = : \widehat{Q} : |\text{vac}\rangle = 0, \quad (2.126)$$

confirmando que este estado possui energia, momento e carga nulos quando definidos com ordenamento apropriado.

2.4.2 Quantização do campo de Dirac em *background* solitônico

Para construir a teoria quântica de campos para o Hamiltoniano de partícula única (2.101), consideramos todos os autoestados de \mathcal{H}_s que sejam normalizáveis na reta real ou que tenham

assíntotas de ondas planas quando $x \rightarrow \pm\infty$. Estes incluem os autoestados $\psi_{s,\pm}(x)$ de \mathcal{H}_s com autovalores não nulos $\varepsilon_{s,\pm}$, caracterizados por:

$$\mathcal{H}_s \psi_{s,\pm}(x) = \varepsilon_{s,\pm} \psi_{s,\pm}(x), \quad (2.127)$$

onde

$$\varepsilon_{s,\pm} = \pm|\varepsilon_s|, \quad (2.128)$$

e

$$\psi_{s,\pm}(x) := \begin{pmatrix} u_{s,\pm}(x) \\ v_{s,\pm}(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2. \quad (2.129)$$

Além disso, a autofunção $\psi_{s,0}(x)$ de \mathcal{H}_s é um modo zero não degenerado de \mathcal{H}_s se [1, 3]

$$\mathcal{H}_s \psi_{s,0}(x) = 0. \quad (2.130)$$

Apesar da quebra da simetria de translação pelo perfil de sóliton $\phi_s(x)$ (2.103), o sistema exibe invariância sob a composição de inversão espacial e conjugação [1]:

$$(x - x_s) \mapsto -(x - x_s), \quad (2.131)$$

$$\mathcal{H}_s \mapsto \tau_3 \mathcal{H}_s \tau_3. \quad (2.132)$$

Esta simetria implica as seguintes relações:

$$\begin{cases} \psi_{s,-}(x) = \tau_3 \psi_{s,+}^*(x), & \text{se } |\varepsilon_{s,\pm}| = |\varepsilon_s| > 0, \\ \tau_3 \psi_{s,0}(x) = \pm \psi_{s,0}(x), & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.133)$$

Assim, o espectro de \mathcal{H}_s contém um contínuo de energias $\varepsilon_{s,\pm}(p) = \pm\sqrt{p^2 + \phi_\infty^2} \equiv \pm\varepsilon_\infty(p)$, e contém um modo zero não-degenerado com autofunção:

$$\psi_{s,0}(x) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} u_{s,0}(x) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_{s,0}(x) = \exp\left(-\int_{x_s}^x dx' \phi_s(x')\right), \quad (2.134)$$

onde \mathcal{N} é uma constante de normalização [1, 3].

Os operadores de campo fermiônicos de segunda quantização admitem expansões em modos normais usando a base de estados de partícula única, após o uso da transformação definida pela

Eq. (2.117), dadas por [1, 3]

$$\widehat{\Psi}_s^\dagger(t, x) = \psi_{s,0}^\dagger(x) \widehat{b}^\dagger + \int dp \left[e^{+i\varepsilon_\infty(p)t} \psi_{s,+}^\dagger(p, x) \widehat{c}^\dagger(p) + e^{-i\varepsilon_\infty(p)t} \psi_{s,+}^\dagger(p, x) \tau_3 \widehat{d}(p) \right], \quad (2.135)$$

$$\widehat{\Psi}_s(t, x) = \psi_{s,0}(x) \widehat{b} + \int dp \left[e^{-i\varepsilon_\infty(p)t} \psi_{s,+}(p, x) \widehat{c}(p) + e^{+i\varepsilon_\infty(p)t} \tau_3 \psi_{s,+}(p, x) \widehat{d}^\dagger(p) \right], \quad (2.136)$$

onde impomos a álgebra fermiônica com os únicos anticomutadores não nulos:

$$\{\widehat{c}(p), \widehat{c}^\dagger(p')\} = \{\widehat{d}(p), \widehat{d}^\dagger(p')\} = \delta(p - p'), \quad (2.137)$$

para os modos contínuos, e

$$\{\widehat{b}, \widehat{b}^\dagger\} = 1. \quad (2.138)$$

para o modo zero.

Definindo o Hamiltoniano e o operador de carga total de muitas partículas como

$$\widehat{H}_s := \int dx \widehat{\Psi}_s^\dagger(t, x) \mathcal{H}_s \widehat{\Psi}_s(t, x), \quad (2.139)$$

$$\widehat{Q} := \int dx \widehat{\Psi}_s^\dagger(t, x) \widehat{\Psi}_s(t, x), \quad (2.140)$$

o ordenamento normal produz [1]:

$$\begin{aligned} : \widehat{H}_s : &:= + \int dp \varepsilon_\infty(p) [\widehat{c}^\dagger(p) \widehat{c}(p) + \widehat{d}^\dagger(p) \widehat{d}(p)] \\ &= \widehat{H}_s + \delta(q=0) \int dp \varepsilon_\infty(p), \end{aligned} \quad (2.141)$$

e

$$\begin{aligned} : \widehat{Q} : &:= \widehat{b}^\dagger \widehat{b} + \int dp [\widehat{c}^\dagger(p) \widehat{c}(p) - \widehat{d}^\dagger(p) \widehat{d}(p)] \\ &= \widehat{Q} - \delta(q=0) \int dp 1. \end{aligned} \quad (2.142)$$

É possível verificar que o Hamiltoniano com ordenação normal, $: \widehat{H}_s :$, comuta com o operador de carga normal ordenado, $: \widehat{Q} :$. Além disso, os estados fundamentais de muitas partículas de $: \widehat{H}_s :$ são duplamente degenerados quando o potencial químico está exatamente na energia de partícula única zero, ou seja, os estados de muitas partículas

$$|s, -\rangle := |\text{vac}\rangle, \quad (2.143)$$

$$|s, +\rangle := \widehat{b}^\dagger |\text{vac}\rangle, \quad (2.144)$$

onde $|\text{vac}\rangle$ foi definido na Eq. (2.114), satisfazem

$$: \hat{H}_s : |s, \pm\rangle = 0. \quad (2.145)$$

O operador $: \hat{Q} :$ distingue os estados fundamentais dependendo do preenchimento do modo zero: tem autovalor 0 se o potencial químico está ligeiramente abaixo da energia de partícula única zero, e autovalor 1 se está ligeiramente acima.

Sob a transformação de conjugação de carga, implementada por

$$\hat{c} \leftrightarrow \hat{d}, \quad (2.146)$$

e pela troca dos operadores do modo zero,

$$\hat{b}^\dagger \mapsto \hat{b}, \quad \hat{b} \mapsto \hat{b}^\dagger, \quad (2.147)$$

os operadores transformam-se como

$$: \hat{H}_s : \mapsto : \hat{H}_s :, \quad : \hat{Q} : \mapsto - : \hat{Q} : + 1. \quad (2.148)$$

Este resultado evidencia que a ordenação normal, por si só, não é suficiente para definir um operador de carga de muitas partículas que seja estritamente ímpar sob conjugação de carga na presença de um sólito. Isso motiva a definição alternativa do operador de carga [1, 3],

$$\hat{Q}_s := \int dx \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1,2} \left[\hat{\Psi}_{s,\alpha}^\dagger(x), \hat{\Psi}_{s,\alpha}(x) \right] = : \hat{Q} : - \frac{1}{2}, \quad (2.149)$$

que possui a propriedade desejada de ser ímpar sob a representação anterior de conjugação de carga. Com esta definição do operador de carga, Jackiw e Rebbi encontraram que

$$\hat{Q}_s |s, \pm\rangle = \pm \frac{1}{2} |s, \pm\rangle. \quad (2.150)$$

Este resultado demonstra que o estado fundamental de muitas partículas no setor do sólito é duplamente degenerado, com cada estado portando número fermiônico fracionário $\pm 1/2$. Consequentemente, todos os estados obtidos pela adição de excitações de partícula única a qualquer um dos estados fundamentais degenerados $|s, -\rangle$ ou $|s, +\rangle$ possuem números fermiônicos semi-inteiros, estabelecendo a fracionalização como uma propriedade robusta do setor topológico[1, 3].

2.5 Fracionalização no poliacetileno

Continuamos a considerar o limite semiclássico (2.65) do Hamiltoniano SSH (Eq. (2.69), no qual podemos tratar os fônons como um fundo clássico para os elétrons. No entanto, em vez de assumir o fundo (2.72), que quebra a simetria de translação do Hamiltoniano SSH em um espaçamento de rede, assumimos a existência de um perfil na dependência de u_i na posição i da molécula de acetileno que interpola entre as duas configurações de ligação mostradas na Fig. 1.2 [1, 5, 12]. Tal perfil pode ser associado a um defeito pontual no qual duas ligações fortes (ou fracas) se encontram. Para uma cadeia fechada (com a topologia de um anel e um número par de sítios), apenas um número par de defeitos é compatível com condições de contorno periódicas, como ilustrado na Figura 2.4(a).

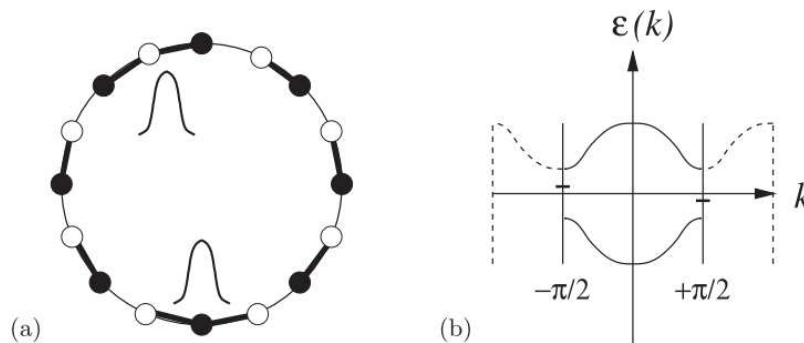


Figura 2.4: (a) Estados ligados localizados nos defeitos pontuais do padrão de dimerização. (b) Espectro eletrônico de partícula única na presença de um par sóliton/anti-sóliton suficientemente afastados. Fonte: adaptado de [1].

Uma das consequências mais notáveis dos modos zero ligados a sólitons ou anti-sólitons no poliacetileno reside no fato de que eles podem ser associados a uma carga fracionária. A seguir apresentamos um argumento de contagem que fundamenta a noção de fracionalização da carga eletrônica [1, 5, 12]. Este argumento, baseado na mecânica quântica, conduz à conclusão de que a carga ligada a um sóliton corresponde a $1/2$ da carga eletrônica.

Seja $|i\rangle$ o estado de partícula única com o elétron (sem spin) localizado no sítio $i = 1, \dots, N$ da cadeia. Estes estados de partícula única formam uma base ortonormal completa:

$$1 = \sum_{i=1}^N |i\rangle\langle i|, \quad \langle i'|i\rangle = \delta_{i,i'}, \quad i, i' = 1, \dots, N. \quad (2.151)$$

Seja também $|\epsilon_\ell\rangle$ um autoestado de energia de partícula única para algum Hamiltoniano definido sobre o espaço de Hilbert gerado pela base de rede da Eq. (2.151), isto é, um autoestado de

partícula única da base ortonormal $\{|\varepsilon_\ell\rangle, \ell = 1, \dots, N\}$ que satisfaz a relação de completude:

$$1 = \sum_{\ell=1}^N |\varepsilon_\ell\rangle\langle\varepsilon_\ell|, \quad \langle\varepsilon_{\ell'}|\varepsilon_\ell\rangle = \delta_{\ell,\ell'}, \quad \ell, \ell' = 1, \dots, N. \quad (2.152)$$

Daqui em diante, omitiremos a referência explícita ao índice contável ℓ dos autoestados de energia de partícula única. Para um dado sítio i , podemos combinar as Eqs. (2.151) e (2.152) para encontrar a seguinte identidade local [1]:

$$\begin{aligned} 1 &= \langle i|i\rangle \\ &= \sum_{\varepsilon} \langle i|\varepsilon\rangle\langle\varepsilon|i\rangle \\ &\equiv \sum_{\varepsilon} |\psi_{i,\varepsilon}|^2 \\ &= \sum_{\varepsilon} \nu_{i,\varepsilon}. \end{aligned} \quad (2.153)$$

Aqui,

$$\nu_{i,\varepsilon} := |\psi_{i,\varepsilon}|^2 = |\langle i|\varepsilon\rangle|^2 \quad (2.154)$$

representa a densidade de estados adimensional no sítio i e na energia (discreta) ε . A identidade local da Eq. (2.153) constitui uma regra de soma aplicável a qualquer Hamiltoniano de rede de partícula única.

Seja $\nu_{i,\varepsilon}^\infty$ a densidade de estados resolvida em posição e energia no sítio i e energia ε para elétrons sem spin que experimentam *hopping* de primeiros vizinhos ao longo de uma cadeia feita de N sítios com dimerização pristina. Denotemos por $\nu_{i,\varepsilon}^{s\bar{s}}$ a correspondente densidade de estados para elétrons sem spin ao longo de uma cadeia feita de N sítios com um defeito de dimerização suportando um sóliton centrado em torno de i_s , e um anti-sóliton centrado em torno de $i_{\bar{s}}$. A regra de soma da Eq. (2.153) implica a identidade local [1, 5, 12]:

$$\sum_{\varepsilon} \nu_{i,\varepsilon}^{s\bar{s}} = \sum_{\varepsilon} \nu_{i,\varepsilon}^\infty \quad (2.155)$$

para qualquer sítio $i = 1, \dots, N$.

Assumimos que a separação

$$r_{s\bar{s}} := |r_s - r_{\bar{s}}| \quad (2.156)$$

entre os centros do sóliton e do anti-sóliton é muito maior que o comprimento característico [1]

$$\xi := 1/\Delta \quad (2.157)$$

(em unidades para as quais \hbar e a velocidade característica são ambos unitários),

$$r_{s\bar{s}} \gg \xi, \quad (2.158)$$

onde Δ constitui a escala de energia característica para a dimerização. A densidade de estados $\nu_{i,\varepsilon}^\infty$ é controlada exclusivamente pelo quase-contínuo de estados de Bloch nas bandas de valência e condução⁴. No limite $N \gg 1$, a densidade de estados $\nu_{i,\varepsilon}^{s\bar{s}}$ consiste (por suposição) tanto de um quase-contínuo de estados de Bloch nas bandas de valência e condução quanto de dois estados no centro do *gap* (modos de energia quase zero) ψ_{i,ε_-} e ψ_{i,ε_+} com energias

$$\varepsilon_- = -\varepsilon_+ < 0, \quad \text{com } \psi_{i,\varepsilon_-} = (-1)^i \psi_{i,\varepsilon_+}, \quad (2.159)$$

em que a simetria espectral se deve à transformação quiral, e onde (por suposição da Eq. (2.158)) [1]:

$$|\varepsilon_- - \varepsilon_+| \approx \Delta e^{-r_{s\bar{s}}/\xi}. \quad (2.160)$$

Podemos agora reescrever a regra de soma local (2.155) como:

$$\sum_{\varepsilon < \varepsilon_-} \nu_{i,\varepsilon}^{s\bar{s}} + |\psi_{i,\varepsilon_-}|^2 + |\psi_{i,\varepsilon_+}|^2 + \sum_{\varepsilon > \varepsilon_+} \nu_{i,\varepsilon}^{s\bar{s}} = \sum_{\varepsilon < 0} \nu_{i,\varepsilon}^\infty + \sum_{\varepsilon > 0} \nu_{i,\varepsilon}^\infty. \quad (2.161)$$

A simetria quiral implica que a densidade de estados resolvida em posição e energia é uma função par da energia. Portanto, a regra de soma local da Eq. (2.161) torna-se:

$$2 \sum_{\varepsilon < \varepsilon_-} \nu_{i,\varepsilon}^{s\bar{s}} + |\psi_{i,\varepsilon_-}|^2 + |\psi_{i,\varepsilon_+}|^2 = 2 \sum_{\varepsilon < 0} \nu_{i,\varepsilon}^\infty. \quad (2.162)$$

Escolhemos que o potencial químico esteja acima do último estado da banda de valência quase contínua e abaixo de ε_- . Ambas as densidades de estados integradas em energia mas resolvidas em posição

$$\nu_i^{s\bar{s}} := \sum_{\varepsilon < \varepsilon_-} \nu_{i,\varepsilon}^{s\bar{s}} \quad (2.163)$$

e

$$\nu_i^\infty := \sum_{\varepsilon < 0} \nu_{i,\varepsilon}^\infty = \sum_{\varepsilon < \varepsilon_-} \nu_{i,\varepsilon}^\infty \quad (2.164)$$

constituem quantidades potencialmente divergentes no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ para espectros ilimitados como os espectros de Dirac. Contudo, sua diferença:

$$\delta \nu_i^{s\bar{s}-\infty} := \nu_i^{s\bar{s}} - \nu_i^\infty \quad (2.165)$$

⁴A terminologia de espectro quase-contínuo considera o fato de que a dimensionalidade N do espaço de Hilbert de partícula única é finita devido ao tamanho finito da cadeia, isto é, antes de tomar o limite termodinâmico $N \gg 1$. Consequentemente, o espectro de autovalores de energia é discreto. A propriedade definidora do espectro quase-contínuo é que o espaçamento entre quaisquer duas energias consecutivas pertencentes ao quase contínuo decresce com o aumento de N .

permanece finita no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, assim como a representação regularizada:

$$\delta v_i^{s\bar{s}-\infty} = -\frac{1}{2} \left(|\psi_{i,\varepsilon_-}|^2 + |\psi_{i,\varepsilon_+}|^2 \right) \quad (2.166)$$

da regra de soma local da Eq. (2.162). A subtração de infinitos constitui prática comum na teoria quântica de campos. A representação teórica local da regra de soma (2.166) é análoga ao procedimento de fazer um ordenamento normal com respeito ao mar de elétrons [1].

Os modos de energia (quase) zero ψ_{i,ε_-} e ψ_{i,ε_+} constituem, em muito boa aproximação quando $r_{s\bar{s}} \gg \xi$, as combinações lineares de ligação e antiligação do modo zero ψ_i^s obtido para uma cadeia aberta suportando um único sóliton e o modo zero $\psi_i^{\bar{s}}$ obtido para uma cadeia aberta suportando um único anti-sóliton [1],

$$\psi_{i,\varepsilon_{\mp}} \approx \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_i^s \pm \psi_i^{\bar{s}}). \quad (2.167)$$

Com o auxílio da Eq. (2.167), a regra de soma local (2.166) torna-se:

$$\delta v_i^{s\bar{s}-\infty} \approx -\frac{1}{2} |\psi_i^s|^2 - \frac{1}{2} |\psi_i^{\bar{s}}|^2. \quad (2.168)$$

Esta aproximação é exata no limite $r_{s\bar{s}}/\xi \rightarrow \infty$.

Definimos, então, a carga integrada em espaço e energia $Q^{s\bar{s}-\infty}$ ligada ao par sóliton/anti-sóliton como [1]:

$$Q^{s\bar{s}-\infty} := \sum_i \delta v_i^{s\bar{s}-\infty}, \quad (2.169)$$

a qual é medida relativamente a uma carga de referência, a carga do mar de elétrons de muitas partículas preenchido até meio preenchimento com dimerização pristina. A carga da Eq. (2.169) é dada por:

$$Q^{s\bar{s}-\infty} = -1, \quad (2.170)$$

se normalizarmos os modos zero de tal forma que:

$$\sum_i |\psi_i^s|^2 = \sum_i |\psi_i^{\bar{s}}|^2 = 1. \quad (2.171)$$

Então a Eq. (2.170) nos informa que temos um déficit de exatamente um elétron. Uma vez que escolhemos o nível de Fermi logo abaixo do valor ε_- , estamos a um estado do meio preenchimento, e portanto temos um elétron sem spin a menos de ter a mesma carga do sistema com topologia trivial. Assim, a diferença entre a carga para as duas configurações topologicamente diferentes é de -1 . Mas, até aqui, tudo é padrão. Onde estão as cargas fracionárias?

As cargas fracionárias ficam localizadas nas proximidades do sóliton e do anti-sóliton. Calculando a carga total do sistema, não conseguimos vê-las. Precisamos focar nossa atenção

em uma região que envolva ou o sóliton ou o anti-sólon, mas não ambos na mesma perspectiva. Assim, definimos a soma ponderada sobre as densidades de carga [1]

$$Q_f^{s\bar{s}-\infty} = \sum_i f_i \delta v_i^{s\bar{s}-\infty} \approx -\frac{1}{2} \sum_i f_i |\psi_i^s|^2 - \frac{1}{2} \sum_i f_i |\psi_i^{\bar{s}}|^2, \quad (2.172)$$

onde $f_i : \{1, \dots, N\} \rightarrow [0, 1]$, $i \mapsto f_i$ constitui qualquer função teste assumindo valores positivos. A escolha f para a função teste define nosso campo de visão. Se queremos sondar a carga ligada ao sóliton centrado em i_s , escolhemos uma função teste f^s que assume o valor $f_i^s = 1$ para i em uma vizinhança de tamanho não menor que ξ centrada em torno de i_s , enquanto se anula em outras regiões, digamos $f_i^s = 0$ para i em uma vizinhança de tamanho da ordem de ξ centrada em torno de $i_{\bar{s}}$, como representado na Figura 2.5. Inversamente, se queremos sondar a carga ligada ao anti-sólon centrado em $i_{\bar{s}}$ escolhemos uma função teste $f^{\bar{s}}$ análoga. Assumimos, então, uma hierarquia [1]:

$$r_{s\bar{s}} \gg \sup f^s = \sup f^{\bar{s}} \gg \sup \psi^s = \sup \psi^{\bar{s}} \approx \xi \gg \sup \partial_x \phi^s = \sup \partial_x \phi^{\bar{s}} \quad (2.173)$$

entre as escalas de comprimento $r_{s\bar{s}}$ (a separação entre um anti-sólon e um sóliton), o tamanho da região do suporte da função teste $\sup f^s = \sup f^{\bar{s}}$, o tamanho do suporte dos estados ligados $\sup \psi^s = \sup \psi^{\bar{s}}$ e o tamanho do suporte do sóliton (anti-sólon) $\sup \partial_x \phi^s = \sup \partial_x \phi^{\bar{s}}$, sendo que a última desigualdade proíbe a proliferação de estados no centro do *gap* além daqueles oriundos do teorema do índice.

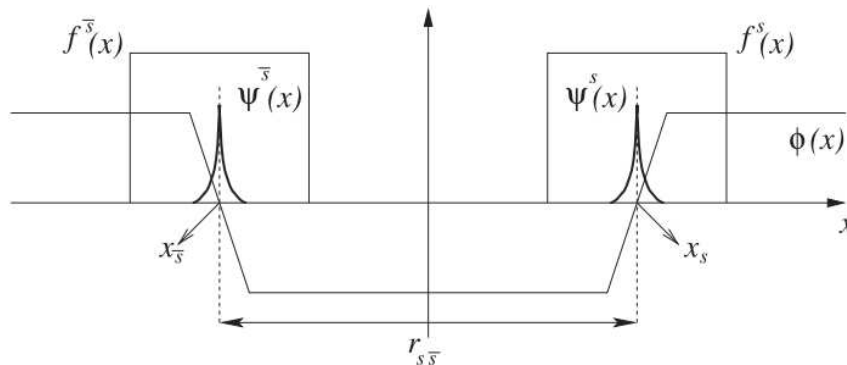


Figura 2.5: Escalas de comprimento características das funções teste $f^{\bar{s}}(x)$ e $f^s(x)$ localizadas em torno das posições $x_{\bar{s}}$ e x_s , usadas para sondar as cargas fracionárias associadas aos modos zero $\psi^{\bar{s}}(x)$ e $\psi^s(x)$ ligados a um par sóliton/anti-sólon separado por uma distância $r_{s\bar{s}}$. Fonte: adaptado de [1].

Com as duas funções teste, $f^s(x)$ e $f^{\bar{s}}(x)$, encontramos:

$$Q_{f^s} \approx -\frac{1}{2} \quad (2.174)$$

e

$$Q_{f\bar{s}} \approx -\frac{1}{2}, \quad (2.175)$$

respectivamente. Estas aproximações se tornam exatas no limite $r_{s\bar{s}}/\xi \rightarrow \infty$. Concluimos que existe um déficit de partícula de $1/2$ de um elétron em uma vizinhança não muito grande nem muito pequena de um defeito topológico, relativamente à fase dimerizada pristina do poliacetileno preenchido até meio preenchimento. Claramente, em um sistema fechado, não se pode ter um déficit global de uma fração de uma partícula, mas este déficit pode aparecer localmente.

Como vimos, o método utilizado em [12] para calcular a carga fracionária envolve computar os valores esperados de dois estados fundamentais de muitas partículas e então subtrair o de um estado de referência livre de defeitos de outro com um defeito pontual. Na linguagem da teoria quântica de campos, este método constitui uma renormalização. No limite termodinâmico, o qual é exigido para que a separação exponencialmente pequena entre os estados ligados induzidos pelo par sólton-antisólton seja estritamente nula, a subtração é do tipo $\infty - \infty$. Subtrair um ∞ de outro não leva necessariamente a uma resposta única. A ordem dos limites tomados para alcançar estas quantidades infinitas importa. É, portanto, desejável utilizar uma derivação alternativa da carga fracionária que forneça uma compreensão complementar da ordem dos limites invocados (implicitamente) para alcançar o resultado $1/2$ [1].

Os métodos da teoria quântica de campos, com o auxílio dos quais Jackiw e Rebbi [3] obtiveram primeiro a carga fracionária $1/2$, são esclarecedores nesse aspecto, pois eles implementam de forma única a renormalização da carga sob a simetria de conjugação de carga do Hamiltoniano. Além disso, a carga fracionária $1/2$ não é um mero valor esperado em seu cálculo. É o autovalor preciso do operador de carga de muitas partículas expandido na base de partícula única do Hamiltoniano de Dirac com um e apenas um sólton como *background* [1].

Recordando a discussão a respeito do poliacetileno nas Seções 2.1, 2.2, e 2.3, vimos que os elétrons no poliacetileno possuem dois graus de liberdade de spin- $\frac{1}{2}$. No entanto, estamos ignorando o spin- $\frac{1}{2}$ do elétron ao discutir as paredes de domínio no poliacetileno, substituindo elétrons com spin por férmions sem spin, como os estudados por Jackiw e Rebbi. Isso pode ser feito, sem perda de generalidade, quando a simetria de rotação de spin se mantém no limite não interagente. Considerar o spin- $\frac{1}{2}$ do elétron, entretanto, deve ser relevante ao considerar os efeitos das interações fermiônicas de muitas partículas [1].

2.5.1 Modos de energia zero no limite contínuo

O Hamiltoniano de Dirac 2×2 mais geral em espaço unidimensional que é compatível com simetria de translação assume a forma [1]:

$$\mathcal{H}(p) := \alpha p + \beta m + i\beta\gamma_5 m_s \equiv \tau_2 p + \tau_1 \phi_\infty + \tau_3 \mu_s, \quad (2.176)$$

onde escolhemos a representação bidimensional das matrizes de Dirac como sendo τ , um trivetor de matrizes de Pauli:

$$\beta \equiv \gamma^0 = \tau_1, \quad \alpha \equiv \gamma^0 \gamma^1 = \tau_2, \quad \gamma_5 \equiv -\gamma^0 \gamma^1 = -\tau_2, \quad i\beta\gamma_5 = \tau_3. \quad (2.177)$$

As constantes de valor real $m \equiv \phi_\infty$ e $m_5 \equiv \mu_s$ carregam dimensões de energia. No poliacetileno, temos as identificações [1]:

- $m \equiv \phi_\infty$: Codifica uma dimerização microscópica
- $m_5 \equiv \mu_s$: Representa um potencial químico alternado, que constitui uma penalidade (ou ganho) energético para elétrons sem spin localizados nos sítios da subrede A (B).

Os autoestados do Hamiltoniano de Dirac (2.176) podem ser representados pelos pares de espinores de dois componentes [1]:

$$\Psi_+(p) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi(p)/2} \cos(\theta(p)/2) \\ +e^{+i\varphi(p)/2} \sin(\theta(p)/2) \end{pmatrix}, \quad (2.178)$$

$$\Psi_-(p) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi(p)/2} \sin(\theta(p)/2) \\ -e^{+i\varphi(p)/2} \cos(\theta(p)/2) \end{pmatrix}, \quad (2.179)$$

com os autovalores de energia:

$$\varepsilon_\pm(p) = \pm \sqrt{p^2 + m^2 + m_5^2} \equiv \pm \sqrt{p^2 + \phi_\infty^2 + \mu_s^2}, \quad (2.180)$$

respectivamente.

Qualquer dependência de $\phi(x)$ e $\mu_s(x)$ na posição x quebra a simetria de translação. Contudo, quando:

$$\mu_s(x) = 0, \quad (2.181)$$

qualquer modo zero de ($\hbar = 1$):

$$\mathcal{H}_\phi(x) := -i\tau_2 \frac{d}{dx} + \tau_1 \phi(x) \quad (2.182)$$

para algum perfil específico da função $\phi(x)$ é robusto a mudanças suaves neste perfil devido à simetria espectral quirial [1]:

$$\mathcal{H}_\phi(x) = -\tau_3 \mathcal{H}_\phi(x) \tau_3. \quad (2.183)$$

Aqui, a transformação quirial:

$$\alpha \Psi(x) + \alpha' \Psi'(x) \mapsto \alpha \tau_3 \Psi(x) + \alpha' \tau_3 \Psi'(x), \quad (2.184)$$

para qualquer par de números complexos α e α' e qualquer par de espinores complexos $\Psi(x)$ e

$\Psi'(x)$, mapeia o autoestado satisfazendo:

$$\mathcal{H}_\phi(x)\Psi_\varepsilon(x) = \varepsilon\Psi_\varepsilon(x), \quad (2.185)$$

no autoestado satisfazendo:

$$\mathcal{H}_\phi(x)\Psi_{-\varepsilon}(x) = -\varepsilon\Psi_{-\varepsilon}(x), \quad (2.186)$$

onde:

$$\Psi_{-\varepsilon}(x) = \tau_3\Psi_\varepsilon(x). \quad (2.187)$$

Em particular, qualquer autoestado simultâneo da transformação quiral τ_3 e de $\mathcal{H}_\phi(x) = -\tau_3\mathcal{H}_\phi(x)\tau_3$ é um modo zero:

$$\begin{cases} \tau_3\Psi(x) = \pm\Psi(x) \\ \mathcal{H}_\phi(x)\Psi(x) = \varepsilon\Psi(x) \end{cases} \Rightarrow \mathcal{H}_\phi(x)\Psi(x) = 0. \quad (2.188)$$

Os dois componentes do modo zero definido pela Eq. (2.188) devem satisfazer as equações diferenciais de primeira ordem:

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{d}{dx} + \phi(x) \\ \frac{d}{dx} + \phi(x) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix} = 0, \quad (2.189)$$

cuja solução formal, dadas condições iniciais $u(0)$ e $v(0)$, segue da integração:

$$\left[\frac{d}{dx} + \phi(x) \right] u(x) = 0 \implies u(x) = u(0)e^{-\int_0^x dx' \phi(x')}, \quad (2.190)$$

$$\left[-\frac{d}{dx} + \phi(x) \right] v(x) = 0 \implies v(x) = v(0)e^{+\int_0^x dx' \phi(x')}. \quad (2.191)$$

Impomos as condições de contorno de que os componentes dos modos zero se anulem no infinito. Essas condições de contorno só podem ser satisfeitas nos dois casos seguintes (assumindo $|\phi(\pm\infty)| \neq 0$) [1]:

- Se a função $\phi(x)$ suporta um sóliton definido pela convenção $\phi(-\infty) < 0$ e $\phi(+\infty) > 0$, então $u(x)$ tende a zero exponencialmente rápido conforme $x \rightarrow +\infty$ para qualquer $u(0)$, enquanto devemos impor a escolha $v(0) = 0$ para satisfazer as condições de contorno em $x = \pm\infty$;
- Se a função $\phi(x)$ suporta um antisóliton definido pela convenção $\phi(-\infty) > 0$ e $\phi(+\infty) < 0$, então $v(x)$ tende a zero exponencialmente rápido conforme $x \rightarrow \pm\infty$ para qualquer $v(0)$, enquanto devemos impor a escolha $u(0) = 0$ para satisfazer as condições de contorno em $x = \pm\infty$.

Em ambos os casos, existe apenas um modo zero que satisfaz as condições de contorno em

$x = \pm\infty$. O fato de que apenas uma das soluções $u(x)$ ou $v(x)$ satisfaz as condições de contorno é consistente com o fato de que modos zero são autoestados da transformação quiral.

As duas equações diferenciais ordinárias definidas pela Eq. (2.189) são exemplos do problema de autovalor:

$$\begin{pmatrix} 0 & \mathcal{D} \\ \mathcal{D}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = 0, \quad (2.192)$$

dadas condições iniciais em f e g (e suas derivadas se necessário) suplementadas por condições de contorno. Aqui, \mathcal{D} é algum operador diferencial e \mathcal{D}^\dagger seu adjunto.

Para uma classe de operadores \mathcal{D} e \mathcal{D}^\dagger e condições de contorno, o número de modos zero admissíveis para o problema de autovalor (2.192) é dado pelo índice analítico:

$$\text{Index}(\mathcal{D}) := \dim \ker(\mathcal{D}^\dagger) - \dim \ker(\mathcal{D}). \quad (2.193)$$

Este índice é a diferença entre o número de soluções linearmente independentes para as equações $\mathcal{D}^\dagger f = 0$ e $\mathcal{D}g = 0$.

Para resumir, encontramos o modo zero normalizado:

$$\Psi_{\varepsilon=0}^s(x) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \begin{pmatrix} e^{-\int_0^x dx' \phi(x')} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{N} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2\int_0^x dx' \phi(x')}, \quad (2.194)$$

para o *background* solitônico e o modo zero normalizado:

$$\Psi_{\varepsilon=0}^{\bar{s}}(x) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \begin{pmatrix} 0 \\ e^{+\int_0^x dx' \phi(x')} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{N} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{+2\int_0^x dx' \phi(x')}, \quad (2.195)$$

para o *background* anti-solitônico ao resolver o problema de autovalor (2.189).

2.5.2 Fracionalização via teoria de espalhamento

Trataremos agora o efeito da quebra explícita da simetria espectral quiral sobre a carga ligada a um defeito de parede de domínio no padrão de dimerização do poliacetileno utilizando a perspectiva da teoria de espalhamento [1, 41, 42, 43, 45]. Para este fim, o fenômeno de fracionalização de carga no poliacetileno pode ser expresso como um efeito de contorno no espaço unidimensional. Em seguida, utilizando um *ansatz* de espalhamento, obtêm-se a dependência notável no potencial químico alternado, expressa na Eq. (2.225), da carga ligada ao defeito de parede de domínio no poliacetileno.

Partimos do Hamiltoniano de Dirac de partícula única 2×2

$$\mathcal{H}_s(x) = \tau_2 \hat{p} + \tau_1 \phi(x) + \tau_3 \mu_s, \quad (2.196)$$

atuando no espaço de Hilbert construído como o produto tensorial entre o espaço gerado pela

base de ondas planas definidas na reta real e o espaço \mathbb{C}^2 , que representa os dois graus de liberdade internos. O operador momento é representado por:

$$\hat{p} = \frac{1}{i} \frac{d}{dx} \quad (2.197)$$

na base de posição. Impomos as condições de contorno

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x) = \pm\phi_\infty, \quad \phi_\infty > 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.198)$$

para o perfil de sóliton $\phi(x)$. O potencial químico alternado μ_s é real e quebra a simetria quiral gerada por τ_3 . Definimos também o Hamiltoniano de referência

$$\mathcal{H}_\infty := \tau_2 \hat{p} + \tau_1 \phi_\infty + \tau_3 \mu_s, \quad (2.199)$$

atuando sobre o mesmo espaço de Hilbert que o Hamiltoniano (2.196).

Introduzimos também dois conjuntos completos de autofunções ortogonais, $\{\Psi_\infty(\varepsilon, x)\}$ e $\{\Psi(\varepsilon, x)\}$ com $\varepsilon \in \mathbb{R}$, para caracterizar cada um dos espectros. Para qualquer $x \in \mathbb{R}$, as densidades locais do nível de energia de partícula única ε são definidas por:

$$\rho_{\Psi_\infty}(\varepsilon) := \Psi_\infty^\dagger(\varepsilon, x) \Psi_\infty(\varepsilon, x), \quad (2.200)$$

que é independente de x por invariância translacional para o sistema homogêneo definido por \mathcal{H}_∞ , e

$$\rho_\Psi(\varepsilon, x) := \Psi^\dagger(\varepsilon, x) \Psi(\varepsilon, x). \quad (2.201)$$

Definimos também as medidas ν_∞ e ν_s como as distribuições tais que $\nu_\infty(\varepsilon) d\varepsilon$ e $\nu_s(\varepsilon) d\varepsilon$ são os números de autoestados dos Hamiltonianos \mathcal{H}_∞ e \mathcal{H}_s no intervalo $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$, respectivamente [1].

As densidades locais dos estados fundamentais de muitas partículas são obtidas integrando-se sobre todos os estados de partícula única ocupados abaixo do potencial químico μ :

$$\Upsilon_\infty(x) := \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon \nu_\infty(\varepsilon) \rho_{\Psi_\infty}(\varepsilon), \quad (2.202)$$

$$\Upsilon(x) := \int_{-\infty}^{\mu} d\varepsilon \nu_s(\varepsilon) \rho_\Psi(\varepsilon, x). \quad (2.203)$$

O par de funções $\Upsilon_\infty(x)$ e $\Upsilon(x)$ representa, portanto, a densidade local de estados integrada em energia para todos os estados de partícula única ocupados, sem e com o perfil de sóliton, respectivamente. Devido à simetria de translação de \mathcal{H}_∞ , a densidade local de referência é independente de x :

$$\Upsilon_\infty(x) = \Upsilon_\infty. \quad (2.204)$$

O valor Υ_∞ nada mais é do que a densidade média de elétrons no potencial químico μ .

A carga global no *background* de s3liton 3 ent3o definida relativamente ao caso sem s3liton, integrando-se no espa3o a diferen3a entre as densidades locais de estados ocupados [1]:

$$Q := \int_{\mathbb{R}} dx [\Upsilon(x) - \Upsilon_{\infty}]. \quad (2.205)$$

Primeiramente, para avaliar a Eq. (2.205), observamos que o espectro de \mathcal{H}_{∞} depende continuamente do momento k , com autovalores determinados por [1, 45]

$$\varepsilon^2(k) = k^2 + \phi_{\infty}^2 + \mu_s^2, \quad \forall k \in \mathbb{R}, . \quad (2.206)$$

Segundo, por simplicidade e sem perda de generalidade, assumiremos que, quando o perfil do s3liton for suficientemente estreito ao redor do seu centro de localiza33o,

$$\Theta_{\mu_s}(x) := \begin{pmatrix} \exp\left(-\int_0^x dy \phi(y)\right) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.207)$$

3 o autovetor 3nico (at3 um fator de fase multiplicativo) com autovalor de energia μ_s do operador $\mathcal{H}_s(x)$, ou seja, um estado ligado. Estados ligados, neste contexto, s3o autovetores de $\mathcal{H}_s(x)$, necessariamente normaliz3veis, cujos autovalores t3m m3dulo limitado entre $|\mu_s|$ e $\sqrt{\phi_{\infty}^2 + \mu_s^2}$. Como ser3 explicado posteriormente, estados ligados cujos autovalores s3o maiores em m3dulo do que $|\mu_s|$ n3o contribuem para a carga global na Eq. (2.205). Terceiro,

$$\Psi(k, x) := \sqrt{\frac{\varepsilon(k) + \mu_s}{2\varepsilon(k)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\varepsilon(k) + \mu_s} [\partial_x + \phi(x)] \end{pmatrix} u(k, x), \quad (2.208)$$

em que $u(k, x)$ 3 solu33o da equa33o de Schr3dinger estacion3ria

$$[-\partial_x^2 + \phi^2(x) - \phi'(x)] u(k, x) = (k^2 + \phi_{\infty}^2) u(k, x), \quad k, x \in \mathbb{R}, \quad (2.209)$$

3 autovetor de $\mathcal{H}_s(x)$ com autovalor de energia $\varepsilon(k)$ satisfazendo

$$\varepsilon^2(k) = k^2 + \phi_{\infty}^2 + \mu_s^2, \quad (2.210)$$

e condi33es de contorno do tipo onda plana para $x \rightarrow \pm\infty$. Quarto, segue-se que, para qualquer ε que satisfa3a $|\varepsilon| > \sqrt{\phi_{\infty}^2 + \mu_s^2}$,

$$d\varepsilon \nu_{\infty}(\varepsilon) = d\varepsilon \nu_s(\varepsilon) \equiv d\varepsilon \nu(\varepsilon). \quad (2.211)$$

A densidade local (2.201) do n3vel de part3cula 3nica (2.208) com autovalor de energia ε que satisfaz

$$\varepsilon^2 = k^2 + \phi_{\infty}^2 + \mu_s^2 \quad (2.212)$$

pode ser escrita, usando a Eq. (2.209), como [1]

$$\rho_{\Psi}(\varepsilon, x) = |u(\varepsilon, x)|^2 + \frac{1}{2\varepsilon(\varepsilon + \mu_s)} \partial_x [u^*(\varepsilon, x) \partial_x u(\varepsilon, x) + \phi(x) u^*(\varepsilon, x) u(\varepsilon, x)]. \quad (2.213)$$

Quando $\phi(x) = \phi_{\infty}$ para todo $x \in \mathbb{R}$, $u_{\infty}^*(\varepsilon, x) \partial_x u_{\infty}(\varepsilon, x)$ e $|u_{\infty}(\varepsilon, x)|^2$ tornam-se independentes de x , de modo que

$$\rho_{\Psi_{\infty}}(\varepsilon) = |u_{\infty}(\varepsilon, x)|^2, \quad \varepsilon^2 = k^2 + \phi_{\infty}^2 + \mu_s^2. \quad (2.214)$$

Assim, quando o potencial químico μ está imediatamente abaixo do potencial químico alternado μ_s , isto é, quando $\mu = \mu_s + 0^-$, a carga global (2.205) é:

$$\begin{aligned} Q = & \int_{\mathbb{R}} dx \int_{-\infty}^{-\sqrt{\phi_{\infty}^2 + \mu_s^2}} d\varepsilon v(\varepsilon) [|u(\varepsilon, x)|^2 - |u_{\infty}(\varepsilon, x)|^2] \\ & + \int_{-\infty}^{-\sqrt{\phi_{\infty}^2 + \mu_s^2}} d\varepsilon v(\varepsilon) \frac{1}{2\varepsilon(\varepsilon + \mu_s)} [u^*(\varepsilon, x) \partial_x u(\varepsilon, x) + \phi(x) u^*(\varepsilon, x) u(\varepsilon, x)]_{x=-\infty}^{x=+\infty}. \end{aligned} \quad (2.215)$$

A integral dupla (em x e ε) pode ser avaliada assumindo-se que a base de autoestados definida pelo problema de autovalor da Eq. (2.209) é completa, tanto para o fundo com um perfil de sóliton, quanto sem ele (o estado de referência com simetria de translação). Se for assim, os autoestados $u(\varepsilon, x)$ com autovalores $\varepsilon^2 \geq \phi_{\infty}^2 + \mu_s^2$ estão a um estado de um conjunto completo, uma vez que o estado ligado normalizado não está entre eles, de modo que [1, 45]

$$\int_{\mathbb{R}} dx \int_{-\infty}^{-\sqrt{\phi_{\infty}^2 + \mu_s^2}} d\varepsilon v(\varepsilon) [|u(\varepsilon, x)|^2 - |u_{\infty}(\varepsilon, x)|^2] = -1. \quad (2.216)$$

A carga global é, portanto, determinada unicamente pelo termo de contorno em

$$Q = -1 + \int_{-\infty}^{-\sqrt{\phi_{\infty}^2 + \mu_s^2}} d\varepsilon v(\varepsilon) \frac{1}{2\varepsilon(\varepsilon + \mu_s)} [u^*(\varepsilon, x) \partial_x u(\varepsilon, x) + \phi(x) u^*(\varepsilon, x) u(\varepsilon, x)]_{x=-\infty}^{x=+\infty}. \quad (2.217)$$

A contribuição do termo

$$\int_{-\infty}^{-\sqrt{\phi_{\infty}^2 + \mu_s^2}} d\varepsilon v(\varepsilon) \frac{1}{2\varepsilon(\varepsilon + \mu_s)} [u^*(\varepsilon, x) \partial_x u(\varepsilon, x)]_{x=-\infty}^{x=+\infty} = 0 \quad (2.218)$$

é nula, como foi demonstrado por Jackiw e Semenoff na Ref. [45] a partir do seguinte *ansatz* de espalhamento para a função $u(\varepsilon, x)$:

$$u(\varepsilon, x) = \begin{cases} T e^{+ikx}, & x \rightarrow +\infty, \\ e^{+ikx} + R e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty. \end{cases} \quad (2.219)$$

Este *ansatz* de espalhamento descreve uma onda plana com energia de partícula única $\varepsilon = -\sqrt{k^2 + \phi_\infty^2 + \mu_s^2}$ incidindo da esquerda sobre o perfil de sóliton centrado na origem do eixo real. Essa onda incidente pode ser transmitida ou refletida pelo perfil, com amplitudes T e R , respectivamente. A conservação do fluxo implica

$$1 = |R|^2 + |T|^2. \quad (2.220)$$

Assim, a contribuição de contorno para a carga global Eq. (2.205) se torna a integral

$$I := \int_{-\infty}^{-\sqrt{\phi_\infty^2 + \mu_s^2}} d\varepsilon \nu(\varepsilon) \frac{\phi_\infty}{\varepsilon(\varepsilon + \mu_s)} = \phi_\infty \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{k^2 + \phi_\infty^2 + \mu_s^2} \left(\sqrt{k^2 + \phi_\infty^2 + \mu_s^2} - \mu_s \right)}, \quad (2.221)$$

oriunda da densidade dos estados ocupados do contínuo em $x = \pm\infty$, com

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{dk}{d\varepsilon} \right| = \frac{1}{2\pi} \frac{|\varepsilon|}{k(\varepsilon)}, \quad k(\varepsilon) = \sqrt{\varepsilon^2 - \phi_\infty^2 - \mu_s^2}. \quad (2.222)$$

A integral pode ser resolvida por mudanças apropriadas de variáveis e o uso de identidades trigonométricas, conforme detalhado em [1]. Após tais manipulações algébricas chega-se ao resultado

$$Q = -1 + I \quad (2.223)$$

onde

$$I = \begin{cases} 1 - \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\phi_\infty}{|\mu_s|}\right), & \text{se } \mu_s > 0, \\ \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\phi_\infty}{|\mu_s|}\right), & \text{se } \mu_s < 0, \end{cases} \quad (2.224)$$

e, portanto,

$$Q = \begin{cases} -\frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\phi_\infty}{|\mu_s|}\right), & \text{se } \mu_s > 0, \\ -1 + \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{\phi_\infty}{|\mu_s|}\right), & \text{se } \mu_s < 0. \end{cases} \quad (2.225)$$

Note que a carga global Q da Eq. (2.225) depende apenas dos valores assintóticos $\pm\phi_\infty$ (com $\phi_\infty > 0$) do perfil de sóliton em $x \rightarrow \pm\infty$. Esta insensibilidade a mudanças locais suaves do perfil de sóliton é um indicativo topológico importante [1]. Finalmente, no limite $\mu_s \rightarrow 0$ com $\phi_\infty > 0$, tem-se $Q = -1/2$.

2.5.3 Assimetria espectral e fracionalização

O Hamiltoniano de Dirac (2.196) possui uma propriedade especial que permite o cálculo exato da carga fermiônica conservada induzida [1, 47, 48]. Esta propriedade está fundamentada em uma supersimetria [49] oculta presente em um Hamiltoniano que está linearmente relacionado ao quadrado do operador de Dirac. A formulação matemática desta supersimetria fornece

uma base rigorosa para a compreensão dos mecanismos de fracionalização.

Para um sistema em d dimensões espaciais euclidianas, define-se um conjunto de matrizes complexas $N \times N$ P_i que obedecem às relações de anticomutação:

$$P_i^\dagger P_j + P_j^\dagger P_i = 2\delta_{ij}, \quad P_i P_j^\dagger + P_j P_i^\dagger = 2\delta_{ij} \quad (2.226)$$

para qualquer par $i, j = 1, \dots, d$. Para cada ponto x no espaço euclidiano d -dimensional \mathbb{R}^d , associa-se uma matriz complexa $N \times N$ denotada por $\phi(x)$ [1]. As d matrizes constantes P_i e o campo matricial $\phi(x)$ são combinados em um par de operadores diferenciais de primeira ordem:

$$\widehat{D}^\dagger := P_i^\dagger i \partial_i + \phi^\dagger(x), \quad (2.227)$$

$$\widehat{D} := P_i i \partial_i + \phi(x), \quad (2.228)$$

onde $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i}$ e emprega-se a convenção de soma sobre índices latinos repetidos [1].

Assumindo que a dependência do campo matricial ϕ em $x \in \mathbb{R}^d$ é suave, e que μ_s é um número real, define-se o Hamiltoniano de partícula única como:

$$\mathcal{H} := \begin{pmatrix} +\mu_s & \widehat{D} \\ \widehat{D}^\dagger & -\mu_s \end{pmatrix}. \quad (2.229)$$

Seguindo a convenção física padrão, uma entrada como μ_s multiplica implicitamente a matriz identidade $N \times N$ [1]. Por construção, \mathcal{H} é hermitiano e é um operador de Dirac, uma vez que:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_\phi + \mu_s \Gamma_5, \quad (2.230)$$

onde

$$\mathcal{H}_\phi := \Gamma_i i \partial_i + \Phi(x), \quad (2.231)$$

com as matrizes $2N \times 2N$:

$$\Gamma_i := \begin{pmatrix} 0 & P_i \\ P_i^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad \Gamma_5 := \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.232)$$

O campo matricial hermitiano $\Phi(x)$ é construído a partir do campo complexo $\phi(x)$ através da definição:

$$\Phi(x) := \begin{pmatrix} 0 & \phi(x) \\ \phi^\dagger(x) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.233)$$

As d matrizes Γ_i anticomutam aos pares devido à Eq. (2.226), satisfazendo as relações fundamentais:

$$\{\Gamma_i, \Gamma_j\} = 2\delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, d. \quad (2.234)$$

Todas estas matrizes anticomutam com a matriz Γ_5 . Esta estrutura algébrica garante que

$$\{\mathcal{H}_\phi, \Gamma_5\} = 0.$$

A natureza de Dirac do Hamiltoniano (2.229) implica que seu quadrado constitui um Hamiltoniano positivo, cujos autovalores são limitados inferiormente por μ_s^2 [1]:

$$\mathcal{H}^2 = \mathcal{H}_\phi^2 + \mu_s^2 \geq \mu_s^2 \quad (2.235)$$

Segundo a representação dada pela Eq. (2.229), as componentes superior e inferior de qualquer autoestado $\psi \equiv \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ de \mathcal{H} com autovalor ε devem obedecer às equações acopladas:

$$\widehat{D}^\dagger u = (\varepsilon + \mu_s)v, \quad (2.236)$$

$$\widehat{D}v = (\varepsilon - \mu_s)u \quad (2.237)$$

A iteração deste par de equações revela que:

$$\widehat{D}\widehat{D}^\dagger u = (\varepsilon^2 - \mu_s^2)u, \quad (2.238)$$

$$\widehat{D}^\dagger\widehat{D}v = (\varepsilon^2 - \mu_s^2)v \quad (2.239)$$

Pode-se deduzir que o espectro de \mathcal{H} é qualitativamente diferente no limiar espectral $\varepsilon^2 = \mu_s^2$ em comparação com energias acima deste limiar, isto é, quando $\varepsilon^2 > \mu_s^2$ [1].

Por um lado, para qualquer solução não nula u da equação estacionária de Schrödinger (2.238) acima do limiar espectral, existe uma solução não nula $\widehat{D}^\dagger u$ da equação estacionária de Schrödinger (2.239) com o mesmo autovalor não nulo $\varepsilon^2 - \mu_s^2 > 0$ [1]:

$$\widehat{D}^\dagger\widehat{D}(\widehat{D}^\dagger u) = \widehat{D}^\dagger(\widehat{D}\widehat{D}^\dagger u) = \widehat{D}^\dagger(\varepsilon^2 - \mu_s^2)u = (\varepsilon^2 - \mu_s^2)\widehat{D}^\dagger u. \quad (2.240)$$

Similarmente, para qualquer solução não nula v da equação estacionária de Schrödinger (2.239) acima do limiar espectral,

$$\widehat{D}\widehat{D}^\dagger(\widehat{D}v) = \widehat{D}(\widehat{D}^\dagger\widehat{D}v) = \widehat{D}(\varepsilon^2 - \mu_s^2)v = (\varepsilon^2 - \mu_s^2)\widehat{D}v. \quad (2.241)$$

Esta observação revela que as duas representações diferem apenas pela escolha (arbitrária) de impor uma condição de normalização sobre u ou v ao resolver as Eqs. (2.238) ou (2.239), respectivamente, acima do limiar espectral. Uma convenção de normalização adequada para o cálculo da carga fracionária, baseada na teoria de espalhamento é [1]:

$$\psi(\varepsilon, x) = \sqrt{\frac{\varepsilon + \mu_s}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} u(\varepsilon, x) \\ v(\varepsilon, x) \end{pmatrix}, \quad v(\varepsilon, x) = \frac{1}{\varepsilon + \mu_s} \left(\widehat{D}^\dagger u \right) (\varepsilon, x) \quad (2.242)$$

$$\psi(\varepsilon, x) = \sqrt{\frac{\varepsilon - \mu_s}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} u(\varepsilon, x) \\ v(\varepsilon, x) \end{pmatrix}, \quad u(\varepsilon, x) = \frac{1}{\varepsilon - \mu_s} \left(\widehat{D} v \right) (\varepsilon, x) \quad (2.243)$$

se impomos as condições limite de onda plana assintótica $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |u(\varepsilon, x)| = 1$ sobre a solução u de Eq. (2.238), ou se impomos $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |v(\varepsilon, x)| = 1$ sobre a solução v de Eq. (2.239), respectivamente, acima do limiar espectral quando $\varepsilon^2 > \mu_s^2$ [1].

Por outro lado, entre todas as possíveis soluções do problema de autovalores (2.236) e (2.237) no limiar espectral $\varepsilon^2 = \mu_s^2$, existem as soluções especiais [1]:

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{D}^\dagger u = 0 \quad (2.244)$$

em $\varepsilon = +\mu_s$ e existem as soluções:

$$\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ v \end{pmatrix}, \quad \widehat{D} v = 0 \quad (2.245)$$

em $\varepsilon = -\mu_s$, respectivamente. Contudo, se u é um modo zero de \widehat{D}^\dagger , em geral, ele não é um modo zero de \widehat{D} [48] e, portanto, as Eqs. (2.238) e (2.239) deixam em aberto a possibilidade de que $\widehat{D}u \neq 0$ e $\widehat{D}^\dagger v \neq 0$, mesmo quando $\widehat{D}^\dagger u = 0$ e $\widehat{D}v = 0$, respectivamente. Portanto, a possibilidade [1]:

$$\dim(\text{Ker } \widehat{D}^\dagger) \neq \dim(\text{Ker } \widehat{D}) \quad (2.246)$$

surge naturalmente.

Quando $\mu_s = 0$, o limiar espectral colapsa para o centro do *gap*, conforme ilustrado na Figura 2.6. Neste limite, o Hamiltoniano de Dirac de partícula única \mathcal{H} (2.230) adquire uma simetria espectral unitária gerada por Γ_5 , uma vez que Γ_5 anticomuta com \mathcal{H} [1]. Qualquer autoestado ψ de \mathcal{H} com autovalor não nulo ε é mapeado unitariamente no autoestado $\Gamma_5\psi$ de \mathcal{H} com autovalor não nulo $-\varepsilon$ quando $\mu_s = 0$. Modos zero de \mathcal{H} com a forma (2.244) e (2.245) são autoestados de Γ_5 com autovalores $+1$ e -1 , respectivamente, quando $\mu_s = 0$.

Quando $\mu_s \neq 0$, nenhum autoestado dentro do intervalo de energia $-|\mu_s| < \varepsilon < +|\mu_s|$ pode ser encontrado para o Hamiltoniano de Dirac de partícula única (2.230). Qualquer modo zero de \mathcal{H}_ϕ definido por (2.231) que é um autoestado de Γ_5 é deslocado para o limiar inferior $-\mu_s$ ou o limiar superior $+\mu_s$. A matriz unitária Γ_5 não anticomuta com o Hamiltoniano de Dirac de

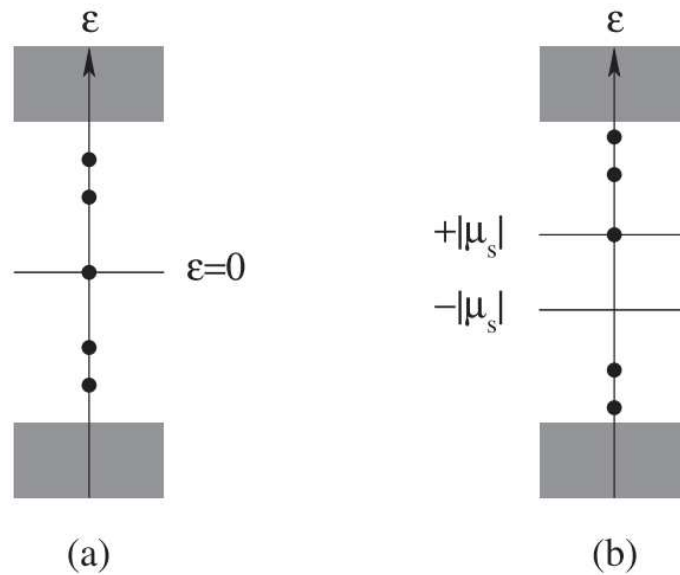


Figura 2.6: (a) Decomposição do espectro do Hamiltoniano \mathcal{H}_ϕ definido na Eq. (2.231) em espectro pontual e contínuo. A simetria espectral unitária $\{\mathcal{H}_\phi, \Gamma_5\} = 0$ garante o pareamento de todos os autoestados de partícula única com autovalores não-nulos em pares com energias opostas. (b) Decomposição do espectro de \mathcal{H} definido na Eq. (2.230) em espectro pontual e contínuo. Qualquer modo zero de \mathcal{H}_ϕ se torna um estado limítrofe nas energias $\varepsilon = \pm|\mu_s|$. O espectro não-limítrofe de \mathcal{H} corresponde ao conjunto de todas as autoenergias com $\varepsilon^2 > \mu_s^2$. Fonte: adaptado de [1].

partícula única (2.230) [1]. Contudo, verifica-se que o operador não-unitário:

$$\mathcal{A} := \frac{1}{2}[\mathcal{H}, \Gamma_5] = \frac{1}{2}[\mathcal{H}_\phi, \Gamma_5] = \mathcal{H}_\phi \Gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & -\widehat{D} \\ +\widehat{D}^\dagger & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.247)$$

anticomuta com \mathcal{H} :

$$\{\mathcal{H}, \mathcal{A}\} = 0, \quad (2.248)$$

e aniquila qualquer estado limítrofe. Consequentemente, o espectro de \mathcal{H} definido por (2.231) que não é aniquilado por \mathcal{A} é simétrico com respeito a $\varepsilon = 0$. Por exemplo, qualquer estado de espalhamento $\psi(\varepsilon, x)$ da forma (2.242) está relacionado ao estado de espalhamento $\psi(-\varepsilon, x)$ das formas (2.242) e (2.243) por:

$$\psi(-\varepsilon, x) = -\frac{\text{sgn}(\varepsilon)}{\sqrt{\varepsilon^2 - \mu_s^2}} (\mathcal{A}\psi)(\varepsilon, x). \quad (2.249)$$

Contudo, em geral, não esperamos que um mapeamento como o da Eq. (2.249), que é implementado por um operador diferencial, preserve a densidade de estados contínuos [48]. De fato, assumindo a normalização contínua:

$$\int_{\mathbb{R}^d} d^d x \psi^\dagger(\varepsilon, x) \psi(\varepsilon', x) = \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (2.250)$$

inferimos que:

$$\int_{\mathbb{R}^d} d^d x (\mathcal{A}\psi)^\dagger(\varepsilon, x)(\mathcal{A}\psi)(\varepsilon', x) = (\varepsilon^2 - \mu_s^2)\delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (2.251)$$

Correspondentemente, o número de estados no intervalo $[|\varepsilon|, |\varepsilon| + d\varepsilon]$ do espectro contínuo com autovalores positivos de energia não precisa igualar o número de estados no intervalo $[-|\varepsilon| - d\varepsilon, -|\varepsilon|]$ com autovalores de energia negativos [1].

O valor esperado do operador de carga fermiônica no estado fundamental de muitas partículas é definido por:

$$Q := \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} d^d x \langle \text{GS} \left| \left[\widehat{\Psi}^\dagger(x), \widehat{\Psi}(x) \right] \right| \text{GS} \rangle. \quad (2.252)$$

O estado fundamental $|\text{GS}\rangle$ constitui o estado de muitas partículas aniquilado por todos os operadores de aniquilação nas expansões em modos. Os operadores de campo fermiônico admitem as expansões em $t = 0$ [1]:

$$\begin{aligned} \widehat{\Psi}^\dagger(x) &:= \sum_{n_+} \hat{a}_{n_+}^\dagger \psi_{n_+,+}^\dagger(x) + \sum_{n_-} \hat{b}_{n_-} \psi_{n_-,-}^\dagger(x) \\ &+ \sum_n \left[\hat{c}_n^\dagger \psi_{n,+}^\dagger(x) + \hat{d}_n \psi_{n,-}^\dagger(x) \right] \\ &+ \int_{\mathbb{R}^d} d^d p \left[\hat{c}^\dagger(p) \psi_+^\dagger(p, x) + \hat{d}(p) \psi_-^\dagger(p, x) \right]. \end{aligned} \quad (2.253)$$

e

$$\begin{aligned} \widehat{\Psi}(x) &:= \sum_{n_+} \psi_{n_+,+}(x) \hat{a}_{n_+} + \sum_{n_-} \psi_{n_-,-}(x) \hat{b}_{n_-}^\dagger \\ &+ \sum_n \left[\psi_{n,+}(x) \hat{c}_n + \psi_{n,-}(x) \hat{d}_n^\dagger \right] \\ &+ \int_{\mathbb{R}^d} d^d p \left[\psi_+(p, x) \hat{c}(p) + \psi_-(p, x) \hat{d}^\dagger(p) \right]. \end{aligned} \quad (2.254)$$

A organização da expansão em modos segue a estrutura espectral do Hamiltoniano \mathcal{H} [1]:

- **Estados limítrofes:** estados com autovalores exatamente nos limiares espectrais $\varepsilon = +|\mu_s|$ representados por funções de onda $\psi_{n_+}(x)$, e autovalores $\varepsilon = -|\mu_s|$ representados por $\psi_{n_-}(x)$. Para este setor, postulamos as seguintes relações de anticomutação não nulas:

$$\left\{ \hat{a}_{n_+}, \hat{a}_{n'_+}^\dagger \right\} = \delta_{n_+, n'_+}, \quad \left\{ \hat{b}_{n_-}, \hat{b}_{n'_-}^\dagger \right\} = \delta_{n_-, n'_-}. \quad (2.255)$$

- **Estados ligados discretos:** estados com energias $\varepsilon_{n_+} > +|\mu_s|$ e $\varepsilon_{n_-} = -\varepsilon_{n_+}$, representados pelas funções de onda $\psi_{n_+}(x)$ e $\psi_{n_-}(x)$, respectivamente, com índice discreto n . As

relações de anticomutação não nulas para o setor de estados ligados são:

$$\{\hat{c}_n, \hat{c}_{n'}^\dagger\} = \delta_{n,n'}, \quad \{\hat{d}_n, \hat{d}_{n'}^\dagger\} = \delta_{n,n'}. \quad (2.256)$$

- **Estados do espectro contínuo:** o rótulo de momento p é reservado aos pares de auto-estados de partícula única com autovalores $\varepsilon_+(p)$ e $\varepsilon_-(p) = -\varepsilon_+(p)$ que são representados pelas funções de onda com comportamento assintótico de onda plana $\psi_+(p, x)$ e $\psi_-(p, x) \propto \mathcal{A} \psi_+(p, x)$, respectivamente. Para o setor contínuo, admite-se

$$\{\hat{c}(p), \hat{c}^\dagger(p')\} = \{\hat{d}(p), \hat{d}^\dagger(p')\} = \delta(p - p'). \quad (2.257)$$

A inserção das expansões de modo (2.253) e (2.254) no operador de carga (2.252) resulta em [1]:

$$Q = -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} d^d x \left[\sum_{n_+} \psi_{n_+,+}^\dagger(x) \psi_{n_+,+}(x) - \sum_{n_-} \psi_{n_-,-}^\dagger(x) \psi_{n_-,-}(x) \right] - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} d^d x \int_{\mathbb{R}^d} d^d p \left[\psi_+^\dagger(p, x) \psi_+(p, x) - \psi_-^\dagger(p, x) \psi_-(p, x) \right]. \quad (2.258)$$

A integração pode ser realizada antes das somatórias sobre n_+ e n_- para estados limítrofes, uma vez que estes estados são normalizados à unidade. O primeiro termo do lado direito da Eq. (2.258) reduz-se à diferença no número de estados limítrofes com energias de partícula única $\varepsilon = +|\mu_s|$ e $\varepsilon = -|\mu_s|$. Esta diferença é proporcional ao índice do Hamiltoniano \mathcal{H}_ϕ [1]:

$$\text{Index } \mathcal{H}_\phi := \dim \left(\text{Ker } \widehat{D}^\dagger \right) - \dim \left(\text{Ker } \widehat{D} \right). \quad (2.259)$$

No caso presente o índice é +1 (-1) para um sóliton (anti-sóliton) [48].

Não há contribuição dos estados ligados no setor entre o limiar e o contínuo, uma vez que estes estados são normalizados à unidade, de modo que a integral sobre x pode ser seguramente realizada antes de somar sobre suas energias discretas de partícula única, e eles vêm em pares com autoenergias opostas. A segunda linha do lado direito da Eq. (2.258) surge do contínuo. Agora, a ordem de integração importa grandemente, pois os estados de partícula única do contínuo não são normalizáveis. Contudo, a integral sobre o momento pode ser convertida em uma integral sobre as energias de partícula única do contínuo sobre a densidade de estados de partícula única resolvida espacialmente por unidade de energia

$$v(\varepsilon, x) := \begin{cases} \int_{\mathbb{R}^d} d^d p \delta(\varepsilon - \varepsilon_+(p)) \psi_+^\dagger(p, x) \psi_+(p, x), & \text{se } \varepsilon > 0, \\ \int_{\mathbb{R}^d} d^d p \delta(\varepsilon - \varepsilon_-(p)) \psi_-^\dagger(p, x) \psi_-(p, x), & \text{se } \varepsilon < 0, \end{cases} \quad (2.260)$$

multiplicando a função sinal da energia de partícula única:

$$Q = -\frac{1}{2} \text{sgn}(\mu_s) \text{Index } \mathcal{H}_\phi - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} d^d x \int_{\mathbb{R}} d\varepsilon \nu(\varepsilon, x) \text{sgn}(\varepsilon). \quad (2.261)$$

Portanto, se $\nu(\varepsilon, x)$ é uma função par da energia, a segunda linha do lado direito da Eq. (2.258) se anula. Isto é o que acontece quando $\mu_s = 0$ devido à simetria espectral quirial unitária pela qual Γ_5 anticomuta com \mathcal{H}_ϕ definido na Eq. (2.231) e assim com \mathcal{H} uma vez que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\phi$ quando $\mu_s = 0$. Mas essa contribuição pode ser não nula quando $\mu_s \neq 0$, porque a simetria espectral induzida pelo fato de que o operador não-unitário \mathcal{A} anticomuta com \mathcal{H} não é suficiente para garantir que $\nu(\varepsilon, x)$ seja uma função par da energia.

Capítulo 3

Fracionalização de carga em sistemas bidimensionais

3.1 Propriedades eletrônicas do grafeno

No grafeno os átomos de carbono estão dispostos periodicamente em uma rede hexagonal em formato de favo de mel (Fig. 1.3). Tal estrutura atômica é definida por dois tipos de ligações dentro da hibridização sp^2 . A partir dos quatro orbitais de valência do átomo de carbono (os orbitais $2s$, $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$, onde z é a direção perpendicular ao plano dos átomos), os orbitais s , p_x , p_y combinam-se para formar os orbitais σ (ligantes ou ocupados) e σ^* (antiligantes ou desocupados) no plano. As ligações σ são fortemente covalentes, determinando a estabilidade energética e as propriedades elásticas do grafeno. O orbital restante p_z , apontando para fora da folha de grafeno, está desacoplado dos estados σ . Das interações laterais com orbitais p_z vizinhos, são formados orbitais π (ligantes) e π^* (antiligantes). A ligação π é perpendicular à superfície da folha de grafeno. As bandas de ligação e antiligação σ correspondentes estão separadas por um grande *gap* de energia de aproximadamente 12 eV, enquanto os estados de ligação e antiligação π encontram-se na vizinhança do nível de Fermi (E_F). Consequentemente, as ligações σ são frequentemente desprezadas na previsão das propriedades eletrônicas do grafeno ao redor da energia de Fermi [9].

As bandas σ de ligação e antiligação são fortemente separadas em energia (> 12 eV) e, portanto, sua contribuição para as propriedades eletrônicas é comumente desconsiderada [9]. As duas bandas π restantes descrevem completamente as excitações eletrônicas de baixa energia no grafeno, em que os orbitais ligantes π e antiligantes π^* produzem bandas de valência e de condução, que se cruzam nos pontos de neutralidade de carga (ponto de Fermi do grafeno não dopado) nos vértices da zona de Brillouin hexagonal.

Os átomos de carbono em um plano de grafeno estão localizados nos vértices de uma rede hexagonal. Esta rede de grafeno pode ser considerada uma rede de Bravais triangular com uma

base de dois átomos por célula unitária (A e B) e vetores de base ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$) [9, 50]:

$$\mathbf{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)$$

Note que $a = \sqrt{3}a_{cc}$, onde $a_{cc} = 1,42 \text{ \AA}$ é a distância carbono-carbono no grafeno. As três direções para vizinhos mais próximos no espaço real são dadas por:

$$\boldsymbol{\delta}_1 = a \left(\frac{1}{2\sqrt{3}}, 1 \right), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = a \left(\frac{1}{2\sqrt{3}}, -1 \right), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = -\frac{a}{\sqrt{3}}(1, 0), \quad (3.1)$$

enquanto os seis segundos vizinhos mais próximos estão localizados em $\boldsymbol{\delta}'_1 = \pm\mathbf{a}_1$, $\boldsymbol{\delta}'_2 = \pm\mathbf{a}_2$, $\boldsymbol{\delta}'_3 = \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)$.

Através do uso da condição $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$, os vetores recíprocos da rede ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$) podem ser obtidos:

$$\mathbf{b}_1 = b \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{b}_2 = b \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

com $b = \frac{4\pi}{3a_{cc}} = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$. Esses vetores são mostrados na Fig. 3.1 juntamente com a primeira zona de Brillouin. Dos seus seis cantos, dois são inequivalentes (os outros podem ser escritos como um destes dois mais um vetor recíproco). Esses dois pontos especiais são denotados por \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- (ou \mathbf{K} e \mathbf{K}' , respectivamente). Outro ponto de alta simetria é o ponto rotulado com \mathbf{M} na Fig. 3.1. Eles são dados por

$$\mathbf{K}_+ = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{K}_- = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{M} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, 0).$$

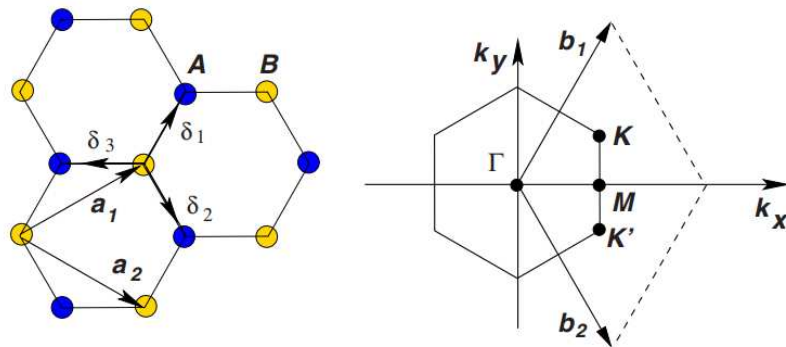


Figura 3.1: Rede de colmeia e sua zona de Brillouin. À esquerda: estrutura da rede do grafeno, composta por duas redes de Bravais triangulares interpenetradas, com vetores de base \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , e vetores de ligação com vizinhos mais próximos $\boldsymbol{\delta}_i$, com $i = 1, 2, 3$. Os sítios da sub-rede A estão indicados por pontos azuis e os da sub-rede B por pontos amarelos. À direita: zona de Brillouin correspondente, com vetores de base recíprocos \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 . Os pontos altamente simétricos Γ , \mathbf{K}_+ , \mathbf{K}' e \mathbf{M} também são indicados. Fonte: adaptado de [50].

As funções de onda eletrônicas de diferentes átomos na rede hexagonal se sobrepõem. No entanto, devido à simetria, a sobreposição entre os orbitais π e os orbitais s ou os p_x e p_y é estritamente zero [9]. Portanto, os elétrons p_z que formam as ligações π no grafeno podem ser tratados independentemente dos outros elétrons de valência. Dentro dessa aproximação, o átomo A (ou B) é definido unicamente por um orbital por sítio atômico $p_z(\mathbf{r}-\mathbf{r}_A)$ (ou $p_z(\mathbf{r}-\mathbf{r}_B)$).

Para derivar o espectro eletrônico do Hamiltoniano total, a equação de Schrödinger correspondente deve ser resolvida. De acordo com o teorema de Bloch, as funções de onda avaliadas em dois pontos dados da rede de Bravais \mathbf{R}_i e \mathbf{R}_j diferem entre si apenas por um fator de fase, $\exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j))$. Devido à base de dois átomos, a *ansatz* de Bloch para as funções de onda é uma combinação linear de somas de Bloch em cada sub-rede [9]:

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = c_A(\mathbf{k})\tilde{p}_z^A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + c_B(\mathbf{k})\tilde{p}_z^B(\mathbf{k}, \mathbf{r}),$$

onde

$$\tilde{p}_z^A(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A - \mathbf{R}_j),$$

$$\tilde{p}_z^B(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B - \mathbf{R}_j),$$

onde \mathbf{k} é o vetor de onda eletrônico, N_c o número de células unitárias na folha de grafeno, e \mathbf{R}_j é um ponto da rede de Bravais. A seguir, vamos negligenciar a sobreposição $\langle p_z^A | p_z^B \rangle$ entre orbitais p_z vizinhos. Então, as somas de Bloch formam um conjunto ortonormal:

$$\langle \tilde{p}_z^\alpha(\mathbf{k}) | \tilde{p}_z^\beta(\mathbf{k}') \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\alpha, \beta},$$

onde $\alpha, \beta = A, B$. Usando essas relações de ortogonalidade na equação de Schrödinger, $H\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, o problema é reduzido a uma equação 2x2. Tomando

$$\langle p_z^{A,0} | \mathcal{H} | p_z^{A,0} \rangle = \langle p_z^{B,0} | \mathcal{H} | p_z^{B,0} \rangle = 0$$

como referência de energia, podemos escrever o Hamiltoniano como

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & -t\alpha(\mathbf{k}) \\ -t\alpha^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

onde t representa a transferência de elétrons entre orbitais π de primeiros vizinhos, e a função $\alpha(\mathbf{k})$ é dada por

$$\alpha(\mathbf{k}) = \left(1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \right). \quad (3.3)$$

As relações de dispersão de energia são obtidas pela diagonalização de $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, resultando em [9]:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t|\alpha(\mathbf{k})|, \quad (3.4)$$

e pode ser expandida como:

$$E_{\pm}(k_x, k_y) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}. \quad (3.5)$$

Os vetores de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ são escolhidos dentro da primeira zona de Brillouin hexagonal. Os zeros de $\alpha(\mathbf{k})$ correspondem aos cruzamentos das bandas com sinais opostos, ocorrendo nos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- . Com apenas um elétron p_z por átomo no modelo π - π^* , a banda $(-)$ está totalmente ocupada enquanto a banda $(+)$ está totalmente vazia para o grafeno eletricamente neutro [9]. Portanto, o nível de Fermi E_F (ou ponto de neutralidade de carga) é a referência de energia zero, e a superfície de Fermi é composta pelos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- , como mostrado na Figura 3.2. O termo semimetal ou semiconductor de *gap* zero é normalmente empregado para descrever o grafeno, uma vez que a superfície de Fermi é reduzida a um conjunto discreto de pontos.

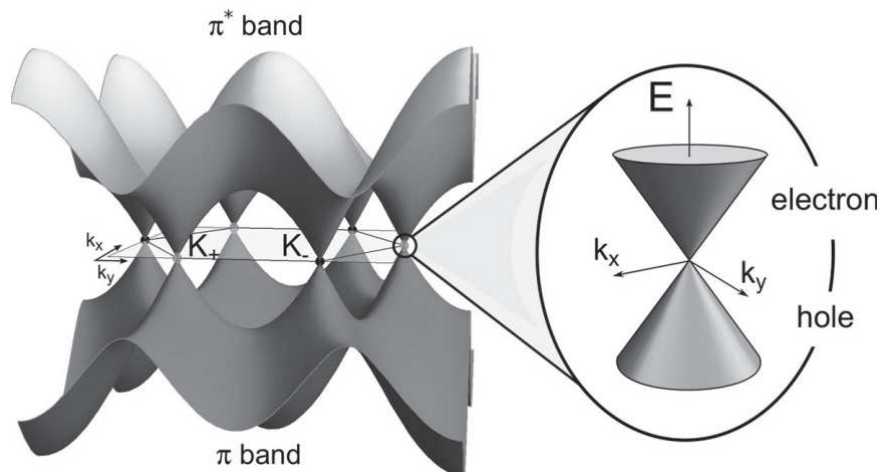


Figura 3.2: Bandas eletrônicas π e π^* do grafeno. A relação de dispersão linear próxima aos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- da primeira zona de Brillouin 2D dá origem aos “cones de Dirac”, como mostrado à direita. Note que, próximo a esses cones, k_x e k_y são usados para denotar o desvio em relação ao ponto de Dirac correspondente. Fonte: adaptado de [9].

O Hamiltoniano de *tight-binding* para os elétrons no grafeno, considerando saltos entre átomos vizinhos mais próximos e segundos vizinhos mais próximos pode ser escrito, de forma análoga à Eq. (2.1), como:

$$\hat{H} := -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} + \text{H.c.} \right) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma} + \hat{b}_{i,\sigma}^\dagger \hat{b}_{j,\sigma} + \text{H.c.} \right). \quad (3.6)$$

em unidades com $\hbar = 1$. Neste Hamiltoniano, $\hat{a}_{i,\sigma}$ ($\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger$) aniquila (cria) um elétron com *spin* σ no sítio \mathbf{R}_i da sub-rede A (a definição análoga vale para a sub-rede B). O primeiro termo descreve o *hopping* com energia $t \approx 2,8$ eV entre os vizinhos mais próximos (entre sub-redes diferentes), enquanto o segundo termo, proporcional a t' , descreve o *hopping* para os segundos

vizinhos mais próximos (dentro da mesma sub-rede). Considerando o Hamiltoniano (3.6) com $t' = 0$, e a transformada de Fourier dos operadores dos elétrons, como

$$\hat{a}_n = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n} \hat{a}(\mathbf{k}), \quad (3.7)$$

onde N_c é o número de células unitárias, podemos escrever o campo \hat{a}_n como a soma de dois termos provenientes da expansão da soma de Fourier em torno dos pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_- . Isso leva à aproximação [50]

$$\hat{a}_n \simeq e^{-i\mathbf{K}_+\cdot\mathbf{R}_n} \hat{a}_{\xi=+1,n} + e^{-i\mathbf{K}_-\cdot\mathbf{R}_n} \hat{a}_{\xi=-1,n}, \quad (3.8)$$

$$\hat{b}_n \simeq e^{-i\mathbf{K}_+\cdot\mathbf{R}_n} \hat{b}_{\xi=+1,n} + e^{-i\mathbf{K}_-\cdot\mathbf{R}_n} \hat{b}_{\xi=-1,n}, \quad (3.9)$$

onde os novos campos $\hat{a}_{\xi,n}$ e $\hat{b}_{\xi,n}$ (com $\xi = +1$ para \mathbf{K}_+ e $\xi = -1$ para \mathbf{K}_-) variam lentamente sobre a célula unitária.

O procedimento para derivar uma teoria válida próxima aos pontos de Dirac consiste em inserir as Eqs. (3.7) e (3.9) no Hamiltoniano de *tight-binding* (3.6) e expandir os operadores até primeira ordem em δ [50]:

$$\hat{H} \simeq -iv_F \int dx dy \left[\hat{\Psi}_1^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \hat{\Psi}_1(\mathbf{r}) + \hat{\Psi}_2^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \hat{\Psi}_2(\mathbf{r}) \right], \quad (3.10)$$

onde

$$v_F = \frac{\sqrt{3}ta}{2\hbar} \quad (3.11)$$

é a velocidade de grupo eletrônica, com $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, $\boldsymbol{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$, e $\hat{\Psi}_\xi^\dagger = (\hat{a}_\xi^\dagger, \hat{b}_\xi^\dagger)$. Assumindo \mathbf{k} como uma medida do desvio em relação a \mathbf{K}_+ ou \mathbf{K}_- , então a expansão linear conduz à seguinte expressão [9]:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}_+} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = v_F (p_x \sigma_x + p_y \sigma_y), \quad (3.12)$$

onde $p_{x(y)} = \hbar k_{x(y)}$ e as matrizes de Pauli σ_x, σ_y são definidas como usual:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

De forma mais compacta, o Hamiltoniano efetivo pode ser escrito como:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}_+} = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}. \quad (3.14)$$

Para o ponto \mathbf{K}_- , o Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{K}_-} = v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p}. \quad (3.15)$$

Ao substituir o momento pelo operador correspondente, $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow -i\hbar\nabla$, temos uma forma análoga à equação de Dirac em duas dimensões para uma partícula de massa zero [9]. Portanto, o Hamiltoniano efetivo (3.10) descreve duas cópias independentes do Hamiltoniano de Dirac sem massa, uma para momentos \mathbf{p} próximos a \mathbf{K}_+ e outra para momentos próximos a \mathbf{K}_- . A velocidade das partículas próximas destes pontos é da ordem de $v_F \approx 8,5 \times 10^5$ m/s e, dentro da analogia com férmions de Dirac sem massa, representa uma “velocidade da luz” efetiva no sistema [9].

Podemos ainda reescrever os Hamiltoniano em torno de cada ponto de Dirac como [9]:

$$\mathcal{H}_\xi(\mathbf{p}) = v_F |\mathbf{p}| \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\xi\theta_{\mathbf{p}}} \\ e^{i\xi\theta_{\mathbf{p}}} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

onde $p_x + ip_y = \sqrt{p_x^2 + p_y^2} e^{i\theta_{\mathbf{p}}}$, $\theta_{\mathbf{p}} = \arctan(p_y/p_x)$, e $\xi = +1$ para \mathbf{K}_+ , $\xi = -1$ para \mathbf{K}_- . Esse Hamiltoniano é diagonalizado pelo operador unitário

$$U_\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\xi\theta_{\mathbf{p}}} & e^{-i\xi\theta_{\mathbf{p}}} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Dessa forma, verifica-se que a dispersão linear é explicitada como $E_s(\mathbf{p}) = sv_F |\mathbf{p}|$ (com $s = \pm 1$), evidenciando a simetria entre elétrons e buracos quando $t' = 0$. Para valores finitos de t' , esta simetria é quebrada e as bandas π e π^* tornam-se assimétricas [9, 50].

As matrizes de Pauli que aparecem na descrição efetiva de baixa energia atuam nos graus de liberdade de sub-rede em vez do spin, originando assim o termo pseudospin. Uma quantidade importante para caracterizar os autoestados é a helicidade [50]

$$\hat{h} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}, \quad (3.18)$$

que representa a projeção do operador de pseudospin $\boldsymbol{\sigma}$ na direção do momento. Pela definição acima, os estados representados por $\Psi_{\mathbf{K}_+}(\mathbf{r})$ e $\Psi_{\mathbf{K}_-}(\mathbf{r})$ são autoestados de \hat{h} ,

$$\hat{h} \Psi_{\mathbf{K}_\pm}(\mathbf{r}) = \pm \frac{1}{2} \Psi_{\mathbf{K}_\pm}(\mathbf{r}), \quad (3.19)$$

com equação análoga para $\Psi_{\mathbf{K}_+}(\mathbf{r})$, mas com o sinal invertido. Como \hat{h} comuta com o Hamiltoniano, a projeção do pseudospin é uma quantidade conservada, podendo ser positiva ou negativa, correspondendo a pseudospin e momento paralelos ou antiparalelos, dependendo da banda e do vale considerado [9].

3.2 Fracionalização de carga no grafeno com distorção de Kekulé

O mecanismo de fracionalização pode ser ilustrado considerando elétrons sem spin saltando em uma rede hexagonal com amplitudes de *tight-binding* texturizadas, descritas pelo Hamiltoniano [7]:

$$\hat{H} := - \sum_{\mathbf{r} \in \Lambda^A} \sum_{i=1}^3 (t_{r,i} + \delta t_{r,i}) \hat{a}_{\mathbf{r}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{r}+s_i} + \text{H.c.} \quad (3.20)$$

Aqui, s_i com $i = 1, 2, 3$ conecta qualquer sítio \mathbf{r} pertencente à sub-rede triangular Λ^A aos seus três vizinhos mais próximos da sub-rede triangular Λ^B . Os operadores $\hat{a}_{\mathbf{r}}$ e $\hat{b}_{\mathbf{r}}$, assim como seus adjuntos, atuam sobre as sub-redes Λ^A e Λ^B , respectivamente. Pequenas variações na amplitude de *hopping*, $\delta t_{r,i}$, sobre o valor uniforme t fornecem o fundo sobre o qual estados com carga fracionada podem ser construídos [7].

Vamos nos concentrar em campos de fundo que produzem uma mistura quiral entre as espécies \pm . Uma distorção de Kekulé, representada na Figura 1.4, é uma modulação da amplitude de *hopping* entre primeiros vizinhos que proporciona tal mistura. A modulação

$$\delta t_{r,i} := \frac{1}{3} \Delta(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}_+ \cdot s_i} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} + \text{c.c.}, \quad (3.21)$$

com o vetor de onda $\mathbf{G} := \mathbf{K}_+ - \mathbf{K}_-$, acopla os pontos de Dirac em \mathbf{K}_{\pm} , como mostrado na Fig. 3.3. Aqui, permitimos flutuações espaciais (em escalas de comprimento muito maiores que o espaçamento da rede a) do parâmetro de ordem complexo $\Delta(\mathbf{r})$. Expandindo o Hamiltoniano (3.20) sujeito à distorção de Kekulé (3.21) em potências de p até a ordem dominante, seu setor de baixa energia e longo comprimento de onda é capturado pelo Hamiltoniano efetivo [7]:

$$\hat{H}_{\text{eff}} := \int d^2\mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) \mathcal{H}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \quad (3.22)$$

com $\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}) := \left(u_b^{\dagger}(\mathbf{r}) \ u_a^{\dagger}(\mathbf{r}) \ v_a^{\dagger}(\mathbf{r}) \ v_b^{\dagger}(\mathbf{r}) \right) e$

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) := \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & \Delta(\mathbf{r}) & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & 0 & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & 0 & 0 & -p_x + ip_y \\ 0 & \Delta^*(\mathbf{r}) & -p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Sem a distorção de Kekulé (3.21) que leva a $\Delta(\mathbf{r})$, o Hamiltoniano (3.23) é simplesmente o Hamiltoniano relativístico de partícula única sem massa em um espaço-tempo 2+1 dimensional. Quando a distorção de Kekulé está presente, com $\Delta(\mathbf{r}) := \Delta_0$, a dispersão assume a forma simples $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + |\Delta_0|^2}$, ou seja, um *gap* de massa de partícula única $|\Delta_0|$ é aberto. O Hamiltoniano de Dirac (3.23) respeita a simetria de reversão temporal (TRS) [7]. Além disso, a lei de transformação sob $\hat{a}_{\mathbf{r}} \rightarrow -\hat{a}_{\mathbf{r}}$ e $\hat{b}_{\mathbf{r}+s_i} \rightarrow +\hat{b}_{\mathbf{r}+s_i}$ do Hamiltoniano de *tight-binding* de

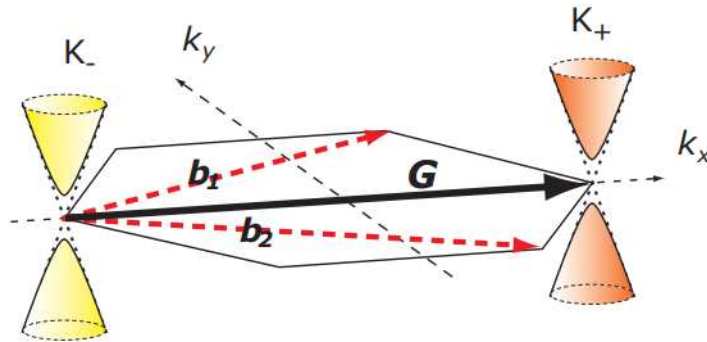


Figura 3.3: Primeira zona de Brillouin da rede triangular, mostrada juntamente com os pontos de Dirac K_{\pm} , o vetor recíproco \mathbf{G} que os conecta e a dispersão relativística massiva centrada em torno de K_{\pm} que se abre devido a uma distorção de Kekulé com $\Delta(r) = \Delta_0$. Fonte: adaptado de [7].

partícula única (3.20) assegura que qualquer autoestado de energia positiva de (3.23) pode ser associado a um autoestado de energia negativa, enquanto apenas modos zero podem ficar sem correspondência [7].

Vamos agora analisar o caso em que a fase do parâmetro de ordem $\Delta(\mathbf{r})$ varia no espaço e, em particular, contém vórtices. Assumimos que

$$\Delta(\mathbf{r}) := \Delta_0(r)e^{i(\alpha+n\theta)} \quad (3.24)$$

onde $\Delta_0(r) > 0$, $n \in \mathbb{Z}$ e utilizamos coordenadas polares. Buscamos autoestados normalizáveis do Hamiltoniano de Dirac (3.23) com energia tendendo a zero, de modo que as equações

$$\begin{aligned} (\partial_r - ir^{-1}\partial_\theta)u_a(\mathbf{r}) + ie^{i\theta}\Delta(\mathbf{r})v_a(\mathbf{r}) &= 0, \\ ie^{-i\theta}\Delta^*(\mathbf{r})u_a(\mathbf{r}) - (\partial_r + ir^{-1}\partial_\theta)v_a(\mathbf{r}) &= 0, \end{aligned} \quad (3.25)$$

valem na sub-rede Λ^A , enquanto duas outras equações, obtidas de (3.25) pelas substituições $u_a \rightarrow u_b$, $v_a \rightarrow v_b$ e $\theta \rightarrow -\theta$, valem na sub-rede Λ^B [7]. As mesmas equações foram estudadas nas Refs. [51, 52] sob uma perspectiva diferente, uma vez que o *gap* texturizado nesses trabalhos está associado a um parâmetro de ordem supercondutor.

Existem $|n|$ modos zero normalizáveis independentes [51, 52], que têm suporte na sub-rede Λ^A quando $n \leq -1$ ou na sub-rede Λ^B quando $n \geq 1$ [7]. Assumindo $n = -1$, as funções de onda normalizáveis e univalentes para o modo zero são

$$\begin{aligned} u_a(r, \theta) &= \frac{e^{i(\frac{\alpha}{2} + \frac{\pi}{4})}}{2\sqrt{\pi}} e^{-\int_0^r dr' \Delta_0(r')} \left(\int_0^\infty dr r e^{-2\int_0^r dr' \Delta_0(r')} \right)^{-1/2}, \\ v_a(r, \theta) &= \bar{u}_a(r, \theta). \end{aligned} \quad (3.26)$$

O suporte dessa solução está na sub-rede Λ^A . O modo zero para $n = 1$ é obtido da Eq. (3.26) pelas substituições $u_a(r, \theta) \rightarrow v_b(r, \theta)$ e $v_a(r, \theta) \rightarrow u_b(r, \theta)$. Nesse caso, o suporte do modo zero está na sub-rede Λ^B .

A função de onda (3.26) decai exponencialmente longe do núcleo do vórtice definido por $\Delta(\mathbf{r})$ na origem do plano complexo, e seu comprimento de localização é determinado pelo valor do *gap* Δ_0 . Se a distorção de Kekulé (3.21) suportar um par de vórtices suficientemente afastados, então o Hamiltoniano de Dirac (3.23) apresentará dois autoestados cujos autovalores de energia são exponencialmente pequenos [7].

Para obter a carga associada a um vórtice, consideramos a variação na densidade local de estados de partícula única do Hamiltoniano de Dirac (3.23) com ($|n| = 1$) e sem ($|n| = 0$) vórtice (3.24):

$$\delta\rho(\mathbf{r}, \varepsilon) := \rho_{|n|=1}(\mathbf{r}, \varepsilon) - \rho_{n=0}(\mathbf{r}, \varepsilon), \quad (3.27)$$

Devido à existência de simetria espectral (como pode ser visto na Eq. (5.12) no Capítulo 5), para qualquer autoestado negativo do Hamiltoniano de Dirac, $\Psi_{-\varepsilon}(\mathbf{r})$, existe um autoestado de energia positiva, $\Psi_{+\varepsilon}(\mathbf{r})$, relacionado a $\Psi_{-\varepsilon}(\mathbf{r})$ por uma transformação unitária. Assim, a densidade local de estados do nível de energia ε ,

$$\rho(\mathbf{r}, \varepsilon) := \sum_{\varepsilon'} \Psi_{\varepsilon'}^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_{\varepsilon'}(\mathbf{r}) \delta(\varepsilon - \varepsilon') \quad (3.28)$$

é simétrica em relação à energia zero, e os autoestados de energia negativa e positiva contribuem igualmente para a densidade local total integrada em energia [7].

Na presença de um único modo zero $\Psi_0(\mathbf{r})$ ligado ao vórtice com $|n| = 1$, a simetria espectral, juntamente com a conservação do número total de estados, de modo análogo à Eq. (2.162) implica [7]

$$\int d^2\mathbf{r} \left[2 \int_{-\infty}^{0^-} \delta\rho(\mathbf{r}, \varepsilon) d\varepsilon + |\Psi_0(\mathbf{r})|^2 \right] = 0. \quad (3.29)$$

Como o modo zero é normalizado para unidade, segue que

$$Q = \int d^2\mathbf{r} \int_{-\infty}^{0^-} \delta\rho(\mathbf{r}, \varepsilon) d\varepsilon = -\frac{1}{2}. \quad (3.30)$$

Esse resultado mostra que a diferença na carga líquida entre uma banda de valência totalmente ocupada com e sem o vórtice é $-\frac{1}{2}$.

É importante destacar que as condições físicas e matemáticas empregadas nesta seção — em particular, a simetria espectral do Hamiltoniano e a presença de um modo zero não pareado — são exatamente aquelas que serão buscadas na análise do modelo proposto para a superfície de isolantes topológicos tridimensionais. Dessa forma, o cálculo da carga fracionária, amplamente reproduzido na literatura [6, 7, 33, 64], é aqui tomado como referência direta para o efeito de

superfície a ser desenvolvido nas seções seguintes.

Capítulo 4

Isolantes topológicos tridimensionais

A estrutura eletrônica da classe de isolantes topológicos tridimensionais do Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 é suficientemente simples para ser capturada por um Hamiltoniano modelo simples, porém realista em que o acoplamento spin-órbita gera uma transição de inversão de bandas no ponto Γ [29, 30, 31, 32].

4.1 Modelo efetivo para estados de superfície

Vamos considerar um modelo efetivo para isolantes topológicos 3D, que pode ser usado, simplesmente ajustando os parâmetros, para estudar as propriedades de Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 . Esses materiais compartilham a mesma estrutura cristalina romboédrica com cinco átomos por célula unitária. Por exemplo, a estrutura cristalina do Bi_2Se_3 consiste em uma estrutura em camadas onde camadas individuais formam uma rede triangular. Os eixos de simetria importantes são: um eixo de simetria de rotação trigonal definido como eixo z , um eixo de simetria de rotação binária definido como eixo x , e um eixo bissectriz (no plano de reflexão) definido como eixo y . O material consiste em camadas de cinco átomos empilhadas ao longo do eixo trigonal, conhecidas como camadas quintuplas. Cada camada quintupla consiste em cinco átomos por célula unitária, com dois átomos equivalentes de Se denominados Se1 e $\text{Se1}'$, dois átomos de Bi denominados Bi1 e $\text{Bi1}'$, um Bi2 , e um terceiro átomo de Se denominado Se2 , como mostrado na Figura 4.1. O acoplamento entre duas camadas atômicas no interior de uma camada quintupla é forte, enquanto que as camadas quintuplas são mantidas juntas predominantemente por forças de van der Waals [31].

Para entender melhor a estrutura de bandas e os estados de superfície, começamos a partir dos níveis de energia atômicos e, em seguida, consideramos os efeitos do campo cristalino e do acoplamento spin-órbita (SOC) nos autovalores de energia no ponto Γ no espaço de momento. Isto é mostrado esquematicamente em três estágios: (I), (II) e (III) na Fig. 4.2. Como os estados próximos ao nível de Fermi derivam de orbitais p , desprezamos os orbitais s e focamos nos orbitais p do Bi (configuração eletrônica $6s^26p^3$) e Se ($4s^24p^4$) [31].

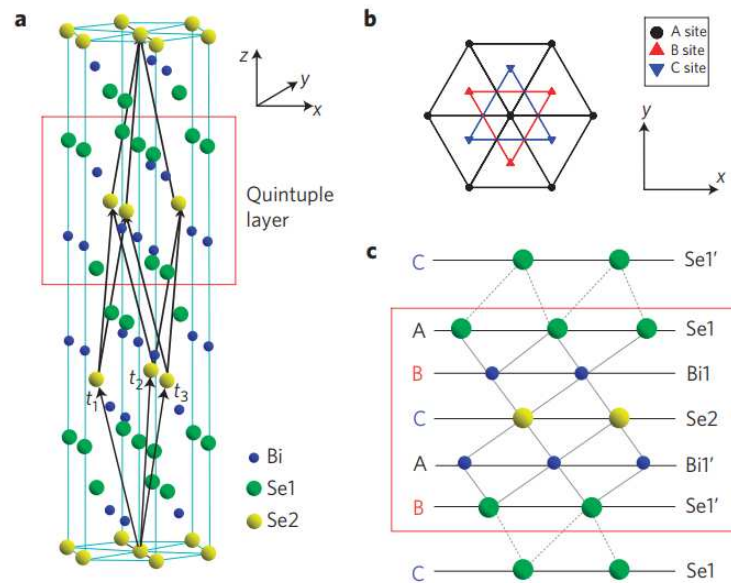


Figura 4.1: Estrutura cristalina do Bi_2Se_3 com três vetores primitivos de rede denotados por $t_{1,2,3}$. (a) Estrutura de uma camada quántupla com a sequência $\text{Se1}-\text{Bi1}-\text{Se2}-\text{Bi1}'-\text{Se1}'$, indicada pelo retângulo vermelho. (b) Vista superior ao longo da direção z . A rede triangular em uma camada quántupla possui três posições distintas, denotadas por A, B e C. (c) Vista lateral da estrutura de camada quántupla. Sob uma operação de inversão, na qual os átomos de Se2 atuam como centros de inversão, Bi1 é mapeado em Bi1' e Se1 é mapeado em Se1'. Fonte: adaptado de [29].

A ligação entre átomos de Bi e Se dentro de uma camada quántupla corresponde à maior escala de energia. A combinação dos orbitais na célula unitária de acordo com sua paridade resulta em três estados (dois ímpares, um par) de cada orbital p de Se e dois estados (um ímpar, um par) de cada orbital p de Bi [31]. A formação de ligações químicas hibridiza os estados nos átomos de Bi e Se, elevando todos os estados de Bi e abaixando todos os estados de Se. Na Fig. 4.2, esses novos estados hibridizados são rotulados como $|P1_{x,y,z}^{\pm}\rangle$, $|P2_{x,y,z}^{\pm}\rangle$, e $|P0_{x,y,z}^{-}\rangle$, onde os superescritos + e - indicam a paridade dos respectivos estados. No estágio (II), consideramos o efeito do *splitting* do campo cristalino entre diferentes orbitais p . O orbital p_z é separado dos orbitais p_x e p_y , enquanto estes permanecem degenerados. Após esse desdobramento, os níveis de energia mais próximos do nível de Fermi acabam sendo os orbitais p_z : $|P1_z^{\pm}\rangle$ e $|P2_z^{-}\rangle$. No último estágio (III), consideramos o efeito do acoplamento spin-órbita. O Hamiltoniano SOC atômico é dado por $H_{\text{SOC}} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, onde \mathbf{L} e \mathbf{S} são os momentos angulares orbital e de spin, respectivamente, e λ é a constante de acoplamento. O Hamiltoniano SOC mistura os momentos angulares orbital e de spin, mas preserva o momento angular total. A energia do estado $|P1_z^{\pm}, \uparrow (\downarrow)\rangle$ é empurrada para baixo pelo efeito do SOC, enquanto a energia do estado $|P2_z^{-}, \uparrow (\downarrow)\rangle$ é empurrada para cima. Se o SOC for maior que um valor crítico, $\lambda > \lambda_c$, a ordem destes níveis de energia é invertida [31]. Como esses dois níveis têm paridades opostas, a inversão entre eles leva o sistema a uma fase topológica não trivial.

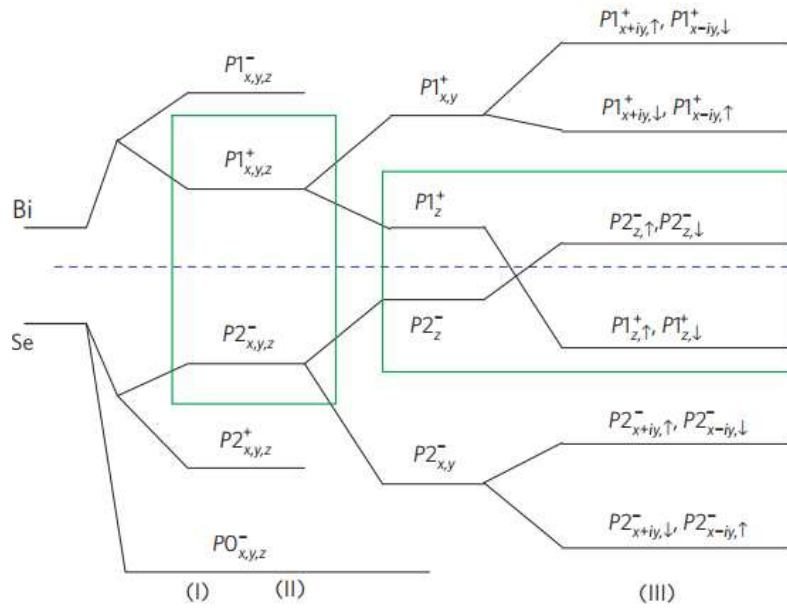


Figura 4.2: Representação esquemática da origem da estrutura de bandas do Bi_2Se_3 . Partindo dos orbitais atômicos de Bi e Se, são necessários três passos para entender a estrutura de bandas: (I) a hibridização dos orbitais de Bi e Se, (II) a formação dos estados ligantes e antiligantes devido à simetria de inversão, (III) a divisão por campo cristalino e a influência do acoplamento spin-órbita (SOC). A linha tracejada azul representa a energia de Fermi. Fonte: adaptado de [29].

Como a natureza topológica é determinada pela física próxima ao ponto Γ , é possível escrever um Hamiltoniano efetivo simples para caracterizar as propriedades de baixa energia e de longo comprimento de onda do sistema. As simetrias importantes do sistema são: simetria de reversão temporal \mathcal{T} , simetria de inversão \mathcal{I} e simetria de rotação trigonal C_3 ao redor do eixo z . Na base $\{|P1_z^+, \uparrow\rangle, |P2_z^-, \uparrow\rangle, |P1_z^+, \downarrow\rangle, |P2_z^-, \downarrow\rangle\}$, a representação dessas operações de simetria é dada por

$$\mathcal{T} = i\sigma^y \mathcal{K} \otimes \mathbb{1}_{2 \times 2}, \quad \mathcal{I} = \mathbb{1}_{2 \times 2} \otimes \tau_3, \quad C_3 = \exp \left[i \frac{\pi}{3} (\sigma^z \otimes \mathbb{1}_{2 \times 2}) \right], \quad (4.1)$$

onde \mathcal{K} é o operador de conjugação complexa, e σ^i e τ^i denotam as matrizes de Pauli nos espaços de spin e orbital, respectivamente. Exigindo essas três simetrias e mantendo apenas termos até ordem quadrática em \mathbf{k} , obtém-se a seguinte forma geral para o Hamiltoniano efetivo [31]:

$$H(\mathbf{k}) := \varepsilon_0(\mathbf{k}) \mathbb{1}_{4 \times 4} + \begin{pmatrix} \mathcal{M}(\mathbf{k}) & A_1 k_z & 0 & A_2 k_- \\ A_1 k_z & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) & A_2 k_- & 0 \\ 0 & A_2 k_+ & \mathcal{M}(\mathbf{k}) & -A_1 k_z \\ A_2 k_+ & 0 & -A_1 k_z & -\mathcal{M}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

com $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = C + D_1 k_z^2 + D_2 (k_x^2 + k_y^2)$ e $\mathcal{M}(\mathbf{k}) = M - B_1 k_z^2 - B_2 (k_x^2 + k_y^2)$. Os parâmetros do modelo podem ser determinados ajustando-se à estrutura de bandas obtida por cálculos *ab initio* [29, 30]. Exceto pelo termo identidade $\varepsilon_0(\mathbf{k})$, o Hamiltoniano (4.2) é similar

ao modelo de Dirac 3D com anisotropia uniaxial ao longo da direção z , mas com a diferença crucial de que o termo de massa é dependente de \mathbf{k} . Além disso, a massa de Dirac M , isto é, o *gap* isolante de *bulk* é $\sim 0,3$ eV, o que permite a possibilidade de um isolante topológico estável à temperatura ambiente [31]. Tal modelo efetivo pode ser usado para estudos teóricos do sistema Bi_2Se_3 , desde que apenas as propriedades de baixa energia estejam em questão.

Correções ao Hamiltoniano efetivo (4.2) de ordem superior em \mathbf{k} também podem ser consideradas. Uma versão modificada do modelo efetivo (4.2), levando em conta correções até k^3 , foi obtida para os três isolantes topológicos Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 e Sb_2Te_3 , baseada em cálculos *ab initio* [30, 31].

A existência de estados de superfície topológicos é uma das propriedades mais importantes dos isolantes topológicos. Considerando o modelo efetivo (4.2) no semi-espaco $z > 0$, pode-se dividir o Hamiltoniano em duas partes:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= \tilde{\varepsilon}(k_z) + \begin{pmatrix} \tilde{M}(k_z) & A_1 k_z & 0 & 0 \\ A_1 k_z & -\tilde{M}(k_z) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{M}(k_z) & -A_1 k_z \\ 0 & 0 & -A_1 k_z & -\tilde{M}(k_z) \end{pmatrix} \\ \tilde{H}_1 &= D_2 k_{\perp}^2 + \begin{pmatrix} -B_2 k_{\perp}^2 & 0 & 0 & A_2 k_{-} \\ 0 & B_2 k_{\perp}^2 & A_2 k_{-} & 0 \\ 0 & A_2 k_{+} & -B_2 k_{\perp}^2 & 0 \\ A_2 k_{+} & 0 & 0 & B_2 k_{\perp}^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.3)$$

com $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$, $\tilde{\varepsilon}(k_z) = C + D_1 k_z^2$, e $\tilde{M}(k_z) = M - B_1 k_z^2$. Uma solução de superfície existe para $M/B_1 > 0$. A helicidade do spin é determinada pelo sinal do parâmetro A_1/B_1 , que depende de propriedades do material, como o acoplamento spin-órbita atômico (SOC). Na família de materiais Bi_2Se_3 , o cone superior de Dirac apresenta helicidade canhota quando observado de cima da superfície (ver Figura 1.5). Aqui, sempre assumimos $B_1 B_2 > 0$, $A_1 A_2 > 0$ [31].

Projetando o Hamiltoniano de *bulk* sobre o subespaço dos estados de superfície, obtém-se o modelo efetivo para os estados de superfície com a forma [31]:

$$H_{\text{surf}}(k_x, k_y) = C + A_2(k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) \quad (4.4)$$

Vemos, então, que o estado de superfície é descrito por um Hamiltoniano de Dirac 2D sem massa. Termos de ordem superior, como k^3 , quebram a simetria axial em torno do eixo z para uma simetria de rotação trigonal discreta, levando a uma anisotropia hexagonal na superfície de Fermi [30, 61].

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo, apresentamos os principais resultados da investigação acerca dos mecanismos de fracionalização de carga em isolantes topológicos tridimensionais (ITs 3D), seguindo a proposta delineada na introdução desta dissertação. O objetivo central é analisar em que medida a adaptação de modelos teóricos consolidados para fracionalização em sistemas unidimensionais e bidimensionais pode ser empregada para descrever um fenômeno análogo em ITs 3D.

Para explorar o fenômeno de fracionalização de carga em ITs 3D, é fundamental examinar de forma criteriosa quais aspectos do mecanismo de fracionalização são essenciais e como as correspondências formais com modelos já consagrados na literatura (como os de Seradjeh et al. [64] e Hou et al. [7]) se estabelecem. A pertinência dessas conexões reside no fato de que, ao realizar transformações adequadas, torna-se possível adaptar argumentos matemáticos já validados para sustentar a emergência de modos zero localizados e isolados no espectro de energia e, conseqüentemente, de estados fracionários na superfície de ITs 3D.

5.1 Modelo proposto

Partimos de um modelo efetivo para os estados de superfície de isolantes topológicos tridimensionais, amplamente aceito para materiais como Bi_2Se_3 e Bi_2Te_3 [31], como o modelo expresso na Eq. (4.4). O Hamiltoniano efetivo que descreve a dinâmica dos estados de superfície próximo ao ponto Γ , na ordem dominante no momento, pode ser escrito como:

$$H_{\text{surf}}(\mathbf{p}) = v(\sigma^x p_y - \sigma^y p_x), \quad (5.1)$$

em que σ^x e σ^y são matrizes de Pauli que atuam sobre o spin real do elétron na superfície, e v representa a velocidade do estado de Dirac superficial. Este Hamiltoniano corresponde à dispersão linear característica de férmions de Dirac 2D, conforme já discutido anteriormente.

A abordagem adotada para investigar a fracionalização de carga na superfície de ITs 3D é fundamentada na possibilidade de se introduzir um termo adicional no Hamiltoniano efetivo dos estados de superfície que desempenha o papel de um acoplamento à função de onda de

superfície, e que pode, em princípio, adquirir perfis não triviais, tais como vórtices topológicos.

A motivação central para a escolha de uma estrutura adequada do Hamiltoniano para nossa investigação, que seja passível de ser realizado experimentalmente, vem do modelo proposto por Fu e Kane [54], que consideraram a deposição de um supercondutor convencional sobre a superfície de um IT 3D. Conforme apresentado por Fu e Kane, o Hamiltoniano efetivo dos estados de superfície de um isolante topológico como o Bi_2Se_3 , que possui um único cone de Dirac na superfície, pode ser escrito de forma compacta como:

$$H = \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^{\dagger} [v(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \cdot \hat{\mathbf{z}} - \mu] \psi_{\mathbf{p}}, \quad (5.2)$$

onde $\psi_{\mathbf{p}} = (\psi_{\mathbf{p}\uparrow}, \psi_{\mathbf{p}\downarrow})^T$ representa os operadores de campo dos elétrons superficiais, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ são as matrizes de Pauli do spin e um potencial químico μ foi incluído. Quando um supercondutor onda s é depositado sobre a superfície do isolante topológico, pelo efeito de proximidade, pares de Cooper podem tunelar para os estados superficiais [31, 54, 55, 63]. O termo de pareamento correspondente é descrito por

$$V = \Delta \psi_{\mathbf{p}\uparrow}^{\dagger} \psi_{-\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger} + \text{H.c.}, \quad (5.3)$$

sendo que o parâmetro de ordem supercondutor $\Delta = \Delta_0 e^{i\phi}$ depende da natureza da interface.

Os estados de superfície podem, então, ser descritos por meio do Hamiltoniano de Bogoliubov–de Gennes (BdG):

$$H_{\text{BdG}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^{\dagger} H_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}, \quad (5.4)$$

onde, na notação de Nambu, $\Psi_{\mathbf{p}} = (\psi_{\mathbf{p}\uparrow}, \psi_{\mathbf{p}\downarrow}, \psi_{\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger}, -\psi_{\mathbf{p}\uparrow}^{\dagger})^T$, e

$$H_{\mathbf{p}} \equiv \begin{pmatrix} v(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \cdot \hat{\mathbf{z}} - \mu & \Delta \\ \Delta^* & -v(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \mu \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Observa-se invariância sob reversão temporal que decorre do fato de que $[\Theta, H_{\mathbf{p}}] = 0$, onde $\Theta = i\sigma^y \mathcal{K}$ e \mathcal{K} representa o operador de conjugação complexa. A simetria de partícula-buraco é expressa por $\Xi = \sigma^y \tau^y \mathcal{K}$, que satisfaz $\{\Xi, H_{\mathbf{p}}\} = 0$.

Quando Δ é espacialmente homogêneo, o espectro de excitação é:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{(\pm v|\mathbf{k}| - \mu)^2 + \Delta_0^2}. \quad (5.6)$$

Para $\mu \gg \Delta_0$, o espectro de baixa energia se assemelha ao de um supercondutor (sem spin) $p_x + ip_y$.

Baseado no que foi exposto, para os propósitos deste trabalho, propomos a análise do modelo

descrito pelo seguinte Hamiltoniano ($v = 1$):

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -\mu & \hat{p}_y + i\hat{p}_x & \Delta & 0 \\ \hat{p}_y - i\hat{p}_x & -\mu & 0 & \Delta \\ \Delta^* & 0 & \mu & -(\hat{p}_y + i\hat{p}_x) \\ 0 & \Delta^* & -(\hat{p}_y - i\hat{p}_x) & \mu \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Com base na formulação acima, propomos que o mecanismo de fracionalização de carga ocorra por meio da proximidade de um supercondutor de tipo II depositado sobre a superfície de um isolante topológico tridimensional. Em um supercondutor tipo II, quando submetido a um campo magnético externo acima de um valor limiar, forma-se uma rede de vórtices quantizados — cada vórtice transporta um *quantum* de fluxo magnético [11]. Em nossa heteroestrutura, os portadores de superfície do isolante topológico interagem com esses vórtices na interface da forma descrita pelo Hamiltoniano da Eq. (5.7). É por meio dessa interação — codificada no termo de acoplamento Δ com textura de vórtice — que se espera a geração de estados localizados e a eventual fracionalização de carga na superfície do isolante topológico.

Do ponto de vista experimental, é fundamental avaliar cuidadosamente as condições da interface entre o isolante topológico e o supercondutor, em particular, os fatores que possam afetar os portadores da superfície. Por exemplo, o próprio campo magnético requerido para nucleação dos vórtices pode alterar as propriedades da superfície do isolante (como mobilidade, densidade de portadores ou abertura de *gap*), o que por sua vez pode modificar o cenário de fracionalização. A análise desses fatores não foi abordada nesta pesquisa e devem ser considerados em trabalhos futuros.

A fim de investigar a possível existência de modos zero ligados ao vórtice, reformulamos o Hamiltoniano (5.7) por transformações unitárias de base, conforme detalhado nos cálculos seguintes, de modo a evidenciar sua equivalência formal com o modelo previamente discutido para o grafeno com distorção de Kekulé e outros sistemas bidimensionais. Essa estratégia permite mapear explicitamente o Hamiltoniano de superfície do IT 3D com termo de massa topológico, em modelos onde a fracionalização de carga foi rigorosamente demonstrada. Assim, torna-se legítimo esperar a existência de modos localizados e possivelmente de estados fracionários também no contexto de isolantes topológicos 3D.

Seja U uma matriz diagonal unitária com entradas complexas apropriadas (os detalhes exatos variam conforme o modelo alvo para o qual se deseja realizar o mapeamento). Um exemplo relevante é:

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \end{pmatrix},$$

cujos efeitos sobre o Hamiltoniano na Eq. (5.7) é trocar $\sigma_x \rightarrow \sigma_y$ e $\sigma_y \rightarrow -\sigma_x$ nos operadores

cinéticos nos blocos diagonais. Aplicando esta transformação,

$$\mathcal{H}' = U^\dagger \mathcal{H} U,$$

obtém-se explicitamente:

$$\mathcal{H}' = \begin{pmatrix} -\mu & \hat{p}_x - i\hat{p}_y & \Delta & 0 \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & -\mu & 0 & \Delta \\ \Delta^* & 0 & \mu & -(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ 0 & \Delta^* & -(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & \mu \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Esta nova forma torna explícita a relação do modelo para a superfície do IT 3D com Hamiltonianos investigados em outros contextos, mostrando-se formalmente equivalente ao modelo de Hou, Chamon e Mudry para redes tipo grafeno [7], especificamente no limite $\mu = 0$, ou, de forma mais geral, ao modelo investigado por Seradjeh et al. [64] de bicamada de grafeno, cuja teoria de baixas energias é descrita pelo Hamiltoniano:

$$\gamma_0 (\gamma_1 \hat{p}_x + \gamma_2 \hat{p}_y + V \gamma_0 \gamma_5 + |m| e^{-i\gamma_5 \chi}), \quad (5.9)$$

em que V representa uma diferença de potencial ou desbalanceamento entre as camadas e $m(\mathbf{r})$ pode portar vorticidade, com a identificação $V \leftrightarrow -\mu$, $m \leftrightarrow \Delta$, permitindo aproveitar o ferramental analítico desenvolvido nesses contextos.

O motivo pelo qual este mapeamento unitário é central para nossa análise está no fato de que, nos modelos originais está rigorosamente demonstrado que um perfil de vórtice para o termo de massa conduz à existência de modos zero eletrônicos ligados ao núcleo do vórtice, que são robustos devido a uma combinação de simetrias espectrais do Hamiltoniano [7, 64].

As análises precedentes sugerem que, caso o termo de acoplamento Δ apresente um perfil de vórtice, o Hamiltoniano efetivo da superfície do IT 3D apresenta autoestados de energia zero associados ao núcleo desses defeitos topológicos. De fato, como mostraremos a seguir, o modelo para a superfície do IT 3D, quando sujeito a tal configuração topológica, possui estrutura matemática idêntica à explorada nos trabalhos mencionados no que diz respeito ao espectro de energia e à simetria de pares de níveis, o que sustenta (exceto por detalhes de outros termos subdominantes) a transferibilidade dos argumentos sobre fracionalização de carga.

5.1.1 Análise detalhada da existência e estrutura dos modos zero

Nesta seção, apresentamos de forma rigorosa e detalhada a sequência lógica dos cálculos essenciais para sustentar a possibilidade de fracionalização de carga em estados de superfície de isolantes topológicos 3D. Segue-se e aprofunda-se o roteiro delineado anteriormente e em referências-chave da literatura [7, 31, 54, 64], agora com ênfase nos aspectos matemáticos.

Precisamos comprovar que a estrutura do Hamiltoniano preserva as condições necessárias

para a existência de modos zero localizados desde que o termo de massa tenha estrutura topológica. Primeiramente, observamos que o espectro de \mathcal{H} é simétrico em relação à energia zero. Esta simetria é fornecida pelo operador antiunitário $\Omega \equiv \gamma_2 \mathcal{K}$, onde \mathcal{K} é o operador de conjugação complexa, uma vez que $\{\Omega, \mathcal{H}\} = 0$. Para demonstrar essa propriedade de forma explícita, verificaremos que $\gamma_2 \mathcal{H}^* \gamma_2 = \mathcal{H}$. A matriz γ_2 na representação de Weyl é

$$\gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

e, calculamos $\gamma_2 \mathcal{H}^*$:

$$\begin{aligned} \gamma_2 \mathcal{H}^* &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mu & -\hat{p}_x - i\hat{p}_y & \Delta^* & 0 \\ -\hat{p}_x + i\hat{p}_y & -\mu & 0 & \Delta^* \\ \Delta & 0 & \mu & -(-\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ 0 & \Delta & -(-\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & \mu \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -i\Delta & i(-\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & -i\mu \\ i\Delta & 0 & i\mu & -i(-\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ i(-\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & -i\mu & 0 & i\Delta^* \\ i\mu & -i(-\hat{p}_x - i\hat{p}_y) & -i\Delta^* & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Agora, multiplicando à direita por γ_2 , encontramos que

$$\gamma_2 \mathcal{H}^* \gamma_2 = \begin{pmatrix} -\mu & -(-\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & \Delta & 0 \\ -(-\hat{p}_x - i\hat{p}_y) & -\mu & 0 & \Delta \\ \Delta^* & 0 & \mu & -\hat{p}_x + i\hat{p}_y \\ 0 & \Delta^* & -\hat{p}_x - i\hat{p}_y & \mu \end{pmatrix} = \mathcal{H}.$$

Além disso, $\gamma_2^2 = -\mathbb{1}$, de modo que

$$\Omega \mathcal{H} + \mathcal{H} \Omega = \gamma_2 \mathcal{K} \mathcal{H} + \mathcal{H} \gamma_2 \mathcal{K} = \gamma_2 \mathcal{H}^* \mathcal{K} + \mathcal{H} \gamma_2 \mathcal{K} = \gamma_2 \mathcal{H}^* \mathcal{K} + (-\gamma_2 \mathcal{H}^*) \mathcal{K} = 0.$$

Logo,

$$\{\Omega, \mathcal{H}\} = 0. \quad (5.10)$$

Como consequência, se ψ_E é um autoestado de \mathcal{H} com energia E , então $\Omega \psi_E = \gamma_2 \psi_E^*$ satisfaz

$$\mathcal{H} \Omega \psi_E = -E \Omega \psi_E.$$

Para mostrar isso, suponha que $\mathcal{H}\psi_E = E\psi_E$. Tomando o conjugado complexo, temos

$$\mathcal{H}^*\psi_E^* = E\psi_E^*.$$

Multiplicando ambos os lados por γ_2 , obtemos

$$\gamma_2\mathcal{H}^*\psi_E^* = E\gamma_2\psi_E^*.$$

Como $\gamma_2^2 = -\mathbb{1}$, temos que $\gamma_2\mathcal{H}^* = -\mathcal{H}\gamma_2$ e, então,

$$\mathcal{H}(\gamma_2\psi_E^*) = -E(\gamma_2\psi_E^*).$$

Portanto, $\Omega\psi_E$ é um autoestado de energia $-E$.

Quando $\mu = 0$ formalmente, há outro operador unitário, $\gamma_0\gamma_3$, que anticomuta com \mathcal{H} . Nesse caso, o Hamiltoniano da Eq. (5.8) assume a forma

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y & \Delta & 0 \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 & 0 & \Delta \\ \Delta^* & 0 & 0 & -(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ 0 & \Delta^* & -(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 \end{pmatrix},$$

e temos

$$\gamma_0\gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\gamma_0\gamma_3)^2 = \mathbb{1}.$$

Assim, encontramos que

$$\begin{aligned} (\gamma_0\gamma_3 \mathcal{H}) (\gamma_0\gamma_3) &= \begin{pmatrix} 0 & -(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) & -\Delta & 0 \\ \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 & 0 & \Delta \\ \Delta^* & 0 & 0 & -(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ 0 & -\Delta^* & \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -(\hat{p}_x - i\hat{p}_y) & -\Delta & 0 \\ -(\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 & 0 & -\Delta \\ -\Delta^* & 0 & 0 & \hat{p}_x - i\hat{p}_y \\ 0 & -\Delta^* & \hat{p}_x + i\hat{p}_y & 0 \end{pmatrix} = -\mathcal{H}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Portanto,

$$\gamma_0\gamma_3 \mathcal{H} = -\mathcal{H} \gamma_0\gamma_3 \quad \implies \quad \{\gamma_0\gamma_3, \mathcal{H}\} = 0. \quad (5.12)$$

Para $\mu \neq 0$, por outro lado, Ω é o único operador que anticomuta.

O que nós esperamos, do mapeamento unitário que foi feito, é que

Consideramos um vórtice no parâmetro de pareamento,

$$\Delta(\mathbf{r}) = \Delta(r)e^{in\theta}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (5.13)$$

onde n é a vorticidade, com os valores assintóticos:

$$\begin{aligned} \Delta(r) &\rightarrow \Delta_0 r^{|n|}, \quad \text{para } r \rightarrow 0, \\ \Delta(r) &\rightarrow \Delta_\infty, \quad \text{para } r \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Como já notamos anteriormente, para $\mu = 0$, a Eq. (5.8) com a textura de vórtice formalmente coincide com a Hamiltoniana estudada nas Refs. [7, 8], situação que sabemos levar à existência de $|n|$ modos zero localizados para um vórtice de ordem n e, mais especificamente, a um modo zero único no centro do *gap* para $n = \pm 1$. Uma vez que o sistema também apresenta a simetria espectral mostrada anteriormente, é esperado uma carga fracionária $\pm e/2$ associada ao vórtice, neste limite, ou seja, quando $\mu \rightarrow 0$.

Quando $\mu \neq 0$ e quando o tamanho do núcleo do vórtice é desprezivelmente pequeno, para encontrar as soluções de energia zero ψ_0 satisfazendo $\mathcal{H}\psi_0 = 0$, podemos considerar $|\Delta(r)|$ como uma constante, Δ_∞ . Ou seja, limitamo-nos aqui, por simplicidade, ao caso em que $\Delta(r \neq 0, \theta) = \Delta_\infty e^{in\theta}$. O caso de um vórtice mais geral radialmente simétrico poderia, a princípio, ser tratado de forma semelhante.

No subespaço de energia zero, $[\mathcal{H}, \Omega] = 0$. Como resultado, podemos escolher $\Omega\psi_0 = \psi_0$. Vamos mostrar que os autoestados de energia zero ψ_0 da hamiltoniana \mathcal{H} podem ser escritos em uma forma específica quando satisfazem a condição $\Omega\psi_0 = \psi_0$.

Um autoestado genérico de \mathcal{H} com energia zero pode ser escrito como $\psi_0 = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)^T$. Aplicando $\Omega = \gamma_2 \mathcal{H}$ a ψ_0 :

$$\Omega\psi_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^* \\ \psi_2^* \\ \psi_3^* \\ \psi_4^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i\psi_4^* \\ i\psi_3^* \\ i\psi_2^* \\ -i\psi_1^* \end{pmatrix}.$$

A escolha $\Omega\psi_0 = \psi_0$ então implica que:

$$\begin{cases} \psi_1 = -i\psi_4^* \\ \psi_2 = i\psi_3^* \\ \psi_3 = i\psi_2^* \\ \psi_4 = -i\psi_1^* \end{cases}$$

Vamos verificar que essas relações são consistentes. Da terceira equação: $\psi_3 = i\psi_2^*$. Substituindo na segunda: $\psi_2 = i\psi_3^* = i(i\psi_2^*)^* = i(-i\psi_2) = \psi_2$. De modo análogo: $\psi_4 = -i\psi_1^*$, e $\psi_1 = -i\psi_4^* = -i(+i\psi_1) = \psi_1$.

Portanto, introduzindo as funções complexas arbitrárias $f \equiv \psi_1$ e $g \equiv \psi_2$, a forma mais geral de ψ_0 que satisfaz $\Omega\psi_0 = \psi_0$ é:

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} f \\ g \\ ig^* \\ -if^* \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

As derivadas parciais em coordenadas polares são dadas por:

$$\begin{aligned} \partial_x &= \cos \theta \partial_r - \frac{\sin \theta}{r} \partial_\theta, \\ \partial_y &= \sin \theta \partial_r + \frac{\cos \theta}{r} \partial_\theta. \end{aligned}$$

Logo, temos

$$\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y = -i \left[\cos \theta \partial_r - \frac{\sin \theta}{r} \partial_\theta \pm i \left(\sin \theta \partial_r + \frac{\cos \theta}{r} \partial_\theta \right) \right]$$

e, simplificando:

$$\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y = -ie^{\pm i\theta} \left(\partial_r \pm \frac{i}{r} \partial_\theta \right). \quad (5.16)$$

Substituindo as expressões acima na Hamiltoniana (5.8), obtemos:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -\mu & -ie^{-i\theta} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta \right) & \Delta & 0 \\ -ie^{i\theta} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta \right) & -\mu & 0 & \Delta \\ \Delta^* & 0 & \mu & ie^{-i\theta} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta \right) \\ 0 & \Delta^* & ie^{i\theta} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta \right) & \mu \end{pmatrix}.$$

A equação $\mathcal{H}\psi_0 = 0$ gera as quatro equações seguintes:

$$\begin{aligned} -\mu f - ie^{-i\theta} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta \right) g + \Delta(ig^*) &= 0, \\ -ie^{i\theta} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta \right) f - \mu g + \Delta(-if^*) &= 0, \\ \Delta^* f + \mu(ig^*) + ie^{-i\theta} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta \right) (-if^*) &= 0, \\ \Delta^* g + ie^{i\theta} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta \right) (ig^*) + \mu(-if^*) &= 0. \end{aligned}$$

Multiplicando a primeira e a segunda equações por i , e substituindo $\Delta = \Delta_\infty e^{in\theta}$, chegamos à

duas equações diferenciais acopladas para as componentes:

$$e^{i\theta} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta \right) f + \Delta_\infty e^{in\theta} f^* - i\mu g = 0, \quad (5.17)$$

$$e^{-i\theta} \left(\partial_r - \frac{i}{r} \partial_\theta \right) g - \Delta_\infty e^{in\theta} g^* - i\mu f = 0. \quad (5.18)$$

Podemos tomar $\Delta_\infty \in \mathbb{R}$ sem perda de generalidade, já que qualquer fase constante $e^{i\alpha}$ de Δ_∞ pode ser absorvida por f, g . Assumimos o seguinte *ansatz* para as componentes da função de onda:

$$f(r, \theta) = F(r)e^{ia\theta}, \quad g(r, \theta) = G(r)e^{ib\theta}. \quad (5.19)$$

Substituindo na Eq. (5.17):

$$\begin{aligned} e^{i\theta} \left(\partial_r + \frac{i}{r} \partial_\theta \right) \left(F(r)e^{ia\theta} \right) + \Delta_\infty e^{in\theta} \left(F^*(r)e^{-ia\theta} \right) - i\mu \left(G(r)e^{ib\theta} \right) &= 0 \\ e^{i\theta} \left(F'(r)e^{ia\theta} + \frac{i}{r} \cdot iaF(r)e^{ia\theta} \right) + \Delta_\infty F^*(r)e^{i(n-a)\theta} - i\mu G(r)e^{ib\theta} &= 0 \\ e^{i(1+a)\theta} \left(F'(r) - \frac{a}{r} F(r) \right) + \Delta_\infty F^*(r)e^{i(n-a)\theta} - i\mu G(r)e^{ib\theta} &= 0. \end{aligned}$$

Analogamente, a equação (5.18) torna-se:

$$\left(G'(r) + \frac{b}{r} G(r) \right) e^{i(b-1)\theta} - \Delta_\infty G^*(r)e^{i(n-b)\theta} - i\mu F(r)e^{ia\theta} = 0.$$

Agora, note que podemos fazer todas as fases nas equações anteriores coincidirem se tomarmos:

$$a + 1 = n - a = b \Rightarrow a = \frac{n-1}{2}, \quad b = \frac{n+1}{2}. \quad (5.20)$$

Esta escolha garante que todos os termos tenham a mesma dependência angular, permitindo cancelar o fator exponencial comum e obter um sistema puramente radial. As equações radiais resultantes são:

$$F'(r) - \frac{a}{r} F(r) + \Delta_\infty F^*(r) - i\mu G(r) = 0, \quad (5.21)$$

$$G'(r) + \frac{b}{r} G(r) - \Delta_\infty G^*(r) - i\mu F(r) = 0. \quad (5.22)$$

A solução proposta para a parte radial, inspirada pela Ref. [64], assume a forma:

$$F(r) = e^{-\Delta_\infty r} J_a(\mu r), \quad G(r) = i e^{-\Delta_\infty r} J_b(\mu r), \quad (5.23)$$

onde J_ν é a função de Bessel de primeira espécie. Note que, para n par, a e b na Eq. (5.20) seriam semi-inteiros, e não há solução de valor único nesse caso. Portanto, soluções fisicamente aceitáveis só existem para vorticidade n ímpar.

Substituindo $F(r)$ e $G(r)$ dados pela Eq. (5.23) em (5.21):

$$\frac{d}{dr} \left(e^{-\Delta_\infty r} J_a(\mu r) \right) - \frac{a}{r} e^{-\Delta_\infty r} J_a(\mu r) + \Delta_\infty e^{-\Delta_\infty r} J_a(\mu r) - i\mu \left(i e^{-\Delta_\infty r} J_b(\mu r) \right) = 0.$$

Simplificando,

$$e^{-\Delta_\infty r} \left[-\Delta_\infty J_a(\mu r) + \mu J'_a(\mu r) - \frac{a}{r} J_a(\mu r) + \Delta_\infty J_a(\mu r) + \mu J_b(\mu r) \right] = 0,$$

isto é,

$$\mu J'_a(\mu r) - \frac{a}{r} J_a(\mu r) + \mu J_b(\mu r) = 0. \quad (5.24)$$

Por outro lado, substituindo as expressões na Eq. (5.23) em (5.22):

$$\frac{d}{dr} \left(i e^{-\Delta_\infty r} J_b(\mu r) \right) + \frac{b}{r} i e^{-\Delta_\infty r} J_b(\mu r) - \Delta_\infty \left(-i e^{-\Delta_\infty r} J_b(\mu r) \right) - i\mu e^{-\Delta_\infty r} J_a(\mu r) = 0,$$

o que dá

$$i e^{-\Delta_\infty r} \left[-\Delta_\infty J_b(\mu r) + \mu J'_b(\mu r) + \frac{b}{r} J_b(\mu r) + \Delta_\infty J_b(\mu r) - \mu J_a(\mu r) \right] = 0,$$

e, portanto,

$$\mu J'_b(\mu r) + \frac{b}{r} J_b(\mu r) - \mu J_a(\mu r) = 0. \quad (5.25)$$

Da seguinte relação de recorrência para funções de Bessel de primeira espécie [65],

$$\frac{d}{dx} J_\nu(x) = \frac{1}{2} [J_{\nu-1}(x) - J_{\nu+1}(x)],$$

temos

$$J'_a(\mu r) = \frac{1}{2} [J_{a-1}(\mu r) - J_{a+1}(\mu r)], \quad J'_b(\mu r) = \frac{1}{2} [J_{b-1}(\mu r) - J_{b+1}(\mu r)].$$

Inserindo em (5.24) e usando $b = a + 1$,

$$\mu \left(\frac{J_{a-1} - J_{a+1}}{2} \right) - \frac{a}{r} J_a + \mu J_{a+1} = 0 \Rightarrow J_{a-1} + J_{a+1} = \frac{2a}{\mu r} J_a.$$

De modo análogo, de (5.25) com $b = a + 1$,

$$J_{b-1} + J_{b+1} = \frac{2b}{\mu r} J_b.$$

Essas são exatamente as relações de recorrência [65]

$$J_{\nu-1}(x) + J_{\nu+1}(x) = \frac{2\nu}{x} J_\nu(x),$$

confirmando a consistência da solução (5.23) e demonstrando rigorosamente a existência dos modos zero ligados ao núcleo do vórtice. A solução para o modo zero pode, portanto, ser expressa como

$$\psi_0(r, \theta) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} F(r)e^{ia\theta} \\ G(r)e^{ib\theta} \\ iG^*(r)e^{-ib\theta} \\ -iF^*(r)e^{-ia\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

em que a e b são determinados pela relação

$$a = \frac{n-1}{2}, \quad b = \frac{n+1}{2}, \quad (5.27)$$

e as partes radiais são dadas por

$$F(r) = e^{-\Delta_\infty r} J_a(\mu r), \quad G(r) = i e^{-\Delta_\infty r} J_b(\mu r), \quad (5.28)$$

sendo J_ν a função de Bessel de primeira espécie. A constante \mathcal{N} é obtida a partir da condição de normalização

$$\int d^2r \psi_0^\dagger \psi_0 = 1. \quad (5.29)$$

Os resultados obtidos indicam de forma clara a presença de modos zero localizados no núcleo de vórtices do parâmetro de acoplamento, isolados no interior do *gap* do espectro de excitações. O paralelismo com o caso do grafeno com distorção de Kekulé [6, 7] agora é evidente: em ambos os sistemas, o defeito de fase no parâmetro de acoplamento induz a modificação local do espectro eletrônico, abrindo um *gap* e permitindo o aprisionamento de um modo zero. Na presença de um único modo zero, a simetria espectral do Hamiltoniano, expressa pela Eq. (5.10) no presente modelo, garante que os modos de energia $\pm E$ aparecem em pares, de modo que o único estado não pareado é o modo zero. Assim, a ocupação desse modo zero determina diretamente a carga associada ao defeito. Nesse contexto, o sinal da carga depende da escolha de ocupação: ocupando o modo zero, obtém-se uma carga fracionária $+e/2$; deixando-o vazio, obtém-se $-e/2$. Esse resultado independe de detalhes microscópicos, sendo determinado apenas pela topologia do defeito e pela estrutura de acoplamento no Hamiltoniano.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas futuras

O contexto desenvolvido nesta dissertação demonstra, de maneira física e matematicamente fundamentada, que a adaptação rigorosa de modelos de fracionalização originalmente estabelecidos em sistemas unidimensionais e bidimensionais pode ser estendida de forma consistente para descrever a emergência de modos zero e estados de carga fracionária na superfície de isolantes topológicos tridimensionais. A análise apresentada mostra que, assim como no poliacetileno e no grafeno com distorção de Kekulé, a presença de um campo de massa efetivo com textura topológica vorticial conduz à formação de um modo zero isolado no interior do *gap* do espectro eletrônico. A simetria espectral do Hamiltoniano é outro elemento central na análise, garantindo que os estados de energia apareçam em pares $\pm E$, de forma que o modo zero único permanece não pareado, e sua ocupação define diretamente a carga fracionária associada ao defeito, fixada em $\pm e/2$. Esse resultado é independente de detalhes microscópicos e reflete a natureza topológica do mecanismo, reforçando sua robustez frente a perturbações locais desde que a abertura de *gap* global e a estrutura topológica do campo de massa sejam preservadas.

Os cálculos realizados confirmam que o princípio de Jackiw–Rebbi para fracionalização de carga, originalmente formulado para férmions sem *spin* em uma dimensão, pode ser transposto para superfícies de isolantes topológicos tridimensionais descritas por férmions de Dirac bidimensionais. Essa generalização estabelece uma ponte conceitual entre modelos usados para polímeros conjugados e grafeno distorcido e o regime tridimensional, evidenciando que um mesmo mecanismo topológico pode atuar em sistemas com naturezas aparentemente distintas. Cabe ressaltar que, no poliacetileno e no grafeno, o fenômeno emerge a partir de propriedades intrínsecas da rede cristalina descritas por modelos de *tight-binding*. No poliacetileno, a fracionalização está associada a sólitons formados em uma cadeia dimerizada, enquanto que no grafeno, decorre da distorção de Kekulé que modula os parâmetros de *hopping* e gera uma textura topológica no campo de massa efetivo. Em contraste, o formalismo desenvolvido nesta dissertação demonstra que a fracionalização pode ser obtida mesmo quando o campo de massa não resulta de um defeito estrutural da rede, mas é induzido externamente por um mecanismo de proximidade, como o acoplamento entre a superfície de um isolante topológico tridimensional e um supercondutor convencional. Nesse cenário, o parâmetro de acoplamento supercondutor

atua como campo de massa topológico necessário para abrir um *gap* e, quando assume configuração vorticial, induzir modos zero nos estados de superfícies de ITs 3D. Essa abordagem amplia o alcance do fenômeno para sistemas onde o mecanismo de abertura de *gap* não depende de distorções da rede subjacente, oferecendo uma rota conceitual para explorar fracionalização em heteroestruturas e plataformas híbridas.

Do ponto de vista físico, a demonstração de que vórtices em um campo de acoplamento superconductor são capazes de aprisionar modos zero e gerar estados de carga fracionária fornece um suporte teórico concreto para a busca experimental do fenômeno em materiais reais. Em particular, reforça a viabilidade de observar tais estados em materiais como Bi_2Se_3 e Bi_2Te_3 , especialmente em heteroestruturas com supercondutores que permitam induzir vórtices controlados. A robustez topológica desses modos frente a desordem local e perturbações de curto alcance reforça seu potencial para estudos experimentais e para aplicações em plataformas de transporte eletrônico. Assim, à luz dos cálculos realizados e das correspondências formais estabelecidas, conclui-se que há suporte teórico sólido para a realização de fracionalização de carga em isolantes topológicos tridimensionais, desde que seja possível implementar experimentalmente um campo de massa efetivo com textura topológica adequada, como o que pode ser induzido via proximidade supercondutora.

Ao longo da análise da fracionalização de carga no poliacetileno, no regime não interagente, apresentada na Seção ??, tratamos o problema eletrônico utilizando férmions sem spin, à semelhança do formalismo desenvolvido por Jackiw e Rebbi para o modelo de Dirac em uma dimensão com um campo escalar solitônico. Essa simplificação é justificada quando a simetria de rotação de spin é preservada. Note que o Hamiltoniano eletrônico efetivo de tight-binding não interagente (2.45) do modelo SSH ou o Hamiltoniano efetivo no setor de baixas energias e longos comprimento de onda (2.95) não contêm termos que quebrem explicitamente essa simetria, e as duas projeções de spin do elétron são, portanto, equivalentes e desacopladas. Dessa forma, a solução para uma cadeia sem spin pode ser simplesmente duplicada para descrever um sistema real de elétrons com spin- $\frac{1}{2}$, bastando considerar que cada modo zero de Jackiw–Rebbi possui uma degenerescência de dois devido ao spin.

Entretanto, a presença do spin- $\frac{1}{2}$ introduz consequências físicas relevantes, principalmente quando se consideram interações de muitas partículas. Considerar o spin torna possível explorar mecanismos que envolvem a possibilidade de separar os números quânticos de carga e spin. Assim, a inclusão do spin fornece um espectro mais rico de excitações fracionadas, em que as texturas topológicas presentes nos modelos deixam de ser apenas portadoras de carga fracionária para abrigarem estados com diferentes combinações de carga e spin. A relevância do spin- $\frac{1}{2}$ torna-se ainda mais evidente ao introduzir interações eletrônicas. Estas considerações aproximam os modelos de descrições mais realistas de materiais candidatos a exibir fracionalização. Além disso, investigar como estabilizar ou manipular essas excitações fracionadas é um passo importante para conectar a teoria simplificada à física de sistemas reais e abrir caminho para propostas experimentais.

Outro aspecto relevante relacionado ao grau de liberdade de spin que não foi tratado explicitamente neste trabalho, é o travamento spin–momento característico dos estados eletrônicos de superfície de isolantes topológicos tridimensionais. Nesses sistemas, os elétrons de superfície são descritos por um Hamiltoniano de Dirac em duas dimensões, no qual o spin real está rigidamente acoplado ao momento cristalino, suprimindo retroespalhamento e garantindo proteção topológica contra perturbações que preservem a simetria de reversão temporal. A inclusão explícita desse travamento na formulação de um modelo de fracionalização poderia ter algum efeito como, por exemplo, o de revelar restrições sobre o mecanismo.

Em diversos cenários, a fracionalização está associada a quebras espontâneas de simetrias que podem conferir uma massa efetiva aos férmions de Dirac de superfície. Uma outra questão que pode ser investigada é em quais condições é possível preservar férmions sem massa enquanto se mantém a carga fracionária?

Uma direção promissora para estudos futuros envolve explorar mecanismos alternativos de fracionalização de carga. Nesse sentido, alguns trabalhos exploraram mecanismos baseados em condensados de éxcitons. Em sistemas bidimensionais, como a bicamada de grafeno polarizada por eletrodos externos, a interação Coulombiana entre elétrons e buracos em camadas opostas pode induzir a formação de um condensado de éxcitons, descrito por um parâmetro de ordem complexo que abre um *gap* na estrutura eletrônica [64]. Seradjeh, Weber e Franz mostraram que vórtices nesse condensado podem ligar modos zero fermiônicos, análogos aos estudados por Jackiw e Rebbi, embora modificados pela . Nesses sistemas, embora a carga elétrica total associada aos vórtices não seja fracionária devido à presença do índice adicional de vale, surge a noção de carga axial fracionária — definida como a diferença de carga entre as camadas — que pode ser continuamente ajustada por parâmetros externos e confere aos vórtices estatísticas de troca fracionárias. De forma análoga, superfícies de filmes finos de isolantes topológicos fortemente acoplados por interação intercadas podem hospedar um condensado de éxcitons topológico, no qual vórtices carregam modos zero topologicamente protegidos e exibem fracionalização de carga elétrica $\pm e/2$, além de propriedades associadas à resposta eletromagnética axional desses materiais [33]. Investigar tais condensados excitônicos pode fornecer um caminho complementar ao abordado nesta dissertação, ampliando a compreensão de como graus de liberdade como *spin*, *vale* e camada influenciam a fracionalização e a estatística quântica de excitações topológicas.

Outra perspectiva interessante é explorar mecanismos de fracionalização que não dependam do acoplamento direto dos férmions a um campo escalar complexo, como ocorre nos modelos baseados no mecanismo de Jackiw-Rebbi. Um exemplo relevante é o proposto no contexto de isolantes topológicos bidimensionais em estado Hall quântico de spin (*quantum spin Hall*, QSH) [66]. Nessa fase, os estados de borda formam um líquido helicoidal com apenas dois graus de liberdade, um canal para cada direção e polarização de spin correlacionada. Qi, Hughes e Zhang mostraram que, ao aplicar campos magnéticos que quebrem a simetria de reversão temporal, é possível induzir um termo de massa efetivo para os modos de borda do

QSH. Uma parede de domínio magnética nesse contexto gera um estado ligado que carrega carga fracionária $\pm e/2$, sem exigir a presença de um campo escalar complexo na hamiltoniana efetiva. Além disso, os autores demonstraram que a rotação adiabática de um campo magnético pode bombear corrente quantizada através da borda do sistema, oferecendo uma via operacional para detectar experimentalmente tais efeitos topológicos.

Uma linha de investigação promissora para além dos modelos não magnéticos estudados nesta dissertação envolve os isolantes topológicos magnéticos. A estrutura eletrônica de um IT magnético pode ser entendida como uma modificação direta da de um isolante topológico tridimensional (IT 3D) convencional. Em um IT não magnético, os estados de superfície apresentam uma dispersão tipo Dirac sem massa e exibem travamento spin-momento, no qual a direção do spin está rigidamente acoplada ao movimento dos elétrons. Esses estados surgem devido à inversão de bandas induzida pelo forte acoplamento spin-órbita e são protegidos pela simetria de reversão temporal (TRS), o que garante a natureza metálica das superfícies enquanto o *bulk* permanece isolante. Quando se introduz magnetização — seja por dopagem com metais de transição, deposição de camadas ferromagnéticas ou pela síntese de compostos intrinsecamente magnéticos, como a família MnBi_2Te_4 — a TRS é quebrada e ocorre um acoplamento de troca entre os elétrons de superfície e os momentos magnéticos [67, 68]. Esse acoplamento aparece como um termo de massa na Hamiltoniana de Dirac, abrindo um *gap* de troca no cone de Dirac de superfície e transformando seus elétrons em férmions massivos. O spin deixa de estar rigidamente perpendicular ao momento, pois surge uma componente adicional, induzida pela magnetização, que inclina o spin para fora do plano da superfície, alterando a textura de spin dos estados superficiais. Ajustando o nível de Fermi para dentro desse *gap*, o sistema pode transitar para uma fase topológica magnética caracterizada pelo efeito Hall quântico anômalo (QAH), que apresenta modos de borda quirais livres de dissipação, cuja direção é controlada pelo sinal da magnetização e pelo número de Chern associado. Além disso, a quebra da TRS em TIs 3D permite respostas eletromagnéticas topológicas descritas pela chamada eletrodinâmica do áxion, levando ao efeito magnetoelétrico topológico quantizado. A possibilidade de induzir magnetismo fornece um caminho para manipular diretamente os estados topológicos de superfície.

A investigação de possível fracionalização de carga ou fenômenos análogos associada a domínios ou texturas magnéticas, desponta como um caminho natural para ampliar o escopo das propostas de fracionalização em isolantes topológicos tridimensionais. Outra questão que surge diz respeito a como ordens magnéticas podem modificar, cooperar ou competir com os mecanismos descritos nesta dissertação para a fracionalização de carga, além da perspectiva interessante de explorar possíveis efeitos combinados.

Uma ponte essencial a ser construída entre teoria e experimento é o desenvolvimento de estratégias de controle e manipulação das excitações fracionárias previstas pelo modelo por meios elétricos, magnéticos, mecânicos ou ópticos. Idealmente, seria necessário garantir um *gap* suficientemente grande para isolar o modo zero e cada excitação fracionária deveria poder

ser nucleada, deslocada e detectada sem destruir o *gap* que as protege. Do ponto de vista tecnológico, essa capacidade de manipulação viabiliza arquiteturas de dispositivos baseados em qubits topológicos ou componentes em spintrônica topológica, nas quais a carga fracionária, atrelada também ao spin, pode ser utilizada para armazenar e transportar informação com robustez contra ruído local.

Referências Bibliográficas

- [1] CHAMON, Claudio; MUDRY, Christopher. **Fractionalization of Particles in Physics: Invertible Topological Phases of Matter**. Cambridge: Cambridge University Press, 2025.
- [2] ASHCROFT, Neil W.; MERMIN, N. David. **Física do estado sólido**. São Paulo: Cengage Learning, 2011.
- [3] JACKIW, Roman; REBBI, Claudio. Solitons with fermion number $1/2$. **Physical Review D**, v. 13, n. 12, p. 3398, 1976.
- [4] RAJARAMAN, Ramamurti. *Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*. North-Holland, 1982.
- [5] JACKIW, Roman; SCHRIEFFER, John R. Solitons with fermion number $1/2$ in condensed matter and relativistic field theories. **Nuclear Physics B**, v. 190, n. 2, p. 253-265, 1981.
- [6] CHAMON, Claudio et al. Electron fractionalization for two-dimensional Dirac fermions. **Physical Review B**, v. 77, n. 23, p. 235431, 2008.
- [7] HOU, Chen-Yu; CHAMON, Claudio; MUDRY, Christopher. Electron fractionalization in two-dimensional graphenelike structures. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 18, p. 186809, 2007.
- [8] JACKIW, Roman; PI, So-Young. Zero modes of the vortex-fermion system. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 26, p. 266402, 2007.
- [9] TORRES, Luis EF Foa; ROCHE, Stephan; CHARLIER, Jean-Christophe. **Introduction to graphene-based nanomaterials: from electronic structure to quantum transport**. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.
- [10] GOLDSBY, Kenneth; CHANG, Raymond. **Chemistry**. McGraw-Hill Higher Education, 2015.
- [11] GIRVIN, Steven M.; YANG, Kun. **Modern condensed matter physics**. Cambridge University Press, 2019.

- [12] SU, Wu P.; SCHRIEFFER, John R.; HEEGER, Alan J. Soliton excitations in polyacetylene. **Physical Review B**, v. 22, n. 4, p. 2099, 1980.
- [13] NOVOSELOV, Kostya S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.
- [14] NOVOSELOV, Kostya S. et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. **Nature**, v. 438, n. 7065, p. 197–200, 2005.
- [15] BERGER, Claire et al. Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene. **Science**, v. 312, n. 5777, p. 1191–1196, 2006.
- [16] WALLACE, Philip Richard. The band theory of graphite. **Physical Review**, v. 71, n. 9, p. 622, 1947.
- [17] ANDO, Yoichi. Topological insulator materials. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 82, n. 10, p. 102001, 2013.
- [18] HASAN, M. Zahid; KANE, Charles L. Colloquium: Topological insulators. **Reviews of Modern Physics**, v. 82, n. 4, p. 3045, 2010.
- [19] HASAN, M. Zahid; KANE, Charles L. Colloquium: Topological insulators. **Reviews of Modern Physics**, v. 82, n. 4, p. 3045, 2010.
- [20] KLITZING, K. v; DORDA, Gerhard; PEPPER, Michael. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. **Physical review letters**, v. 45, n. 6, p. 494, 1980.
- [21] KATO, Yuichiro K. et al. Observation of the spin Hall effect in semiconductors. **Science**, v. 306, n. 5703, p. 1910-1913, 2004.
- [22] MURAKAMI, Shuichi; NAGAOSA, Naoto; ZHANG, Shou-Cheng. Spin-hall insulator. **Physical review letters**, v. 93, n. 15, p. 156804, 2004.
- [23] KANE, Charles L.; MELE, Eugene J. Quantum spin Hall effect in graphene. **Physical review letters**, v. 95, n. 22, p. 226801, 2005.
- [24] KANE, Charles L.; MELE, Eugene J. Z₂ topological order and the quantum spin Hall effect. **Physical review letters**, v. 95, n. 14, p. 146802, 2005.
- [25] BERNEVIG, B. Andrei; HUGHES, Taylor L.; ZHANG, Shou-Cheng. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. **Science**, v. 314, n. 5806, p. 1757-1761, 2006.
- [26] MOLENKAMP, L. W.; QI, X. L.; ZHANG, S. C. HL 37: Transport: Topological insulators 3 (TT with HL/DS). **Science**, v. 318, p. 766, 2007.

- [27] FU, Liang; KANE, Charles L.; MELE, Eugene J. Topological insulators in three dimensions. **Physical review letters**, v. 98, n. 10, p. 106803, 2007.
- [28] HSIEH, David et al. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. **Nature**, v. 452, n. 7190, p. 970-974, 2008.
- [29] ZHANG, H. et al. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. *Nature Physics*, v. 5, p. 438–442, 2009.
- [30] LIU, Chaoxing et al. Model Hamiltonian for topological insulators. **Physical Review B**, v. 82, n. 4, p. 045122, 2010.
- [31] QI, Xiao-Liang; ZHANG, Shou-Cheng. Topological insulators and superconductors. **Reviews of Modern Physics**, v. 83, n. 4, p. 1057, 2011.
- [32] SHAN, Wen-Yu; LU, Hai-Zhou; SHEN, Shun-Qing. Effective continuous model for surface states and thin films of three-dimensional topological insulators. **New Journal of Physics**, v. 12, n. 4, p. 043048, 2010.
- [33] SERADJEH, Babak; MOORE, J. E.; FRANZ, Marcel. Exciton condensation and charge fractionalization in a topological insulator film. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 6, p. 066402, 2009.
- [34] TAKAYAMA, Hajime; LIN-LIU, Yo R.; MAKI, Kazumi. Continuum model for solitons in polyacetylene. **Physical Review B**, v. 21, n. 6, p. 2388, 1980.
- [35] FRADKIN, Eduardo. **Quantum Field Theory: An Integrated Approach**. Princeton: Princeton University Press, 2021.
- [36] PESKIN, Michael E.; SCHROEDER, Daniel V. **An introduction to quantum field theory**. Boulder: Westview Press, 1995.
- [37] RYDER, Lewis H. **Quantum field theory**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
- [38] RAJARAMAN, R.; BELL, John Stewart. On solitons with half integral charge. **Physics Letters B**, v. 116, n. 2-3, p. 151-154, 1982.
- [39] JACKIW, Roman. Topology in physics. **arXiv preprint** arXiv:physics/0512148, 2005.
- [40] LAUGHLIN, Robert B. Anomalous quantum Hall effect: an incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. **Physical Review Letters**, v. 50, n. 18, p. 1395, 1983.
- [41] FRIEDEL, J. The distribution of electrons round impurities in monovalent metals. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, v. 43, n. 337, p. 153-189, 1952.

- [42] YAMAGISHI, H. Fermion fractionization and index theorems. **Physical Review Letters**, v. 50, n. 6, p. 458-458, 1983.
- [43] LEVINSON, N. On the uniqueness of the potential in a Schrödinger equation for a given asymptotic phase. **Kongelige Danske Videnskabernes Selskab Matematisk-fysiske Meddelelser**, v. 25, n. 9, p. 1-29, 1949.
- [44] JACKIW, R. Quantum meaning of classical field theory. In: DUFF, M. J.; ISHAM, C. J. (Ed.). **Quantum Structure of Space and Time**. Cambridge University Press, 1982. p. 169-184.
- [45] JACKIW, R.; SEMENOFF, G. Continuum quantum field theory for a linearly conjugated system. **Physical Review Letters**, v. 50, n. 6, p. 439-442, 1983.
- [46] NIEMI, Antti J.; SEMENOFF, Gordon W. Spectral asymmetry on an open space. **Physical Review D**, v. 30, n. 4, p. 809, 1984.
- [47] NIEMI, Antti J. Spectral density and a family of Dirac operators. **Nuclear Physics B**, v. 253, p. 14-46, 1985.
- [48] NIEMI, Antti Juhani; SEMENOFF, Gordon W. Fermion number fractionization in quantum field theory. **Physics Reports**, v. 135, n. 3, p. 99-193, 1986.
- [49] WITTEN, Edward. Constraints on supersymmetry breaking. **Nuclear Physics B**, v. 202, n. 2, p. 253-316, 1982.
- [50] CASTRO NETO, Antonio H. et al. The electronic properties of graphene. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, n. 1, p. 109–162, 2009.
- [51] JACKIW, R.; ROSSI, P. Zero modes of the vortex-fermion system. **Nuclear Physics B**, v. 190, n. 4, p. 681-691, 1981.
- [52] READ, N.; GREEN, D. Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum Hall effect. **Physical Review B**, v. 61, p. 10267–10297, 2000.
- [53] WEINBERG, E. J. Index calculations for the fermion-vortex system. **Physical Review D**, v. 24, n. 10, p. 2669-2673, 1981.
- [54] FU, Liang; KANE, Charles L. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 9, p. 096407, 2008.
- [55] BERNEVIG, B. Andrei. **Topological Insulators and Topological Superconductors**. Princeton: Princeton University Press, 2013.

- [56] BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science*, v. 314, p. 1757–1761, 2006.
- [57] FU, L.; KANE, C. L. Topological insulators with inversion symmetry. **Physical Review B**, v. 76, p. 045302, 2007.
- [58] XIA, Y. et al. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface. *Nature Physics*, v. 5, p. 398–402, 2009.
- [59] HSIEH, D. et al. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. **Nature**, v. 452, p. 970–974, 2008.
- [60] WINKLER, R. *Spin–Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Springer, 2003.
- [61] FU, L. Hexagonal warping effects in the surface states of the topological insulator Bi_2Te_3 . **Physical Review Letters**, v. 103, p. 266801, 2009.
- [62] HSIEH, D. et al. Observation of unconventional quantum spin textures in topological insulators. **Science**, v. 323, p. 919–922, 2009.
- [63] SHEN, Shun-Qing. **Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter**. Cham: Springer, 2017.
- [64] SERADJEH, Babak; WEBER, Heidrun; FRANZ, Marcel. Vortices, zero modes, and fractionalization in the bilayer-graphene exciton condensate. **Physical Review Letters**, v. 101, n. 24, p. 246404, 2008.
- [65] ARFKEN, George B.; WEBER, Hans J.; HARRIS, Frank E. **Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide**. Amsterdam: Academic Press, 2011.
- [66] QI, Xiao-Liang; HUGHES, Taylor L.; ZHANG, Shou-Cheng. Fractional charge and quantized current in the quantum spin Hall state. **Nature Physics**, v. 4, n. 4, p. 273–276, 2008.
- [67] BERNEVIG, B. Andrei; FELSER, Claudia; BEIDENKOPF, Haim. Progress and prospects in magnetic topological materials. **Nature**, v. 603, n. 7899, p. 41–51, 2022.
- [68] TOKURA, Yoshinori; YASUDA, Kenji; TSUKAZAKI, Atsushi. Magnetic topological insulators. **Nature**, v. 1, n. 2, p. 126–143, 2019.