

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

André Carlos Peçanha Lima

Propriedades termoelétricas das cadeias SP e SSH ligadas a um
Ponto Quântico

Urca-RJ

2021

ANDRÉ CARLOS PEÇANHA LIMA

Propriedades termoelétricas das cadeias SP e SSH ligadas a um Ponto Quântico

Trabalho de Dissertação apresentado ao Programa de mestrado em Física do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas , como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. MÚCIO CONTINENTINO



MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA,
INOVAÇÕES E COMUNICAÇÕES



“PROPRIEDADES TERMOELÉTRICAS DAS CADEIAS SP E SSH LIGADAS
A UM PONTO QUÂNTICO”

ANDRÉ CARLOS PEÇANHA LIMA

Dissertação de Mestrado em Física, apresentada
no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do
Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e
Comunicações. Fazendo parte da banca
examinadora os seguintes professores:

Mucio Amado Continentino

Mucio Amado Continentino – Presidente/Orientador/CBPF

A.C.F. Seridonio

Antônio Carlos Ferreira Seridonio - UNESP

R.O. Vallejos

Raúl Oscar Vallejos - CBPF

Rio de Janeiro, 26 de julho de 2021.

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rua Doutor Xavier Sigaud, 150, URCA, Rio de Janeiro, Brasil

Tel.: +55 21 2141-7100 CEP:22290-180

<http://www.cbpf.br>

Dedicado ao meu avó Juraci de Souza Lima, que antes que eu pudesse entregar-lhe o resultado de toda uma vida de ensinamentos que compartilhou comigo, partiu de maneira prematura.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer ao meu orientador de tese Prof. Dr. Múcio Amado Continentino e ao Prof. Dr. Marcos Sergio Figueira da Silva por todo suporte dado durante esse ano atípico que tivemos, ao tempo dispensado e na credibilidade dada ao projeto. A minha família, minha mãe Márcia Cristina Peçanha Lima Machado, meu pai Mauro Neves Machado, meu irmão Arthur Henrique Lima Machado e a minha noiva Gabriela Fernandes da Silva pela compreensão e apoio nas horas mais difíceis. Aos meus amigos: Pablo, Allan, Hércules, Nahum e Guilherme que tive o prazer de fazer durante esse período de tempo em especial ao Renan Bento por toda a ajuda nos mais diversos problemas durante o projeto.

RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo verificar a existência de férmions de Majorana nas cadeias SP e SSH através de suas propriedades elétricas e termoelétricas quando ligadas a um ponto quântico (PQ). Para melhor entendimento dos resultados será introduzida a cadeia de Kitaev, suas fases topológicas e as equações que descrevem as propriedades elétricas e termoelétricas. Definidas e devidamente explicadas as cadeias SP e SSH calculamos as funções de Green de superfície. Através desta torna-se possível a obtenção da densidade de estados de superfície que tem relação com a presença de férmions de Majorana. Por fim, com a densidade de estados são calculadas as propriedades elétricas e termoelétricas.

A cadeia SP devido à hibridização anti-simétrica entre os orbitais s e p inter-sítio com diferentes paridades apresenta propriedades topológicas não triviais. Esta cadeia possui uma fase isolante topológica onde estados de borda estão presentes. Estes estados podem conduzir corrente elétrica e calor quando na transição topológica.

A cadeia SSH possui hibridizações intra-célula e inter-célula entre orbitais s e p (dentro da célula unitária e entre células unitárias). Apresenta duas fases topológicas que dependem da razão entre os hoppings associados às hibridizações, do potencial químico e da temperatura do sistema. Na fase não trivial encontramos estados de borda que podem conduzir corrente elétrica e calor.

Palavras chave: Férmions de Majorana, Propriedades termoelétricas, Coeficientes de transporte, Funções de Green, Cadeia Sp, Estados de Shockley.

ABSTRACT

The present work aims to verify the existence of Majorana fermions in SP and SSH chains through their electrical and thermoelectric properties when bound to a quantum dot (QD). For a better understanding of the results, the Kitaev chain, its topological phases and the equations that describe the electrical and thermoelectric properties will be introduced. Once the SP and SSH chains were defined and properly explained, we calculated the Green functions of the surface. Through this, it is possible to obtain the density of surface states that are related to the presence of Majorana fermions. Finally, with the density of states, the electrical and thermoelectric properties are calculated.

The SP chain, due to anti-symmetric hybridization between the inter-site s and p orbitals with different parities, presents non-trivial topological properties. This chain has a topological insulating phase where edge states are present. These states can conduct electrical current and heat when in topological transition.

The SSH chain has intra-cell and inter-cell hybridizations between s and p orbitals (within the unit cell and between unit cells). It has two topological phases, which depend on the ratio between the hoppings associated with the hybridizations, the chemical potential and the temperature of the system. In the non-trivial phase we find edge states that can conduct electric current and heat.

LIST OF FIGURES

1	Na figura A podemos verificar que o nanofio com forte interação spin-órbita promove um campo magnético transversal \vec{B}_{SO} que desloca lateralmente as bandas de energia (curvas azul e vermelha) quebrando assim a degenerescência, de maneira que ainda resta uma degenerescência que é quebrada quando atravessamos um campo magnético que além disto alinha as bandas de energia (curvas pretas). A figura B é uma imagem do experimento realizado pelo grupo de Kouwenhoven, onde S é o supercondutor, a linha branca é o nanofio, N é um material condutor(Ouro) usado como um reservatório e \vec{B} é o campo magnético	1
2	2
3	Fase topologicamente trivial; os férmions de Majorana ocupam o mesmo sítio de maneira a reproduzir os resultados para a cadeia eletrônica “tight-binding”[1].	4
4	Fase topológica, férmions de Majorana do sítio j se emparelham com os do sítio j+1 possibilitando o surgimento de férmions de Majorana nas bordas da cadeia[1].	4
5	Curvas cheias (azuis) representam a cadeia linear “tight-binding” na ausência de supercondutividade, cuja relação de dispersão é dada pela Eq. 4. Curvas tracejadas (vermelhas) representam a cadeia de Kitaev fora da fase topológica: ($\Delta = 0.4t \neq \mu$), podemos notar a transição da fase trivial para a fase topológica em $\mu = -1, 0$, Vale notar que utilizamos $\Delta = 0.4t$ pois do contrario, se $\Delta = 0$ então perderíamos o efeito.	6
6	Curvas cheias(azuis) representam a cadeia linear “tight-binding” na ausência de supercondutividade, cuja relação de dispersão é dada pela Eq. 4. Curvas tracejadas (vermelhas) representam a cadeia de Kitaev fora da fase topológica: ($\Delta = 0.4t \neq \mu$), aqui de maneira análoga Fig. 5, podemos observar que há uma mudança de fase no sistema, no entanto com a diferença que a transição topológica ocorre em $\mu = t$ o que mostra que a física das duas transições são distintas. Na Fig. 5 a banda está completamente vazia e o potencial químico se encontra no fundo da banda enquanto que no presente gráfico a banda esta completamente cheia estando o potencial químico no topo da banda.	7
7	(a) Superfície composta por átomos fermiônicos frios. onde J e Δ denotam o hopping entre os primeiros vizinhos e a força de emparelhamento (emparelhamento supercondutor). uma linha de defeitos com potencial químico local diferente liga os dois Majoranas de energia zero γ_1 e γ_2 (círculos vermelhos) nas pontas. (b) Espectro de energia do Hamiltoniano H em uma superfície quadrada com tamanho 18ax10a com limites abertos. O comprimento da linha do defeito é 14a. Os Majoranas de energia zero tem energia de espalhamento pequena devido ao tamanho pequeno da linha de defeitos, que é numericamente encontrado sendo $<10^{-10}J$ para os parametros assumidos. (c) A amplitude dos modos γ_1 e γ_2 . a linha preta indica a linha de defeitos com potencial químico μ_d . Os parametros escolhidos foram $\Delta = J$, $\mu_0 = 10J$ e $\mu_d = 0.1J$	8

8	Surgimento de um par de estados de Majorana de energia zero como potencial de defeito, onde U_0 é o potencial eletroestático uniforme da superfície (sem defeitos) e δU o potencial do defeitos [2].	9
9	Cadeia SSH composta por políenos, onde cada elipse vermelha representa uma célula unitária	11
10	Densidade de estados na superfície da cadeia SSH semi-infinita para diversos valores de δ , note que quando $\delta < 1.0$ há o surgimento de um pico na densidade de estados que é associado aos estados de superfície de Shockley, para $\delta = 1.0$ o sistema tem uma transição de fase dando origem a uma banda única e quando $\delta > 1.0$ o sistema não apresenta mais estados de superfície de modo que estes estados se recombina dando origem a duas bandas de energia que se afastam a medida em que aumentamos o valor de δ	13
11	Cadeia SP com dois orbitais por sítio, note que a interação é inter-sítio onde as curvas azuis são referentes aos hoppings entre níveis diferentes enquanto as curvas vermelhas são referentes aos hoppings entre níveis iguais.	14
12	Cadeia SP em termos dos Majoranas s e p sem interação entre os níveis.	15
13	Densidade de estados da cadeia SP infinita com hibridização inter-sítio, onde $\varepsilon = \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_s}{2}$, $\beta_{ss} = \beta(1 - \delta)$ e $\beta_{pp} = \beta(1 + \delta)$	24
14	Energia vs h, curvas para os casos $\delta/\varepsilon = 0$ e $\delta'/\varepsilon = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 . Os valores de δ'/ε são indicados ao longo de cada curva [3].	34
15	Densidade de estado de superfície da cadeia SP semi-infinita nas fases trivial ($\delta > 1.0$), não trivial ($\delta < 1.0$) e na transição ($\delta = 1.0$).	35
16	Cadeia SSH ligada a um PQ, onde δV é uma pequena diferença de potencial para que haja fluxo de elétrons, V_g é o potencial no PQ (nível de energia ϵ do PQ) e V é o potencial entre o PQ e as cadeias SP semi-infinitas, a realização do PQ é análoga a feita por Goldhaber-Gordon[4].	36
17	Condutância elétrica nas fases trivial (curva vermelha) e não trivial (curva azul tracejada), note que os modos de Majorana atuam como centros espalhadores diminuindo assim a condutância.	37
18	Condutância elétrica na transição de fase, veja que o sistema não apresenta assinatura de Majorana ($G/G_0=0.5$).	37
19	Condutância térmica nas fases trivial (curva vermelha) e não trivial (curva azul tracejada). Analogamente ao que obtemos para a condutância elétrica concluímos que os modos de Majorana atuam como centros espalhadores diminuindo assim a condutância.	38
20	Condutância térmica na transição de fase.	38
21	Lei de Wiedemann-Franz para as fases trivial (curva vermelha) e não trivial (curva azul tracejada), note que há uma violação da lei, no entanto, não há termpotência.	39
22	Lei de Wiedemann-Franz para a transição de fase.	39

CONTENTS

Resumo	vi
Abstract	vii
List of Figures	viii
I. A cadeia de Kitaev	1
I.1. Introdução	1
I.2. O Hamiltoniano da cadeia de Kitaev	2
I.3. Estados de Shockley	5
I.4. Coeficientes termoelétricos	8
II. Cadeia SSH	11
II.1. Introdução	11
II.2. Função de Green e densidade de estados na superfície	12
III. A cadeia SP	13
III.1. Introdução	13
III.2. Cálculo da função de Green de superfície da cadeia SP com hibridização inter-sítio	17
III.3. Cálculo do invariante topológico	23
III.4. Cálculo da função de Green de superfície da cadeia SP semi-infinita pelo método do espalhamento (Slater-Koster)	25
III.5. Propriedades elétricas e termoelétricas de um Ponto Quântico imerso em cadeias SP e SSH semi-infinitas	35
IV. Conclusão	39
V. Apêndice	40
V.1. Slater-Koster	40
V.2. Teorema do salto	44
V.3. Existência de estados ligados no problema de S-K	48
V.4. Método da equação de movimento (EOM) para o cálculo das funções de Green	49
V.5. Modelo de Fridel-Anderson-Moriya	50
V.6. Método do potencial efetivo para superfícies	51
V.7. Cálculo do winding number	53
V.8. Cálculo dos coeficientes termoelétricos	55
Referências	59

I. A CADEIA DE KITAEV

I.1. Introdução

Em 1937 Ettore Majorana previu a existência de partículas cujas suas antipartículas são elas mesmas ao impor que a equação de Dirac apresentasse soluções reais [1]. Ele obteve este resultado ao utilizar da física de altas energias no estudo dos neutrinos. Originalmente sua proposta era considerar que os neutrinos fossem descritos como Férmions de Majorana. Um dos principais interesses na realização dos Férmions de Majorana esta na utilização destes para a construção de quantum bits, uma vez que, como os estados são topologicamente isolados, isto é, espacialmente separados e isentos de quaisquer alterações oriundas do "bulk" da cadeia, possibilitam assim o armazenamento de informações imunes a efeitos de decoerência quântica. Em 2001 Alexei Kitaev propôs um toy-model que tornava possível a realização dos Majoranas [5]. No entanto, era necessária a realização experimental. Em 2010 Oreg definiu quais seriam os "ingredientes" necessários para a realização experimental do toy-model proposto por Kitaev [6] que são: um nanofio com forte interação spin-órbita para quebrar a degenerescência dos níveis de energia, um campo magnético paralelo ao fio para quebrar a degenerescência restante e polarizar as bandas de energia e por último colocar o nanofio sob efeito de proximidade de um supercondutor do tipo s-wave de modo que os pares de cooper do tipo singleto ao fluirem para o nanofio sofram uma reflexão de Andreev formando assim pares de cooper do tipo tripleto. Com isso posteriormente foram feitos dois experimentos. O primeiro foi realizado pelo grupo do L.P.Kouwenhoven em 2012 [7], eles utilizaram um nanofio composto por antimoneto de Índio (Isb) que possui uma forte interação spin-órbita em contato com um supercondutor do tipo s-wave de nitreto de Niobio de Titânio com um campo magnético externo paralelo ao nanofio surgindo assim a cadeia de Kitaev na interface entre o nanofio e o supercondutor como podemos verificar na figura 1. O segundo experimento foi realizado pelo grupo do Ali Yazdani

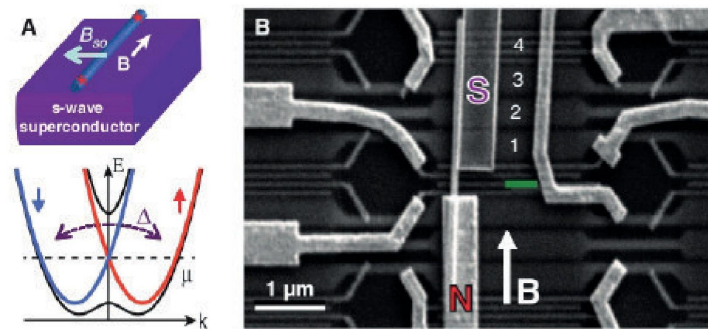


Figura 1. Na figura A podemos verificar que o nanofio com forte interação spin-órbita promove um campo magnético transversal \vec{B}_{SO} que desloca lateralmente as bandas de energia (curvas azul e vermelha) quebrando assim a degenerescência, de maneira que ainda resta uma degenerescência que é quebrada quando atravessamos um campo magnético que além disto alinha as bandas de energia (curvas pretas). A figura B é uma imagem do experimento realizado pelo grupo de Kouwenhoven, onde S é o supercondutor, a linha branca é o nanofio, N é um material condutor(Ouro) usado como um reservatório e \vec{B} é o campo magnético

em 2014 [8], eles fabricaram uma cadeia ferromagnética com os spins dos átomos da cadeia todos para

cima sobre uma superfície supercondutora de Chumbo e mediram a condutância da cadeia usando uma ponta de STM como podemos verificar na figura 2. No entanto, em ambos os experimentos existem problemas que tornam os resultados inconclusivos. No primeiro o problema é que supercondutores do

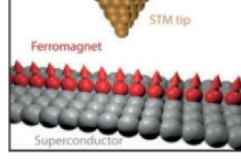


Figura 2.

tipo p-wave não são comuns na natureza e são extremamente sensíveis, desta forma os resultados obtidos podem ser oriundos de desordem ou de impurezas, enquanto que no segundo, o problema é o efeito Kondo que poderia gerar o mesmo resultado. Outra proposta com o intuito de comprovar a existência ou não dos Majoranas de interesse é a de Liu-Baranger de 2011 que elaborou uma maneira de detectar experimentalmente os Majoranas utilizando um PQ [9] e em 2018 Ricco propôs um modelo equivalente ao definido por Liu-Baranger[10], facilitando assim o cálculo das propriedades termoelétricas e a obtenção da assinatura dos Majoranas. Neste capítulo o objetivo é introduzirmos ferramentas que serão utilizadas para verificar a existência dos Majoranas nas cadeias SP e SSH.

I.2. O Hamiltoniano da cadeia de Kitaev

Para compreendermos as cadeias SP e SSH, é necessário introduzir alguns aspectos dos Majoranas a partir de um modelo mais simples. Com este intuito começaremos apresentando a cadeia de Kitaev, que é um “toy model” proposto por Kitaev. Trata-se de uma cadeia unidimensional descrita pelo Hamiltoniano

$$H = -\mu \sum_{x=1}^N c_x^\dagger c_x - \frac{1}{2} \sum_{x=1}^{N-1} (t c_x^\dagger c_{x+1} + \Delta e^{i\phi} c_x c_{x+1} + t c_{x+1}^\dagger c_x + \Delta e^{-i\phi} c_{x+1}^\dagger c_x^\dagger), \quad (1)$$

em termos dos operadores de criação e aniquilação c^\dagger e c , sendo μ o potencial químico, t a integral de transferência de elétrons entre sítios vizinhos da cadeia (“hopping”), Δ o “gap” supercondutor com simetria “p” e ϕ a fase do parâmetro de ordem supercondutor Δ , com férmions sem spin, ou seja, aqui devemos ter um emparelhamento tipo onda “p”. Para compreender o comportamento da cadeia primeiramente devemos definir os dois operadores que descrevem os férmions de Majorana, estes são rotulados com os subíndices A e B: $\gamma_{A,j}$ e $\gamma_{B,j}$, onde os dois operadores pertencem ao mesmo sítio que é representado pelo subíndice j . Definimos os operadores $\gamma_{A,i}$ e $\gamma_{B,j}$ através de suas relações com os operadores fermiônicos usuais:

$$\begin{aligned} f &= \frac{1}{2}(\gamma_A + i\gamma_B), \\ f^\dagger &= \frac{1}{2}(\gamma_A - i\gamma_B). \end{aligned}$$

Relacionamos agora os operadores definidos pelas equações acima com os operadores de criação e aniquilação de férmions que definem o Hamiltoniano de Kitaev, c_j e c_j^\dagger . Férmions de Majorana são “partículas” neutras de spin $1/2$, que tem como suas anti-partículas elas mesmas. Substituindo essas equações nas relações de comutação para férmions:

$$\begin{aligned} [f, f^\dagger]_+ &= 1, \\ [f, f]_+ &= 0 \end{aligned}$$

teremos

$$[\gamma_{\alpha,i}, \gamma_{\alpha',j}^\dagger]_+ = 2\delta_{\alpha,\alpha'}\delta_{i,j}.$$

Sendo $\alpha = A, B$, podemos então relacioná-los com os operadores de criação e aniquilação que descrevem o comportamento dos elétrons no sistema:

$$\begin{aligned} c_j &= \frac{e^{-\frac{i\phi}{2}}}{2}(\gamma_{A,j} + i\gamma_{B,j}), \\ c_j^\dagger &= \frac{e^{\frac{i\phi}{2}}}{2}(\gamma_{A,j} - i\gamma_{B,j}). \end{aligned}$$

Utilizamos o Hamiltoniano da Eq. 1, e fazendo algumas manipulações algébricas, obtemos então o Hamiltoniano de Kitaev em função dos operadores dos férmions de Majorana:

$$H = -\frac{\mu}{2} \sum_{j=1}^N (1 + i\gamma_{B,j}\gamma_{A,j}) - \frac{i}{4} \sum_{j=1}^{N-1} [(t + \Delta)(\gamma_{B,j}\gamma_{A,j+1}) - (t - \Delta)(\gamma_{A,j}\gamma_{B,j+1})].$$

Podemos agora analisar alguns casos limites. O Hamiltoniano de Kitaev possui três parâmetros reais: o potencial químico μ , o *hopping* entre sítios e o pareamento supercondutor Δ . O regime com estados de borda é obtido quando $\Delta = t$ e $\mu = 0$, enquanto o regime totalmente trivial composto apenas de férmions comuns é obtido quando $\Delta = t = 0$ e $\mu \neq 0$.

Caso trivial:

Nesse caso temos que $\mu \neq 0$ e $t = \Delta = 0$.

$$H = -\frac{\mu}{2} \sum_{j=1}^N (1 + i\gamma_{B,j}\gamma_{A,j}), \quad (2)$$

devemos observar que o emparelhamento entre os férmions de Majorana A e B ocorre sempre no mesmo sítio da cadeia. O espectro de energia sempre tem um “gap”, pois teremos um custo de uma energia finita μ para adicionar um elétron sem spin à cadeia. A Fig. 3 ilustra como seriam estas interações.

Caso topológico: Neste caso temos que $\mu = 0$ e $t = \Delta \neq 0$:

$$H = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (t\gamma_{B,j}\gamma_{A,j+1}). \quad (3)$$

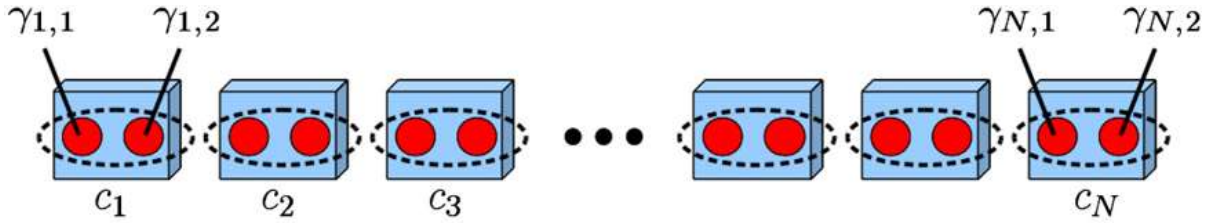


Figura 3. Fase topologicamente trivial; os férmions de Majorana ocupam o mesmo sítio de maneira a reproduzir os resultados para a cadeia eletrônica “tight-binding”[1].

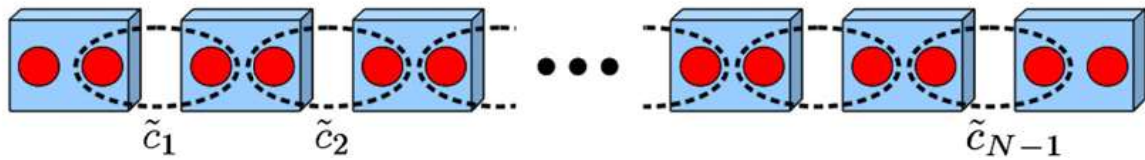


Figura 4. Fase topológica, férmions de Majorana do sítio j se emparelham com os do sítio $j+1$ possibilitando o surgimento de férmions de Majorana nas bordas da cadeia[1].

No caso anterior vimos que o Hamiltoniano de Kitaev contemplava apenas o emparelhamento entre os férmions no mesmo sítio. Para este caso podemos ver que é o contrário, o Hamiltoniano define a interação entre férmions de sítios vizinhos como podemos ver na figura 4.

Vale ressaltar que nesta cadeia temos apenas elétrons da camada “s” portanto os Majoranas, que na fase topológica aparecem nas pontas, são oriundos de elétrons s. Esta propriedade terá extrema importância quando introduzirmos a cadeia SP em função dos elétrons hibridizados.

Vamos agora nos preocupar em encontrar uma maneira de deduzir a existência de modos de Majorana a partir do espectro de energias associado aos sítios internos da cadeia (*bulk*). Primeiramente, vamos eliminar as bordas do sistema considerando uma cadeia infinita e impor condições de contorno periódicas (todas as bandas de energia na primeira zona de Brillouin), com isto, o sistema possui simetria translacional $|n\rangle \rightarrow |n+1\rangle$, uma vez que os parâmetros t , μ e Δ não dependem dos sítios. Prosseguiremos com o estudo e aplicaremos uma transformada de Fourier para que possamos obter as bandas no espaço do vetor de onda \vec{k} ;

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k e^{ikx_j} c_k,$$

$$c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k e^{-ikx_j} c_k^\dagger,$$

onde $x_j = ja$ e $a = 1$ é o parâmetro de rede, podemos agora expressar o Hamiltoniano dado pela Eq. 1 como;

$$H = \frac{1}{2} \sum_k (\epsilon_k c_k^\dagger c_k - \epsilon_k c_{-k} c_{-k}^\dagger + \Delta_k c_{-k} c_k + \Delta_k^* c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) + \frac{1}{2} \sum_k \epsilon_k,$$

onde

$$\epsilon_k = -\mu - t\cos(k), \quad (4)$$

é a energia cinética e $\Delta_k = -i\Delta e^{i\phi} \sin k$ é o potencial de pareamento transformado. Usando então uma notação matricial podemos expressar a equação 1

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_k & \Delta_k^* \\ \Delta_k & -\epsilon_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix}.$$

Ou em termos dos operadores das quasipartículas

$$a_k = u_k c_k + v_k c_{-k}^*,$$

como

$$H = \sum_k E_{bulk}(k) a_k^\dagger a_k,$$

com

$$E_{bulk} = \pm \sqrt{\epsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}. \quad (5)$$

Nas figuras 5 e 6, as curvas cheias (azuis) representam a cadeia linear “tight-binding” que é uma aproximação para uma cadeia unidimensional com N sítios onde assumimos $\mathcal{H} = K + \sum_{i=1}^N V_i$ onde K é a energia cinética e V_i são as energias locais que por simplicidade consideramos zero. A relação de dispersão da cadeia “tight-binding” é dada pela Eq. 4 e as curvas tracejadas (vermelhas) representam a cadeia de Kitaev fora da fase topológica: ($\Delta = 0.4t \neq \mu$), cuja relação de dispersão é dada pela Eq. 5. Nos gráficos acima mostramos a evolução do sistema considerando que inicialmente este não tem nenhuma partícula $\mu < -t$ (gráfico (a)) e o preenchimento tem início quando $\mu = -t$ (gráfico (b)) e atinge seu valor máximo quando $\mu = t$ (gráfico (f)). Em (b) quando $\mu = -t$, o gap se fecha em $k = 0$ e em (f) quando $\mu = t$ o gap se fecha para $k = \pm\pi$, sendo Δ_k uma função ímpar de k , não há emparelhamento Cooper em $k = 0$ e $k = \pm\pi$, a física do sistema é diferente nos dois casos. Em (c),(d) e (e), a medida em que aumentamos o potencial químico de forma que $|\mu| < t$, o potencial de emparelhamento Δ_k abre um gap para qualquer valor de k nesse intervalo. Em (g) e (h) o sistema está sempre com um gap independente do valor de Δ_k assemelhando-se ao caso visto em (a).

I.3. Estados de Shockley

Nesta seção discutiremos o núcleo do trabalho, uma vez que temos o interesse de detectar os Férmions de Majorana pelos defeitos de Shockley. Estes surgem da ausência de átomos na rede cristalina, ou seja, descontinuidades na rede, aparecendo desta forma estados de borda conhecidos como estados de Shockley[11].

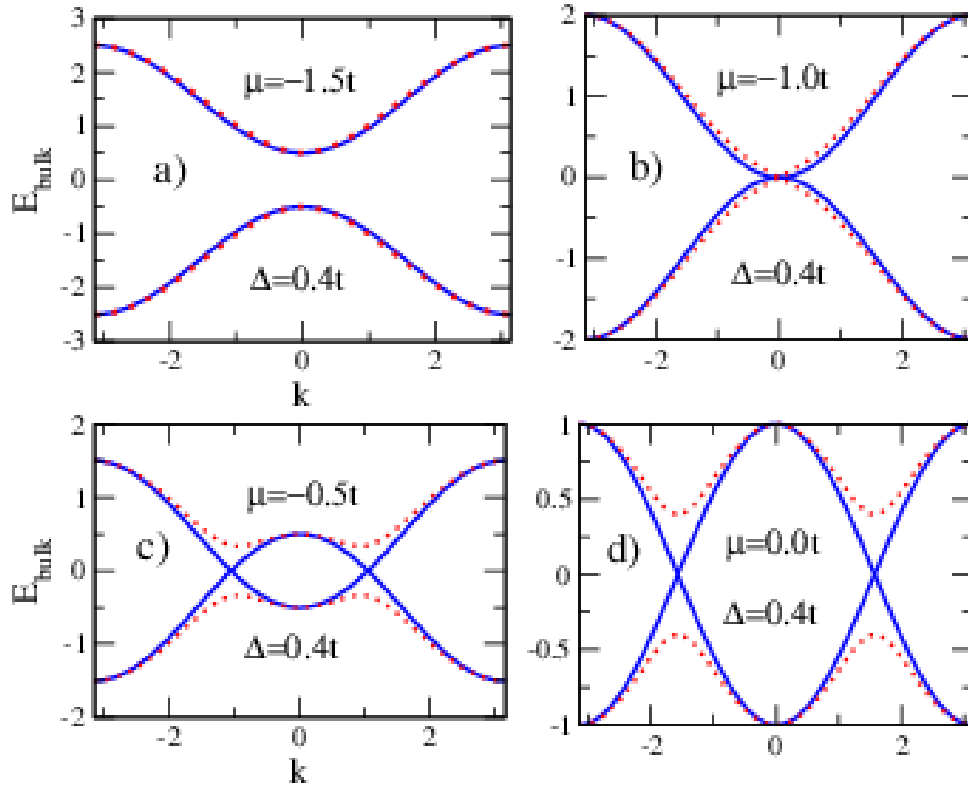


Figura 5. Curvas cheias (azuis) representam a cadeia linear “tight-binding” na ausência de supercondutividade, cuja relação de dispersão é dada pela Eq. 4. Curvas tracejadas (vermelhas) representam a cadeia de Kitaev fora da fase topológica: ($\Delta = 0.4t \neq \mu$), podemos notar a transição da fase trivial para a fase topológica em $\mu = -1, 0$, Vale notar que utilizamos $\Delta = 0.4t$ pois do contrario, se $\Delta = 0$ então perderíamos o efeito.

Tamm foi o primeiro a estudar cadeias com defeitos. Ele considerou as funções de onda para o modelo de Kronig e Penny [12] semi-infinito [13] e encontrou que estados de superfície podem aparecer quando existir uma superfície de potencial de perturbação e esta for suficientemente forte. Já Shockley considerou um cristal geral unidimensional contendo um número finito de átomos com simetria de poços de potencial, e observou que quando o volume(bulk) das bandas estão cruzados um novo tipo de estados de superfície aparece no meio do gap da banda mesmo se não existir superfície de potencial de perturbação [11]. Ambos usaram o método de combinar a função de onda e sua derivada na superfície do cristal, esta foi tomada como uma descontinuidade no potencial, em outras palavras, a ausência de um átomo na rede.

Em resumo, os estados de superfície que surgem como soluções para a equação de Schrödinger na estrutura da aproximação do elétron quase livre para superfícies limpas e ideais são chamados de estados de Shockley. Os estados de Shockley são, portanto, estados que surgem devido à mudança no potencial do elétron associado apenas à terminação do cristal. Esta abordagem é adequada para descrever metais normais e alguns semicondutores de gap estreito. Os estados de superfície que são calculados na estrutura de um modelo de tight-binding costumam ser chamados de estados de Tamm. Na abordagem de tight-binding, as funções de onda eletrônica são geralmente expressas como combinações lineares de orbitais atômicos. Em contraste com o modelo de elétron quase livre usado para descrever os estados de Shockley,

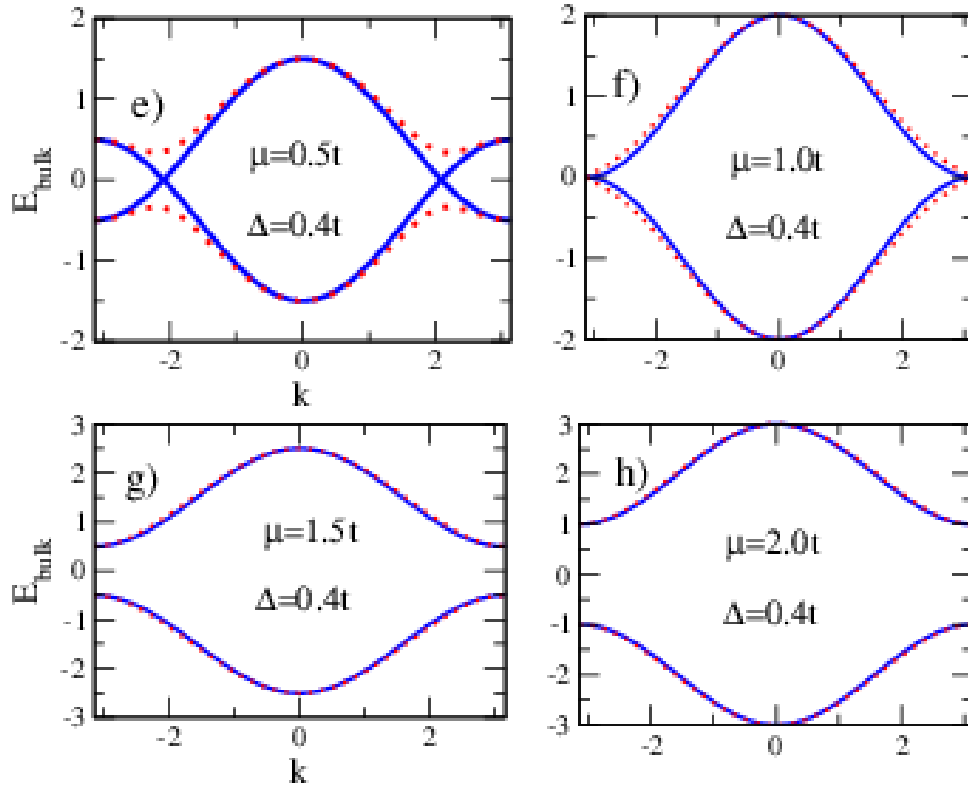


Figura 6. Curvas cheias(azuis) representam a cadeia linear “tight-binding” na ausência de supercondutividade, cuja relação de dispersão é dada pela Eq. 4. Curvas tracejadas (vermelhas) representam a cadeia de Kitaev fora da fase topológica: ($\Delta = 0.4t \neq \mu$), aqui de maneira análoga Fig. 5, podemos observar que há uma mudança de fase no sistema, no entanto com a diferença que a transição topológica ocorre em $\mu = t$ o que mostra que a física das duas transições são distintas. Na Fig. 5 a banda está completamente vazia e o potencial químico se encontra no fundo da banda enquanto que no presente gráfico a banda esta completamente cheia estando o potencial químico no topo da banda.

os estados de Tamm são adequados para descrever também metais de transição e semicondutores de gap largo.

Uma das mais sofisticadas teorias gerais de estados de superfície nesta linha foi introduzida por Kalstein e Soven (KS) [14]. O formalismo da função de Green deles foi capaz de investigar a densidade de estados e a dispersão dos estados de volume(bulk) e superfície em cristais semi-infinitos. A vantagem dessa teoria é que o formalismo é mais simples e seus resultados são exatos. A teoria da função de Green é mais indicada no tratamento de cristais que consistem de átomos com orbitais localizados. Esta teoria será utilizada futuramente quando começarmos a estudar a cadeia SP. Um exemplo de experimento que utiliza dos defeitos de Shockley é o trabalho de Dong-Ling [15] que se trata de uma superfície com discontinuidades em cadeia tal como pode ser observado na figura 8.

Estes estados são desprotegidos e podem ser retirados do gap da banda por perturbações locais, entretanto, em um supercondutor, a simetria partícula-buraco requer que o espectro de energia seja simétrico, dessa forma um estado ligado isolado é obrigado a estar em $E=0$ e não pode ser removido por

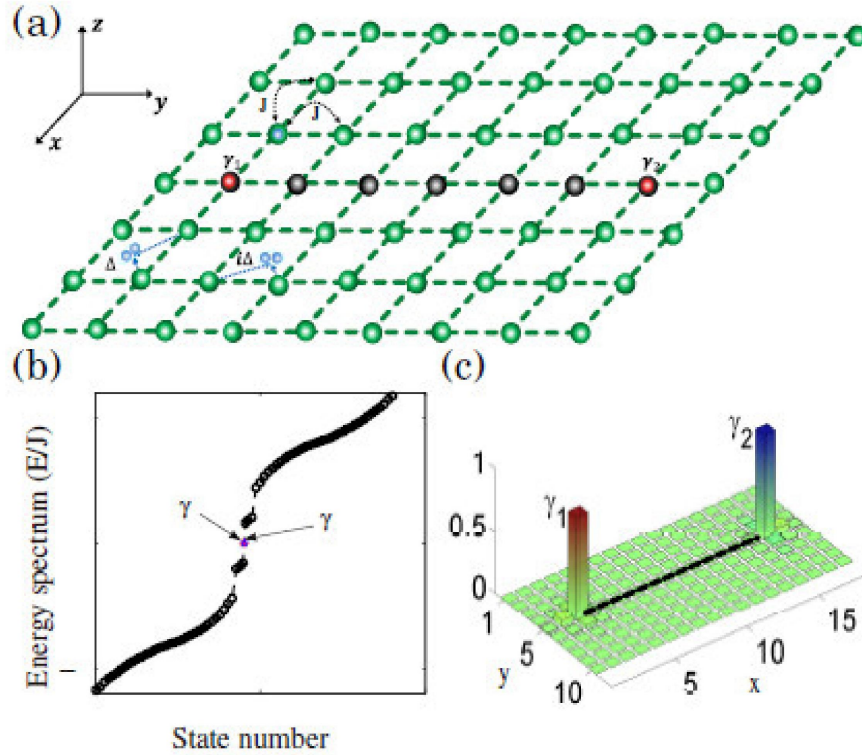


Figura 7. (a) Superfície composta por átomos fermiônicos frios, onde J e Δ denotam o hopping entre os primeiros vizinhos e a força de emparelhamento (emparelhamento superconductor). uma linha de defeitos com potencial químico local diferente liga os dois Majoranas de energia zero γ_1 e γ_2 (círculos vermelhos) nas pontas. (b) Espectro de energia do Hamiltoniano H em uma superfície quadrada com tamanho 18×10 a com limites abertos. O comprimento da linha do defeito é $14a$. Os Majoranas de energia zero tem energia de espalhamento pequena devido ao tamanho pequeno da linha de defeitos, que é numericamente encontrado sendo $< 10^{-10} J$ para os parâmetros assumidos. (c) A amplitude dos modos γ_1 e γ_2 . a linha preta indica a linha de defeitos com potencial químico μ_d . Os parâmetros escolhidos foram $\Delta = J$, $\mu_0 = 10J$ e $\mu_d = 0.1J$.

qualquer perturbação local. Como podemos verificar no gráfico 8

Com isso os defeitos de Shockley se tornam bons candidatos para a realização dos Majoranas, uma vez que estes são estados de energia zero e que surgem nas pontas da cadeia.

I.4. Coeficientes termoelétricos

Neste capítulo introduziremos as propriedades termoelétricas que são importantes para verificarmos se há existência de Majoranas nas cadeias. Os coeficientes de transporte consistentes são dados por

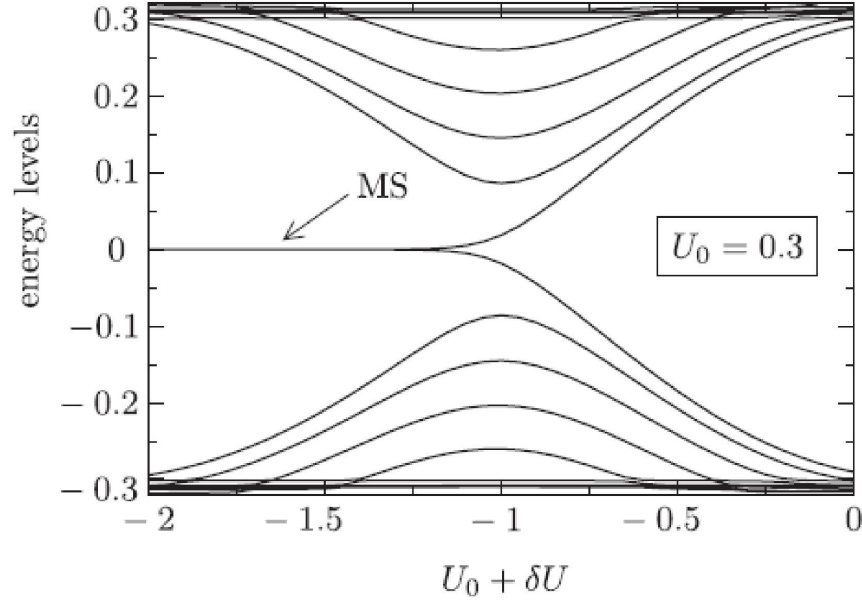


Figura 8. Surgimento de um par de estados de Majorana de energia zero como potencial de defeito, onde U_0 é o potencial eletrostático uniforme da superfície (sem defeitos) e δU o potencial do defeitos [2].

$$\mathcal{L}_n(T) = \frac{2}{h} \int \left(-\frac{\partial n_F(T)}{\partial \omega} \right) \omega^n \mathcal{T}(\omega) d\omega, \quad (6)$$

onde h é a constante de Planck, $\Gamma = 2\pi V^2 \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$ o parâmetro de Anderson e n_F a distribuição de Fermi-Dirac, lembrando que $n_F = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}$ e a quantidade \mathcal{T} é a transmitância através do ponto quântico definida como:

$$\mathcal{T} = -\Gamma \text{Im}(G_0).$$

Utilizando da equação 6 temos que [10]:

$$J_e = e^2 L_o(-\Delta V) + \frac{e}{T} L_1(-\Delta T), \quad (7)$$

$$J_Q = e L_1(-\Delta V) + \frac{1}{T} L_2(-\Delta T), \quad (8)$$

onde e denota a magnitude da carga elétrica e $L_o(T)$, $L_1(T)$ e $L_2(T)$ são os coeficientes de transporte.

A condutância elétrica G é medida em condições isotérmicas $\Delta T = 0$. A partir da Eq. 7 teremos

$$J_e = e^2 L_o(-\Delta V), \quad (9)$$

e da definição de condutância elétrica [16]

$$G(T) = - \lim_{\Delta V \rightarrow 0} J_e / \Delta V |_{\Delta T=0} = e^2 L_o(T). \quad (10)$$

A contribuição eletrônica para a condutância térmica (κ) é geralmente medida colocando a amostra em um circuito elétrico aberto, de tal forma que $J_e = 0$. Da Eq. 7

$$(-\Delta V) = \frac{1}{eT} \frac{L_1}{L_o} (\Delta T). \quad (11)$$

Substituindo a Eq. 11 na Eq. 8 obtemos

$$J_Q = \frac{1}{T} \left(L_2 - \frac{L_1^2}{L_o} \right) (-\Delta T), \quad (12)$$

e da definição de condutância térmica [16]

$$\kappa(T) = - \lim_{\Delta T \rightarrow 0} J_Q / \Delta T |_{J_e=0} = \frac{1}{T} \left(L_2(T) - \frac{L_1^2(T)}{L_o(T)} \right). \quad (13)$$

Simplificaremos não considerando a contribuição dos fônons para a condutância térmica. Geralmente, há efeitos de interação entre correntes elétricas e térmicas. A termo potência (efeito Seebeck) é definida pela relação [16]

$$S = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \Delta V / \Delta T |_{J_e=0} = \left(\frac{-1}{eT} \right) \frac{L_1(T)}{L_o(T)}. \quad (14)$$

Podemos também investigar a violação da lei de Wiedemann-Franz, onde esta define que a razão entre as condutâncias térmica e elétrica é uma constante para metais, sendo esta constante chamada de constante de Lorentz, dada por:

$$WF = \frac{1}{T} \left(\frac{K}{G} \right), \quad (15)$$

em unidades do número de Lorentz $L_0 = (\pi^2/3)(k_B/e)^2$. E o correspondente comportamento da figura termoelétrica de mérito adimensional [17]

$$ZT = \frac{S^2 GT}{K}. \quad (16)$$

Para calcular os coeficientes de transporte L_o , L_1 e L_2 , seguimos o artigo de Dong e X. L. Lei [18], que derivou a corrente de partículas e fórmulas de fluxo térmico, através de um PQ com interações eletrônicas conectado a dois reservatórios de calor, um quente e outro frio, através da formulação das funções de Green de não-equilíbrio de Keldysh. Os coeficientes de transporte elétrico e termoelétrico foram obtidos na presença do potencial químico e os gradientes de temperatura com a relação Onsager no regime linear automaticamente satisfeita. É importante observar também que no regime de baixas temperaturas obtemos a expressão analítica para os coeficientes termoelétricos:

$$\frac{G}{G_0} = \frac{K}{G_0 L_0 T} \approx \mathcal{T} |_{\varepsilon=0}, \quad (17)$$

$$S \approx e L_0 T \left. \frac{1}{T} \frac{d\mathcal{T}}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0}, \quad (18)$$

II. CADEIA SSH

II.1. Introdução

Nesta seção introduziremos a cadeia estudada por Su-Schrieffer-Heeger ou mais conhecida como cadeia SSH. Trata-se de uma cadeia linear composta por polímeros que possuem ligações simples e duplas alternadamente[19] como podemos ver na figura 9.

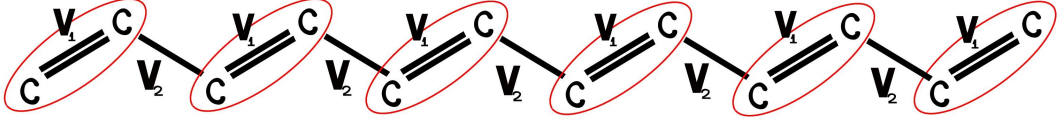


Figura 9. Cadeia SSH composta por polímeros, onde cada elipse vermelha representa uma célula unitária

A Hamiltoniana deste modelo é dada por:

$$\begin{aligned}
 H_{SSH} &= -V_1 \sum_n (|n, 2\rangle \langle n, 1| + |n, 1\rangle \langle n, 2|) \\
 &\quad -V_2 \sum_n (|n+1, 1\rangle \langle n, 2| + |n, 2\rangle \langle n+1, 1|),
 \end{aligned} \tag{19}$$

onde V_1 e V_2 são termos de hopping alternados como na figura 9. Este modelo é equivalente a uma cadeia SP com interação intra-sítios [20] onde V_1 e V_2 são neste caso termos de hibridização intra e inter-células respectivamente. Com o Hamiltoniano da cadeia SSH tomamos a transformada de Fourier:

$$\begin{aligned}
 H_{SSH} &= -V_1 \sum_k (|k, 2\rangle \langle k, 1| + |k, 1\rangle \langle k, 2|) \\
 &\quad -V_2 \sum_k (e^{-ik} |k, 1\rangle \langle k, 2| + e^{ik} |k, 2\rangle \langle k, 1|),
 \end{aligned}$$

matricialmente

$$H(k) = - \begin{pmatrix} 0 & V_1 + V_2 e^{-ik} \\ V_1 + V_2 e^{ik} & 0 \end{pmatrix},$$

$$H(k) = - \begin{pmatrix} 0 & h^*(k) \\ h(k) & 0 \end{pmatrix},$$

onde $h(k) = V_1 + V_2 e^{ik}$.

Estudamos as fases topológicas da cadeia SSH por intermédio do winding number que foi obtido no apêndice V.8 que é definida pela equação

$$W = 1/2\pi \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{e^{-ik}}{e^{-ik} - \mathcal{S}},$$

onde $\mathcal{S} = \frac{-V_1}{V_2}$. Quando $|\mathcal{S}| > 1 \Rightarrow W = 0$ o sistema esta na fase trivial, se $|\mathcal{S}| < 1 \Rightarrow W = 1$ o sistema esta na fase topológica e se $|\mathcal{S}| = 1$, W não é definido pois este da um salto na transição de fase.

II.2. Função de Green e densidade de estados na superfície

Com o Hamiltoniano 19 definido podemos prosseguir e calcular a função de Green na superfície usando do método desenvolvido por Foo e Thorpe[20] e apresentado no apêndice V.6

$$g = \begin{pmatrix} E & V_1 & 0 \\ V_1 & E & V_2 \\ 0 & V_2 & g^{-1} \end{pmatrix}^{-1}.$$

Podemos agora calcular a matriz inversa e consideraremos apenas o primeiro átomo da cadeia:

$$g = \frac{1}{E^2/g - V_2^2 E - V_1^2/g} \begin{pmatrix} E/g - V_2^2 & -V_1/g & V_1 V_2 \\ -V_1/g & E/g & -E V_2 \\ V_1 V_2 & -E V_2 & E^2 - V_1^2 \end{pmatrix}_{00},$$

$$g = \frac{E/g - V_2^2}{E^2/g - V_2^2 E - V_1^2/g},$$

$$g = \frac{E - V_2^2 g}{E^2 - V_2^2 E g - V_1^2},$$

$$(V_2 g)^2 E - g \frac{(E^2 + V_2^2 - V_1^2)}{E} + 1 = 0,$$

$$(V_2 g)^2 E - 2\alpha V_2 g + 1 = 0,$$

onde $\alpha = \frac{(E^2 + V_2^2 - V_1^2)}{2V_2 E}$ logo concluímos que:

$$g = \frac{1}{2V_2^2 E} [E^2 + V_2^2 - V_1^2 \pm [(E^2 + V_2^2 - V_1^2)^2 - 4E^2 V_2^2]^{1/2}], \quad (20)$$

$$g = \frac{1}{2E} ((\bar{E}^2 - \delta^2 + 1) \pm ((\bar{E}^2 - \delta^2 + 1)^2 - 4\bar{E}^2)^{\frac{1}{2}}), \quad (21)$$

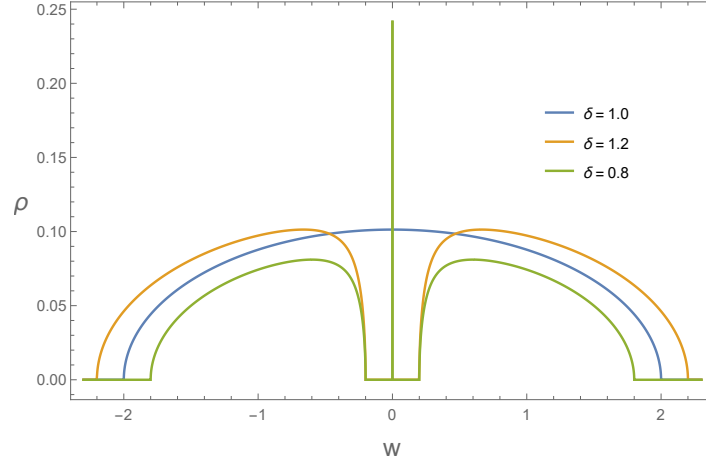


Figura 10. Densidade de estados na superfície da cadeia SSH semi-infinita para diversos valores de δ , note que quando $\delta < 1.0$ há o surgimento de um pico na densidade de estados que é associado aos estados de superfície de Shockley, para $\delta = 1.0$ o sistema tem uma transição de fase dando origem a uma banda única e quando $\delta > 1.0$ o sistema não apresenta mais estados de superfície de modo que estes estados se recombinam dando origem a duas bandas de energia que se afastam a medida em que aumentamos o valor de δ .

tal que $\bar{E} = \frac{E}{V_2}$ e $\delta = \frac{V_1}{V_2}$

Com a função de Green calculamos então a densidade de estados de superfície da cadeia SSH descrita pela equação 20. No gráfico 10 temos a densidade de estados de superfície do cristal para valores distintos de δ . Note que os estados de Shockley (densidade de estados com pico de energia zero) ocorrem para valores de $\delta < 1$, isso acontece pois há uma superposição das bandas de energia. Vale ressaltar que este pico de densidade é associado também aos férmions de Majorana.

Podemos calcular também o número de ocupação da cadeia SSH semi-infinita utilizando da equação 22

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} dE \mathcal{F}(E) \text{Im} \mathcal{G}(0, 0) = 1, \quad (22)$$

vale ressaltar que esse resultado é importante pois como veremos no próximo capítulo, a cadeia SP semi-infinita tem o comportamento análogo ao da cadeia SSH no entanto as cadeias são distintas por conta do número de ocupação.

III. A CADEIA SP

III.1. Introdução

Nesta seção introduziremos a cadeia estudada por Foo e Wong conhecida como cadeia SP. Trata-se de uma cadeia linear de átomos com dois orbitais[3] como podemos ver na figura 11.

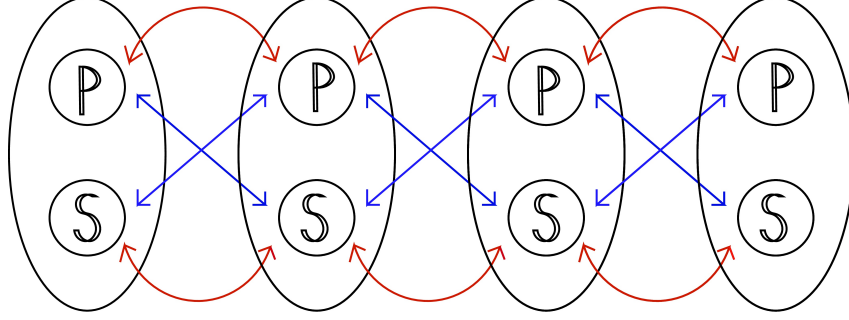


Figura 11. Cadeia SP com dois orbitais por sítio, note que a interação é inter-sítio onde as curvas azuis são referentes aos hoppings entre níveis diferentes enquanto as curvas vermelhas são referentes aos hoppings entre níveis iguais.

O Hamiltoniano que descreve a cadeia SP [21] é dado por:

$$\begin{aligned}
 H = \varepsilon_s \sum_j c_j^\dagger c_j + \varepsilon_p \sum_j p_j^\dagger p_j - \sum_j t_s (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) + \sum_j t_p (p_j^\dagger p_{j+1} + p_{j+1}^\dagger p_j) \\
 + V_{sp} \sum_j (c_j^\dagger p_{j+1} - c_{j+1}^\dagger p_j) - V_{ps} \sum_j (p_j^\dagger c_{j+1} - p_{j+1}^\dagger c_j),
 \end{aligned} \quad (23)$$

onde os primeiro e segundo termos são associados aos níveis de energia dos elétrons das camadas s e p , os terceiro e quarto termos representam o hopping entre elétrons do mesmo orbital inter-sítios e os quinto e sexto termos descrevem a hibridização entre elétrons de orbitais diferentes de sítios vizinhos. $c_j^\dagger(c_j)$ e $p_j^\dagger(p_j)$ são os operadores de criação (aniquilação) dos elétrons dos orbitais s e p respectivamente. Devido a diferença de paridade dos orbitais a hibridização inter-sítio tem paridade ímpar, isto é, $V_{sp}(-x) = -V_{sp}(x)$. Outro ponto interessante é que podemos comparar a cadeia SP com a cadeia de Kitaev de forma que com algumas considerações sobre a SP obtemos a de Kitaev, basta escolhermos $t_s = t_p = t$, $\varepsilon_s^0 = -\varepsilon_p^0 = \mu$ e $V_{sp} = -V_{ps} = \Delta$ para que isto aconteça [21].

Podemos então definir os operadores fermiônicos da cadeia SP em função dos férmions de Majorana. Vale lembrar que teremos Majoranas oriundos do nível s: α_{ki} , e Majoranas do nível p: β_{ki} onde $k = A, B$:

$$c_i = \frac{\alpha_{Bi} + i\alpha_{Ai}}{\sqrt{2}}$$

e

$$p_i = \frac{\beta_{Bi} + i\beta_{Ai}}{\sqrt{2}}.$$

Como em cada sítio da cadeia temos dois níveis, consequentemente teremos dois majoranas em cada extremidade. Considerando então o caso simétrico ($t_s = t_p = t$, $\varepsilon_s^0 = -\varepsilon_p^0 = \varepsilon$) e aplicando as equações 24 e 24 na equação 37 temos:

$$H = i\varepsilon \sum_i^N (\alpha_{Bi}\alpha_{Ai} - \beta_{Bi}\beta_{Ai}) - it \sum_i^{N-1} (\alpha_{Bi}\alpha_{Ai+1} - \alpha_{Ai}\alpha_{Bi+1}) \\ + it \sum_i^{N-1} (\beta_{Bi}\beta_{Ai+1} - \beta_{Ai}\beta_{Bi+1}) \\ + iV \sum_i^{N-1} (\alpha_{Bi}\beta_{Ai+1} - \beta_{Bi}\alpha_{Ai+1} - \alpha_{Ai}\beta_{Bi+1} + \beta_{Ai}\alpha_{Bi+1}).$$

Note que o sistema esta na fase não trivial quando $\varepsilon/2t = 1$.

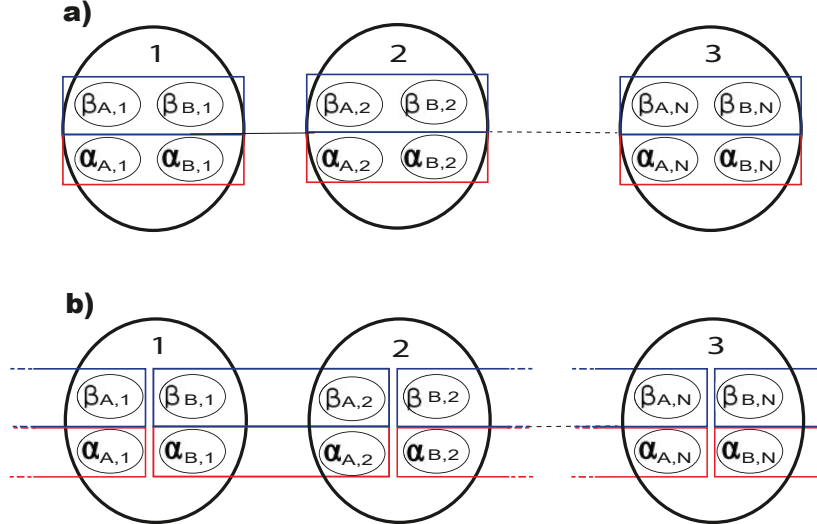


Figura 12. Cadeia SP em termos dos Majoranas s e p sem interação entre os níveis.

Na figura 12 temos as duas fases pictoricamente representadas, a princípio não estamos levando em consideração a interação entre os Majoranas s e p. A fase trivial é representada pela figura 12a) que descreve como pode ser visto na figura a interação entre Majoranas do mesmo sítio. A fase topológica é descrita pela figura 12b) que é referente a interação entre Majoranas de sítios vizinhos.

Definimos agora dois novos operadores essenciais para a compreensão do comportamento dos férmions de Majorana na cadeia SP. Como dito anteriormente temos dois Majoranas para cada orbital, totalizando em quatro Majoranas nas pontas sendo dois em cada uma. Dessa forma se torna interessante a definição de operadores que tratam do fluxo de elétrons para a esquerda (l) e para a direita (r) da cadeia

:

$$r_i = c_i + p_i = \frac{(\alpha_{Bi} + \beta_{Bi})}{\sqrt{2}} + i \frac{(\alpha_{Ai} + \beta_{Ai})}{\sqrt{2}} = \gamma_{Bi}^+ + i\gamma_{Ai}^+,$$

e

$$l_i = c_i - p_i = \frac{(\alpha_{Bi} - \beta_{Bi})}{\sqrt{2}} + i \frac{(\alpha_{Ai} - \beta_{Ai})}{\sqrt{2}} = \gamma_{Bi}^- + i\gamma_{Ai}^-.$$

Note que surgem outros quatro operadores : $\gamma_{Bi}^-, \gamma_{Ai}^-, \gamma_{Bi}^+, \gamma_{Ai}^+$. Estes estão associados a hibridização entre os Majoranas das pontas da cadeia que dão origem a elétrons hibridizados. Podemos então expressar a equação 40 em função dos γ 's.

$$H = i\frac{\varepsilon}{2} \sum_i^N (\gamma_{Bi}^+ \gamma_{Ai}^- - \gamma_{Ai}^+ \gamma_{Bi}^-) + 2i(V - t) \sum_i^{N-1} (\gamma_{Bi}^- \gamma_{Ai+1}^+ - \gamma_{Ai}^- \gamma_{Bi+1}^+) - 2i(V + t) \sum_i^{N-1} (\gamma_{Bi}^+ \gamma_{Ai+1}^- - \gamma_{Ai}^+ \gamma_{Bi+1}^-).$$

No primeiro termo a interação acontece entre os elétrons hibridizados no mesmo sítio. Os segundo e terceiro termos estão associados a elétrons hibridizados em sítios vizinhos. Vale ressaltar que os modos $\gamma_{BN}^-, \gamma_{AN}^+, \gamma_{A1}^-$ e γ_{B1}^+ que não aparecem dos ultimos dois termos do Hamiltoniano não contribuem para a energia do sistema, isto é, são modos de energia zero. Estes modos estão associados aos estados de borda que surgem nas pontas da cadeia SP.

onde

$$\begin{aligned} \gamma_{Ai}^\pm &= \alpha_{Ai} \pm \beta_{Ai} \\ \gamma_{Bi}^\pm &= \alpha_{Bi} \pm \beta_{Bi}. \end{aligned}$$

Conectamos a cadeia a um reservatório cujo o operador associado é b e obtemos o Hamiltoniano para o sistema

$$\mathcal{H}_{cb} = v_L(l^\dagger b + b^\dagger l) + v_R(r^\dagger b + b^\dagger r).$$

Perceba que ao assumirmos o caso simétrico ($v_L = v_R = v$) ficamos com o Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{cb} = 2v(c^\dagger b + b^\dagger c).$$

Isto significa que dois elétrons s saltam para o reservatório sobrando dois Majoranas do tipo p e para o caso antissimétrico acontece o contrário, tunelam dois elétrons p tunelam para o reservatório e sobram dois Majoranas do tipo s .

III.2. Cálculo da função de Green de superfície da cadeia SP com hibridização inter-sítio

O Hamiltoniano definido para a cadeia SP na equação 24 pode ser descrito também na base dos autovetores dos elétrons s e p de maneira que:

$$\mathcal{H}_{ss} = \varepsilon_s \sum_n |n, s\rangle\langle n, s| - \beta_{ss} \sum_n (|n+1, s\rangle\langle n, s| + |n, s\rangle\langle n+1, s|),$$

que em função dos operadores de criação e aniquilação é descrito por:

$$\mathcal{H}_{ss} = \varepsilon_s \sum_n c_n^\dagger c_n - \beta_{ss} \sum_n (c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}), \quad (24)$$

a equação 24 esta associada aos processos que envolvem apenas elétrons s.

$$\mathcal{H}_{pp} = \varepsilon_p \sum_n |n, p\rangle\langle n, p| + \beta_{pp} \sum_n (|n+1, p\rangle\langle n, p| + |n, p\rangle\langle n+1, p|),$$

que também pode ser definido por operadores de criação e aniquilação

$$\mathcal{H}_{pp} = \varepsilon \sum_n p_n^\dagger p_n + \beta_{pp} \sum_n (p_{n+1}^\dagger p_n + p_{n,p}^\dagger p_{n+1}), \quad (25)$$

a equação 25 é relativa aos processos que envolvem apenas elétrons p.

$$\mathcal{H}_{sp} = \beta_{sp} \sum_n (|n, s\rangle\langle n+1, p| - |n+1, s\rangle\langle n, p|),$$

$$\mathcal{H}_{ps} = -\beta_{ps} \sum_n (|n, p\rangle\langle n+1, s| - |n+1, p\rangle\langle n, s|),$$

que também podem ser escritas como

$$\mathcal{H}_{sp} = \beta_{sp} \sum_n (c_n^\dagger p_{n+1} - c_{n+1}^\dagger p_n), \quad (26)$$

$$\mathcal{H}_{ps} = -\beta_{ps} \sum_n (p_n^\dagger c_{n+1} - p_{n+1}^\dagger c_n), \quad (27)$$

as equações 26 e 27 são associadas aos processos que envolvem ambos os elétrons s e p com a peculiaridade de que na eq 26 os elétrons p são destruídos e os s são criados enquanto que na eq 27 acontece o contrário. Esta redefinição do Hamiltoniano da cadeia SP tem o intuito de simplificar o cálculo da função de Green de superfície de um cristal uma vez que utilizaremos esta para obtermos o Hamiltoniano na notação matricial.

Considere agora um cristal unidimensional qualquer, contendo um número infinito de átomos com poços de potencial simétricos. Quando o bulk das bandas estão cruzados um novo tipo de estado de superfície aparece no meio do gap mesmo se não houver perturbação do potencial de superfície [22].

A diferença entre um cristal perfeito e um cristal clivado é o potencial espalhador, de forma que , a função de Green do cristal clivado pode ser descrita em termos da função de Green do cristal perfeito e do potencial espalhador introduzindo assim o plano clivado. Aplicaremos a função de Green para o caso de uma superfície unidimensional constituída por átomos com dois orbitais atômicos. Por simplicidade usaremos a aproximação de tight-binding assim como foi feito no trabalho do Foo [3] e assumiremos que os orbitais estão localizados em cada sítio da superfície e são mutuamente ortogonais.

O Hamiltoniano do cristal perfeito é definido por:

$$\mathcal{H}_0 = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{ss} & \mathcal{H}_{sp} \\ \mathcal{H}_{ps} & \mathcal{H}_{pp} \end{pmatrix}. \quad (28)$$

Como estamos trabalhando agora com uma cadeia infinita podemos fazer uma transformada de Fourier nos termos da matriz 28, de forma que a transformada de Fourier é definida por.

$$|n, l\rangle = \sum_k |k, l\rangle e^{-ikna},$$

onde $l = s, p$ e a é o parâmetro de rede. Basta agora calcularmos cada um dos termos da matriz:

Para o termo \mathcal{H}_{ss} temos:

$$\mathcal{H}_{ss} = \varepsilon_s \sum_n \sum_k e^{-ikna} e^{ikna} |k, s\rangle \langle k, s| - \beta_{ss} \sum_n \sum_k (e^{-ikna} e^{ik(n+1)a} |k, s\rangle \langle k, s| + e^{-ik(n+1)a} e^{ikna} |k, s\rangle \langle k, s|),$$

$$\mathcal{H}_{ss} = \varepsilon_s \sum_k |k, s\rangle \langle k, s| - \beta_{ss} \sum_k (e^{ika} |k, s\rangle \langle k, s| + e^{-ika} |k, s\rangle \langle k, s|),$$

$$\mathcal{H}_{ss} = \varepsilon_s \sum_k |k, s\rangle \langle k, s| - \beta_{ss} \sum_k (2 \cos(ka) |k, s\rangle \langle k, s|).$$

Para \mathcal{H}_{pp} :

$$\mathcal{H}_{pp} = \varepsilon_p \sum_n \sum_k e^{-ikna} e^{ikna} |k, p\rangle \langle k, p| + \beta_{pp} \sum_n \sum_k (e^{-ikna} e^{ik(n+1)a} |k, p\rangle \langle k, p| + e^{-ik(n+1)a} e^{ikna} |k, p\rangle \langle k, p|),$$

$$\mathcal{H}_{pp} = \varepsilon_p \sum_k |k, p\rangle \langle k, p| + \beta_{pp} \sum_k (e^{ika} |k, p\rangle \langle k, p| + e^{-ika} |k, p\rangle \langle k, p|),$$

$$\mathcal{H}_{pp} = \varepsilon_p \sum_k |k, p\rangle \langle k, p| + \beta_{pp} \sum_k (2 \cos(ka) |k, p\rangle \langle k, p|).$$

Para \mathcal{H}_{sp} :

$$\mathcal{H}_{sp} = \beta_{sp} \sum_n \sum_k (e^{-ikna} e^{ik(n+1)a} |k, s\rangle \langle k, p| - e^{-ik(n+1)a} e^{ikna} |k, s\rangle \langle k, p|),$$

$$\mathcal{H}_{sp} = \beta_{sp} \sum_k (e^{ika} |k, s\rangle \langle k, p| - e^{-ika} |k, s\rangle \langle k, p|),$$

$$\mathcal{H}_{sp} = \beta_{sp} \sum_k (2i \sin(ka) |k, s\rangle \langle k, p|),$$

Para \mathcal{H}_{ps} :

$$\mathcal{H}_{ps} = -\beta_{ps} \sum_n \sum_k (e^{-ikna} e^{ik(n+1)a} |k, p\rangle \langle k, s| - e^{-ik(n+1)a} e^{ikna} |k, p\rangle \langle k, s|),$$

$$\mathcal{H}_{ps} = -\beta_{ps} \sum_k (e^{ika} |k, p\rangle \langle k, s| - e^{-ika} |k, p\rangle \langle k, s|),$$

$$\mathcal{H}_{ps} = -\beta_{ps} \sum_k (2i \sin(ka) |k, p\rangle \langle k, s|),$$

Definimos então os elementos da matriz como:

$$\mathcal{H}_{l,l'}(k) = \langle k, l | \mathcal{H}_0 | k, l' \rangle.$$

Dessa forma podemos calcular os termos:

$$\mathcal{H}_{ss}(k) = \langle k, s | \mathcal{H}_0 | k, s \rangle = \varepsilon_s - 2\beta_{ss} \cos(ka),$$

$$\mathcal{H}_{sp}(k) = \langle k, s | \mathcal{H}_0 | k, p \rangle = 2i\beta_{sp} \sin(ka),$$

$$\mathcal{H}_{ps}(k) = \langle k, p | \mathcal{H}_0 | k, s \rangle = -2i\beta_{ps} \sin(ka),$$

$$\mathcal{H}_{pp}(k) = \langle k, p | \mathcal{H}_0 | k, p \rangle = \varepsilon_p + 2\beta_{pp} \cos(ka),$$

Assim o Hamiltoniano no espaço dos k 's é :

$$\mathcal{H}_0(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_s - 2\beta_{ss} \cos(ka) & 2i\beta_{sp} \sin(ka) \\ -2i\beta_{ps} \sin(ka) & \varepsilon_p + 2\beta_{pp} \cos(ka) \end{pmatrix}.$$

Com este podemos agora calcular a função de Green utilizando a definição:

$$G_0(k) = [E - \mathcal{H}_0(k)]^{-1},$$

$$G_0(k) = \left[\begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & E \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \varepsilon_s - 2\beta_{ss} \cos(ka) & 2i\beta_{sp} \sin(ka) \\ -2i\beta_{ps} \sin(ka) & \varepsilon_p + 2\beta_{pp} \cos(ka) \end{pmatrix} \right]^{-1},$$

$$G_0(k) = \left[\begin{pmatrix} E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka) & 2i\beta_{sp} \sin(ka) \\ -2i\beta_{ps} \sin(ka) & E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka) \end{pmatrix} \right]^{-1}.$$

Definimos então

$$G'_0(k) = \begin{pmatrix} E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka) & 2i\beta_{sp} \sin(ka) \\ -2i\beta_{ps} \sin(ka) & E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka) \end{pmatrix}.$$

Mas a inversa de uma matriz é dada por:

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A} \text{Adj} A. \quad (29)$$

onde

$$\text{Adj} A = \bar{A}^t, \quad (30)$$

e

$$\bar{A}_{ij} = (-1)^{(i+j)} A_{ij}. \quad (31)$$

Desta forma, usando as propriedades dadas nas eq 29-31 temos

$$\det G'_0(k) = \begin{vmatrix} E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka) & 2i\beta_{sp} \sin(ka) \\ -2i\beta_{ps} \sin(ka) & E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka) \end{vmatrix}.$$

$$\det G'_0(k) = (E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka))(E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka)) - 4\beta_{sp}\beta_{ps} \sin^2(ka) = \Delta$$

$$\bar{G}'_0(k) = \begin{pmatrix} E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka) & -2i\beta_{sp} \sin(ka) \\ 2i\beta_{ps} \sin(ka) & E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka) \end{pmatrix}.$$

$$\text{Adj}G'_0(k) = \bar{G}'_0(k)^t,$$

$$\text{Adj}G'_0(k) = \begin{pmatrix} E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka) & 2i\beta_{ps} \sin(ka) \\ -2i\beta_{sp} \sin(ka) & E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka) \end{pmatrix}.$$

$$G_0(k) = [G'_0(k)]^{-1} = \frac{1}{\det G'_0(k)} \text{Adj}G'_0(k).$$

$$G_0(k) = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka) & 2i\beta_{ps} \sin(ka) \\ -2i\beta_{sp} \sin(ka) & E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka) \end{pmatrix}.$$

Onde $\Delta = (E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka))(E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka)) - 4i\beta_{sp}\beta_{ps} \sin^2(ka)$, considerando $\beta_{sp}^2 = \beta_{ps}^2 = \beta_{ss}\beta_{pp}$ temos que:

$$\Delta = ((E - \varepsilon_s) + 2\beta_{ss} \cos(ka))((E - \varepsilon_p) - 2\beta_{pp} \cos(ka)) - 4\beta_{ss}\beta_{pp} \sin^2(ka)$$

$$\Delta = (E - \varepsilon_s)(E - \varepsilon_p) + 2(E - \varepsilon_p)\beta_{ss} \cos(ka) - 2(E - \varepsilon_s)\beta_{pp} \cos(ka) - 4\beta_{ss}\beta_{pp} \cos^2(ka) - 4\beta_{ss}\beta_{pp} \sin^2(ka)$$

$$\Delta = (E - \varepsilon_s)(E - \varepsilon_p) + 2[(E - \varepsilon_p)\beta_{ss} - (E - \varepsilon_s)\beta_{pp}] \cos(ka) - 4\beta_{ss}\beta_{pp},$$

reorganizando obten-se

$$\Delta = [(E - \varepsilon_s)(E - \varepsilon_p) - 4\beta_{ss}\beta_{pp}] + 2\lambda \cos(ka),$$

$$\text{onde } \lambda = (E - \varepsilon_p)\beta_{ss} - (E - \varepsilon_s)\beta_{pp},$$

$$\Delta = 2\lambda[\alpha + \cos(ka)]$$

$$\text{e } \alpha = \frac{[(E - \varepsilon_s)(E - \varepsilon_p) - 4\beta_{ss}\beta_{pp}]}{2\lambda}.$$

Para proseguirmos com o cálculo da densidade de estados é necessário tomarmos a inversa da transformada de Fourier da função de Green, que é descrita por:

$$G_0(n) = \sum_k G_0(k) e^{-ikna}.$$

Calculando os elementos da matriz temos :

Para $G_{ss}^0(n)$:

$$G_{ss}^0(n) = \sum_k (E - \varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka)) \frac{e^{-ikna}}{\Delta},$$

$$G_{ss}^0(n) = \frac{1}{2\lambda} \left((E - \varepsilon_p) \sum_k \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))} - \beta_{pp} \sum_k (e^{ika} + e^{-ika}) \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))} \right),$$

$$G_{ss}^0(n) = \frac{1}{2\lambda} \left((E - \varepsilon_p) \sum_k \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))} - \beta_{pp} \sum_k \frac{e^{-ik(n-1)a}}{(\alpha + \cos(ka))} + \beta_{pp} \sum_k \frac{e^{-ik(n+1)a}}{(\alpha + \cos(ka))} \right),$$

$$G_{ss}^0(n) = \frac{1}{2\lambda} \left((E - \varepsilon_p)g(n) - \beta_{pp}(g(n-1) + g(n+1)) \right). \quad (32)$$

Para $G_{pp}^0(n)$:

$$G_{pp}^0(n) = \sum_k (E - \varepsilon_s + 2\beta_{ss} \cos(ka)) \frac{e^{-ikna}}{\Delta},$$

$$G_{pp}^0(n) = \frac{1}{2\lambda} \left((E - \varepsilon_s) \sum_k \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))} + \beta_{ss} \sum_k (e^{ika} + e^{-ika}) \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))} \right),$$

$$G_{pp}^0(n) = \frac{1}{2\lambda} \left((E - \varepsilon_s) \sum_k \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))} + \beta_{ss} \sum_k \frac{e^{-ik(n-1)a}}{(\alpha + \cos(ka))} + \beta_{pp} \sum_k k \frac{e^{-ik(n+1)a}}{(\alpha + \cos(ka))} \right), \quad (33)$$

$$G_{pp}^0(n) = \frac{1}{2\lambda} \left((E - \varepsilon_s)g(n) + \beta_{ss}(g(n-1) + g(n+1)) \right). \quad (34)$$

Para $G_{sp}^0(n)$:

$$G_{sp}^0(n) = \sum_k (2i\beta_{ps} \sin(ka)) \frac{e^{-ikna}}{\Delta},$$

$$G_{sp}^0(n) = \frac{1}{2\lambda} \left(\beta_{ps} \sum_k (e^{ika} - e^{-ika}) \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))} \right),$$

$$G_{sp}^0(n) = \frac{1}{2\lambda} \left(\beta_{ps} \sum_k \frac{e^{-ik(n-1)a}}{(\alpha + \cos(ka))} - \beta_{ps} \sum_k \frac{e^{-ik(n+1)a}}{(\alpha + \cos(ka))} \right),$$

$$G_{sp}^0(n) = \frac{\beta_{ps}}{2\lambda}(g(n-1) - g(n+1)). \quad (35)$$

Para $G_{ps}^0(n)$:

$$\begin{aligned} G_{ps}^0(n) &= \sum_k (-2i\beta_{sp} \sin(ka)) \frac{e^{-ikna}}{\Delta}, \\ G_{ps}^0(n) &= \frac{1}{2\lambda} (-\beta_{sp} \sum_k (e^{ika} - e^{-ika}) \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))}), \\ G_{ps}^0(n) &= \frac{1}{2\lambda} (-\beta_{sp} \sum_k \frac{e^{-ik(n-1)a}}{(\alpha + \cos(ka))} - \beta_{ps} \sum_k \frac{e^{-ik(n+1)a}}{(\alpha + \cos(ka))}), \\ G_{ps}^0(n) &= \frac{-\beta_{sp}}{2\lambda}(g(n-1) - g(n+1)). \end{aligned} \quad (36)$$

Onde:

$$g(n) = \sum_k \frac{e^{-ikna}}{(\alpha + \cos(ka))} = \frac{(-\alpha + \gamma)^{|n|}}{\gamma}, \quad (37)$$

e

$$\gamma = \begin{cases} \pm(\alpha^2 - 1)^{1/2}, & \text{se } \alpha > 1, \alpha < -1 \\ i(1 - \alpha^2)^{1/2}, & \text{se } |\alpha| \leq 1 \end{cases}$$

Note que estamos considerando uma cadeia infinita, desta forma calculamos a densidade de estados por intermédio da seguinte fórmula:

$$\rho(w) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(G_0(n)),$$

onde $G_0 = G_{ss}^0 + G_{pp}^0$. Resultando assim no gráfico 13 que descreve a densidade de estados com as contribuições dos elétrons s (curva vermelha) e elétrons p (curva azul) [23].

III.3. Cálculo do invariante topológico

Com o Hamiltoniano da cadeia SP calculado no início deste capítulo definido por:

$$H(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_s - 2\beta_{ss} \cos(ka) & -2i\beta_{sp} \sin(ka) \\ 2i\beta_{ps} \sin(ka) & -\varepsilon_p - 2\beta_{pp} \cos(ka) \end{pmatrix}$$

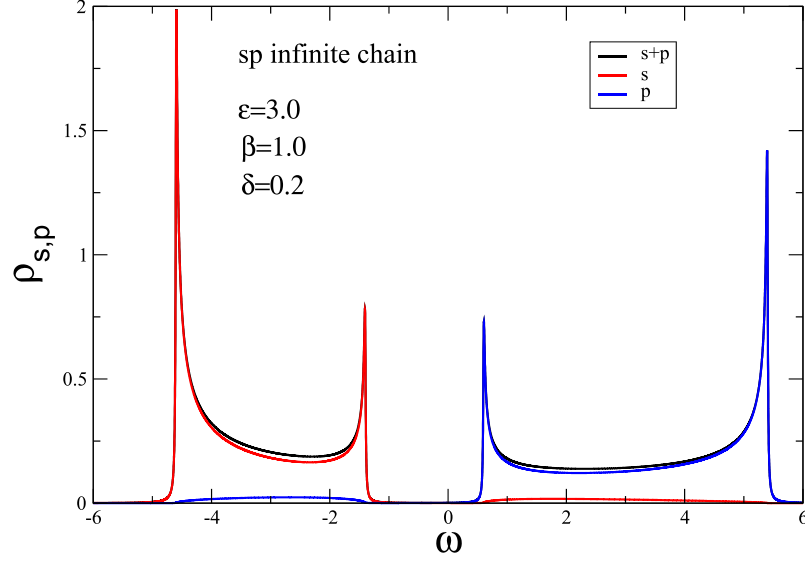


Figura 13. Densidade de estados da cadeia SP infinita com hibridização inter-sítio, onde $\varepsilon = \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_s}{2}$, $\beta_{ss} = \beta(1 - \delta)$ e $\beta_{pp} = \beta(1 + \delta)$.

estudamos as fases topológicas da cadeia SP por intermédio do winding number que é obtido pelo método introduzido no apêndice V.8. Por simplicidade consideremos o caso em que o sistema esta hibridizado ($\beta_{ss} = \beta_{sp} = \beta_{ps} = \beta_{pp} = h$) e que a simetria partícula buraco seja satisfeita ($\varepsilon_s = -\varepsilon_p = -\varepsilon$), o Hamiltoniano do sistema então seria definido por:

$$H(k) = \begin{pmatrix} -\varepsilon - 2h \cos(k) & -2ih \sin(k) \\ 2ih \sin(k) & \varepsilon - 2h \cos(k) \end{pmatrix}$$

$$H(k) = \begin{pmatrix} -E(k) & -iV(k) \\ iV(k) & E(k) \end{pmatrix}$$

onde $E(k) = \varepsilon - 2h \cos(k)$ e $V(k) = 2h \sin(k)$. Note que podemos expressar o Hamiltoniano em termos das matrizes de Pauli σ_z e σ_y

$$H(k) = \begin{pmatrix} -E(k) & -iV(k) \\ iV(k) & E(k) \end{pmatrix} = -E(k) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + V(k) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

dessa forma a matriz K que anti-comuta com $H(k)$ é a matriz de Pauli σ_x

$$K = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Calculando os auto-vetores associados a matriz K temos que a matriz U é definida por:

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

Calculamos então a matriz $H(A(k))$

$$U^\dagger H(k) U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -E(k) & -iV(k) \\ iV(k) & E(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$U^\dagger H(k) U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -2(E(k) - iV(k)) \\ -2(E(k) + iV(k)) & 0 \end{pmatrix}$$

$$U^\dagger H(k) U = - \begin{pmatrix} 0 & (E(k) - iV(k)) \\ (E(k) + iV(k)) & 0 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & A(k) \\ A^*(k) & 0 \end{pmatrix}$$

Com isso podemos calcular o winding number

$$W = \frac{-1}{2i\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \partial_k \ln(\text{Det} A(k))$$

$$W = \frac{-1}{2i\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{2i h e^{-ik}}{\varepsilon + 2h e^{-ik}}$$

$$W = \frac{-1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{e^{-ik}}{-\mathcal{S} + 2e^{-ik}}$$

onde $\mathcal{S} = \frac{-\varepsilon}{h}$. Quando $|\mathcal{S}| > 2 \Rightarrow W = 0$ o sistema esta na fase trivial, se $|\mathcal{S}| < 2 \Rightarrow W = 1$ o sistema esta na fase topológica e se $|\mathcal{S}| = 2$ W não é definido pois este da um salto na transição de fase.

III.4. Cálculo da função de Green de superfície da cadeia SP semi-infinita pelo método do espalhamento (Slater-Koster)

Para obtermos a densidade de estados da cadeia SP na superfície utilizaremos do método de Slater-Koster [3] considerando como G_0 a função de Green obtida para a cadeia infinita. A ideia é interromper a cadeia e tratar a superfície como um defeito e a partir daí usar a teoria de espalhamento. Usando o apêndice V.1 temos que a função de Green de superfície é dada por:

$$G_s = G_0 + G_0 V G_s$$

$$\langle m | G_s | m \rangle = \langle m | G_0 | m \rangle + \langle m | G_0 V G_s | m \rangle,$$

mas $\langle n|G|m\rangle = G(n-m)$ logo :

$$G_s(m, m) = G_0(0) + \langle m|G_0|0\rangle\langle 0|V|-1\rangle\langle -1|G_s|m\rangle,$$

precisamos agora calcular $\langle -1|G_s|m\rangle$:

$$\langle -1|G_s|m\rangle = \langle -1|G_0|m\rangle + \langle -1|G_0VG_s|m\rangle,$$

analogamente temos

$$G_s(-1, m) = G_0(-m-1) + \langle -1|G_0|0\rangle\langle 0|V|-1\rangle\langle -1|G_s|m\rangle,$$

$$G_s(-1, m) = G_0(-m-1) + G_0(-1, 0)V(0, -1)G_s(-1, m),$$

$$G_s(-1, m)(1 - V(0, -1)G_0(-1, 0)) = G_0(-m-1),$$

$$G_s(-1, m) = D^{-1}G_0(-m-1),$$

onde $D = (1 - V(0, -1)G_0(-1, 0))$ portanto temos que a função de Green de superfície pode ser calculada também pela equação:

$$G_s(m, m) = G_0(0) + G_0(m)D^{-1}V(0, -1)G_0(-m-1),$$

ou

$$G(m, m) = G(0) + G(m+1)V(-1, 0)G(m)D^{-1}.$$

Considere então as equações 32,34,35 e 36 e definindo $\beta_{ss} = \beta_{pp} = \beta_{sp} = \beta_{ps} = h$ e $\varepsilon_s = -\varepsilon$, $\varepsilon_p = \varepsilon$ temos:

$$G_{ss}^0(n) = \frac{-1}{4\varepsilon h} \left((E - \varepsilon) \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{\gamma} - h \left(\frac{(-\beta + \gamma)^{|n-1|}}{\gamma} + \frac{(-\beta + \gamma)^{|n+1|}}{\gamma} \right) \right).$$

$$G_{ss}^0(n) = \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{2\varepsilon\gamma} \left(\frac{(\varepsilon - E)}{2h} + \frac{h}{2h} (2(-\beta + \gamma)) \right).$$

$$G_{ss}^0(n) = \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{2\varepsilon\gamma} (E_b - \beta + \gamma).$$

$$G_{ss}^0(n) = \frac{1}{2\varepsilon}(\delta_{0n} + (E_b - \beta) \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{\gamma}).$$

$$G_{pp}^0(n) = \frac{-1}{4\varepsilon h}((E + \varepsilon) \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{\gamma} + h(\frac{(-\beta + \gamma)^{|n-1|}}{\gamma} + \frac{(-\beta + \gamma)^{|n+1|}}{\gamma})).$$

$$G_{pp}^0(n) = \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{2\varepsilon\gamma}(-\frac{(\varepsilon + E)}{2h} - \frac{h}{2h}(2(-\beta + \gamma))).$$

$$G_{pp}^0(n) = \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{2\varepsilon\gamma}(-E_a + \beta - \gamma).$$

$$G_{pp}^0(n) = \frac{1}{2\varepsilon}(-\delta_{0n} + (\beta - E_a) \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{\gamma}).$$

Obtemos assim as funções de Green abaixo, que apesar de diferentes também descrevem a cadeia SP [3]

$$G_{ss}(n) = \frac{1}{2\varepsilon}(\delta_{n0} + (E_b - \beta) \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{\gamma}), \quad (38)$$

$$G_{ps}(n) = -G_{sp}(n) = \frac{1}{2\varepsilon} \operatorname{sgn}(n)(1 - \delta_{n0})(-\beta + \gamma)^{|n|}, \quad (39)$$

$$G_{pp}(n) = \frac{1}{2\varepsilon}(-\delta_{n0} + (\beta - E_a) \frac{(-\beta + \gamma)^{|n|}}{\gamma}), \quad (40)$$

sendo $E_{a,b} = \frac{\varepsilon \pm E}{2h}$, $\beta = \frac{1}{4Eh}(\varepsilon^2 - 4h^2 - E^2)$, $\gamma = \pm(\beta^2 - 1)^{\frac{1}{2}}$ e usaremos o método de Slater-Koster para função de Green de superfície

$$G(m, m) = G(0) + G(m+1)V(-1, 0)G(m)D^{-1}, \quad (41)$$

onde

$$D = 1 - G(1)V(-1, 0),$$

Precisamos calcular a função de Green de superfície, logo

$$G(0, 0) = G(0) + G(1)V(-1, 0)G(0)D^{-1},$$

onde

$$V(-1, 0) = \begin{pmatrix} h & -h \\ h & -h \end{pmatrix}.$$

Calculemos as matrizes $G(0), G(1)$ e D^{-1} :

$G(0)$:

$$G_{ss}(0) = \frac{1}{2\varepsilon} \left(1 + (E_b - \beta) \frac{1}{\gamma} \right) = \Gamma_1,$$

$$G_{pp}(0) = \frac{1}{2\varepsilon} \left(-1 + (\beta - E_a) \frac{1}{\gamma} \right) = \Gamma_2,$$

$$G_{ps}(0) = -G_{sp}(0) = \frac{1}{2\varepsilon} (1 - 1) = 0,$$

logo

$$G(0) = \begin{pmatrix} \Gamma_1 & 0 \\ 0 & \Gamma_2 \end{pmatrix}$$

$G(1)$:

$$G_{ss}(1) = \frac{1}{2\varepsilon} \left((E_b - \beta) \frac{(-\beta + \gamma)}{\gamma} \right) = \frac{1}{2\varepsilon} \left(1 + (E_b - \beta) \frac{1}{\gamma} \right) (-\beta + \gamma) - \frac{(-\beta + \gamma)}{2\varepsilon},$$

$$G_{ss}(1) = (-\beta + \gamma)\Gamma_1 - \Gamma_3 = \Gamma'_1 - \Gamma_3,$$

$$G_{ps}(1) = -G_{sp}(1) = \frac{(-\beta + \gamma)}{2\varepsilon} = \Gamma_3,$$

$$G_{pp}(1) = \frac{1}{2\varepsilon} \left((\beta - E_a) \frac{(-\beta + \gamma)}{\gamma} \right) = \frac{1}{2\varepsilon} \left(-1 + (\beta - E_a) \right) (-\beta + \gamma) + \frac{(-\beta + \gamma)}{2\varepsilon},$$

$$G_{pp}(1) = (-\beta + \gamma)\Gamma_2 + \Gamma_3 = \Gamma'_2 + \Gamma_3,$$

onde $\Gamma'_1 = (-\beta + \gamma)\Gamma_1, \Gamma'_2 = (-\beta + \gamma)\Gamma_2$ e $\Gamma_3 = \frac{(-\beta + \gamma)}{2\varepsilon}$

logo

$$G(1) = \begin{pmatrix} \Gamma'_1 - \Gamma_3 & \Gamma_3 \\ -\Gamma_3 & \Gamma'_2 + \Gamma_3 \end{pmatrix}$$

$$G(1) = \begin{pmatrix} \Gamma'_1 & 0 \\ 0 & \Gamma'_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Gamma_3 & -\Gamma_3 \\ \Gamma_3 & -\Gamma_3 \end{pmatrix}$$

definimos então

$$G'(0) = \begin{pmatrix} \Gamma'_1 & 0 \\ 0 & \Gamma'_2 \end{pmatrix}$$

e

$$V'(-1, 0) = \begin{pmatrix} \Gamma_3 & -\Gamma_3 \\ \Gamma_3 & -\Gamma_3 \end{pmatrix}$$

logo

$$G(1) = G'(0) - V'(-1, 0),$$

$$G(1)V(-1, 0) = G'(0)V(-1, 0) - V'(-1, 0)V(-1, 0):$$

$$G'(0)V(-1, 0) = \begin{pmatrix} \Gamma'_1 & 0 \\ 0 & \Gamma'_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h & -h \\ h & -h \end{pmatrix}$$

$$G'(0)V(-1, 0) = \begin{pmatrix} h\Gamma'_1 & -h\Gamma'_1 \\ h\Gamma'_2 & -h\Gamma'_2 \end{pmatrix}$$

$$V'(-1, 0)V(-1, 0) = \begin{pmatrix} \Gamma_3 & -\Gamma_3 \\ \Gamma_3 & -\Gamma_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h & -h \\ h & -h \end{pmatrix}$$

$$V'(-1, 0)V(-1, 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$G(1)V(-1, 0) = \begin{pmatrix} h\Gamma'_1 & -h\Gamma'_1 \\ h\Gamma'_2 & -h\Gamma'_2 \end{pmatrix}$$

D^{-1} :

$$D = \begin{pmatrix} 1 - h\Gamma'_1 & h\Gamma'_1 \\ -h\Gamma'_2 & 1 + h\Gamma'_2 \end{pmatrix}$$

precisamos então calcular a matriz inversa que aqui faremos por intermédio da seguinte fórmula

$$\Delta = (1 - h\Gamma'_1)(1 + h\Gamma'_2) + h^2\Gamma'_1\Gamma'_2;$$

$$\Delta = 1 - h\Gamma'_1 + h\Gamma'_2 - h^2\Gamma'_1\Gamma'_2 + h^2\Gamma'_1\Gamma'_2; \quad (42)$$

$$\Delta = 1 - h(\Gamma'_1 - \Gamma'_2);$$

$$D^{-1} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} 1 + h\Gamma'_2 & -h\Gamma'_1 \\ h\Gamma'_2 & 1 - h\Gamma'_1 \end{pmatrix}$$

$$G(1)V(-1,0)G(0) = \begin{pmatrix} h\Gamma'_1 & -h\Gamma'_1 \\ h\Gamma'_2 & -h\Gamma'_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1 & 0 \\ 0 & \Gamma_2 \end{pmatrix}$$

$$G(1)V(-1,0)G(0) = \begin{pmatrix} h\Gamma'_1\Gamma_1 & -h\Gamma'_1\Gamma_2 \\ h\Gamma'_2\Gamma_1 & -h\Gamma'_2\Gamma_2 \end{pmatrix}$$

$$G(1)V(-1,0)G(0)D^{-1} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} h\Gamma'_1\Gamma_1 & -h\Gamma'_1\Gamma_2 \\ h\Gamma'_2\Gamma_1 & -h\Gamma'_2\Gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + h\Gamma'_2 & -h\Gamma'_1 \\ h\Gamma'_2 & 1 - h\Gamma'_1 \end{pmatrix}$$

$$G(1)V(-1,0)G(0)D^{-1} = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} h\Gamma'_1\Gamma_1(1 + h\Gamma'_2) - h^2\Gamma'_2\Gamma'_1\Gamma_2 & -h^2\Gamma'_1\Gamma'_1\Gamma_1 - h\Gamma'_1\Gamma_2(1 - h\Gamma'_1) \\ (1 + h\Gamma'_2)h\Gamma'_2\Gamma_1 - h^2\Gamma'_2\Gamma'_2\Gamma_2 & -h^2\Gamma'_1\Gamma'_2\Gamma_1 - h\Gamma'_2\Gamma_2(1 - h\Gamma'_1) \end{pmatrix}$$

$$G(0,0) = \begin{pmatrix} \Gamma_1 + \frac{1}{\Delta}(h\Gamma'_1\Gamma_1(1 + h\Gamma'_2) - h^2\Gamma'_2\Gamma'_1\Gamma_2) & \frac{1}{\Delta}(-h^2\Gamma'_1\Gamma'_1\Gamma_1 - h\Gamma'_1\Gamma_2(1 - h\Gamma'_1)) \\ \frac{1}{\Delta}((1 + h\Gamma'_2)h\Gamma'_2\Gamma_1 - h^2\Gamma'_2\Gamma'_2\Gamma_2) & \Gamma_2 + \frac{1}{\Delta}(-h^2\Gamma'_1\Gamma'_2\Gamma_1 - h\Gamma'_2\Gamma_2(1 - h\Gamma'_1)) \end{pmatrix},$$

$$TrG(0,0) = \Gamma_1 + \frac{1}{\Delta}((h\Gamma'_1\Gamma_1(1 + h\Gamma'_2) - h^2\Gamma'_2\Gamma'_1\Gamma_2) + \Gamma_2 + (-h^2\Gamma'_1\Gamma'_2\Gamma_1 - h\Gamma'_2\Gamma_2(1 - h\Gamma'_1)))$$

$$TrG(0,0) = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \frac{1}{\Delta}(h\Gamma'_1\Gamma_1 + h^2\Gamma'_2\Gamma'_1\Gamma_1 - h^2\Gamma'_2\Gamma'_1\Gamma_2 - h^2\Gamma'_1\Gamma'_2\Gamma_1 - h\Gamma'_2\Gamma_2 + h^2\Gamma'_1\Gamma'_2\Gamma_2)$$

$$TrG(0,0) = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \frac{1}{\Delta}(h\Gamma'_1\Gamma_1 - h\Gamma'_2\Gamma_2)$$

$$TrG(0,0) = \frac{1}{\Delta}(\Delta(\Gamma_1 + \Gamma_2) + h(-\beta + \gamma)(\Gamma_1^2 - \Gamma_2^2))$$

$$TrG(0,0) = \frac{1}{\Delta}(\Delta trG(0) + h(-\beta + \gamma)(\Gamma_1^2 - \Gamma_2^2))$$

$$TrG(0,0) = \frac{1}{\Delta}(\Delta trG(0) + h(-\beta + \gamma)(\Gamma_1 + \Gamma_2)(\Gamma_1 - \Gamma_2))$$

$$TrG(0,0) = \frac{trG(0)}{\Delta}(\Delta + h(-\beta + \gamma)(\Gamma_1 - \Gamma_2))$$

$$TrG(0,0) = \frac{trG(0)}{\Delta}(1 - h(-\beta + \gamma)(\Gamma_1 - \Gamma_2) + h(-\beta + \gamma)(\Gamma_1 - \Gamma_2))$$

$$TrG(0,0) = \frac{trG(0)}{\Delta}$$

$$\Gamma_1 - \Gamma_2 = \frac{1}{2\varepsilon}(1 + (E_b - \beta)\frac{1}{\gamma} + 1 - (\beta - E_a)\frac{1}{\gamma})$$

$$\Gamma_1 - \Gamma_2 = \frac{1}{2\varepsilon}(2 + \frac{(E_b + E_a)}{\gamma} - \frac{2\beta}{\gamma})$$

mas $E_b + E_a = \frac{\varepsilon}{h}$ logo

$$\Gamma_1 - \Gamma_2 = \frac{1}{2\varepsilon}(2 + \frac{\varepsilon}{h\gamma} - \frac{2\beta}{\gamma})$$

$$\Gamma_1 - \Gamma_2 = \frac{1}{\varepsilon\gamma}(\gamma + \frac{\varepsilon}{2h} - \beta)$$

$$\Gamma_1 - \Gamma_2 = \frac{1}{\varepsilon\gamma}((-\beta + \gamma) + \frac{\varepsilon}{2h})$$

$$\Delta = 1 - h(-\beta + \gamma)(\Gamma_1 - \Gamma_2);$$

$$\Delta = 1 - \frac{h(-\beta + \gamma)}{\varepsilon\gamma} \left((-\beta + \gamma) + \frac{\varepsilon}{2h} \right);$$

$$\Delta = 1 - \frac{h}{2h\varepsilon\gamma} (2h(-\beta + \gamma)^2 + \varepsilon(-\beta + \gamma));$$

$$\Delta = \frac{1}{2h\varepsilon\gamma} (2h\varepsilon\gamma - 2h^2(-\beta + \gamma)^2 - h\varepsilon(-\beta + \gamma));$$

$$\Delta = \frac{1}{2h\varepsilon\gamma} (2h\varepsilon\gamma - h\varepsilon\gamma - (2h^2(-\beta + \gamma)^2 + h\varepsilon\beta));$$

$$\Delta = \frac{1}{2h\varepsilon\gamma} (h\varepsilon(\gamma + \beta) - 2h^2(-\beta + \gamma)^2);$$

mas

$$(\gamma + \beta)(\gamma - \beta) = (\gamma^2 - \beta^2);$$

$$(\gamma + \beta) = \frac{(\gamma^2 - \beta^2)}{(\gamma - \beta)};$$

mas $\gamma^2 = \beta^2 - 1$ logo

$$(\gamma + \beta) = \frac{-1}{(\gamma - \beta)};$$

dessa forma temos

$$\Delta = \frac{1}{2h\varepsilon\gamma} \left(-\frac{h\varepsilon}{(\gamma - \beta)} - 2h^2(-\beta + \gamma)^2 \right);$$

$$\Delta = \frac{(\gamma - \beta)}{2h\varepsilon\gamma} \left(-\frac{h\varepsilon}{(\gamma - \beta)^2} - 2h^2(-\beta + \gamma) \right);$$

$$\Delta = \frac{\frac{((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2) \pm ((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})}{4hE}}{2h\varepsilon\gamma} \left(-\frac{h\varepsilon}{(\gamma - \beta)^2} - 2h^2(-\beta + \gamma) \right);$$

$$\Delta = \frac{\frac{((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2) \pm ((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})}{4h^2}}{2h\varepsilon\gamma} \left(\frac{h}{E} \left(-\frac{h\varepsilon}{(\gamma - \beta)^2} - 2h^2(-\beta + \gamma) \right) \right);$$

$$\Delta = \frac{1}{2h\varepsilon\gamma} \frac{((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2) \pm ((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})}{4h^2} \left(\frac{h}{\varepsilon} \left(-\frac{h\varepsilon}{(\gamma - \beta)^2} - 2h^2(-\beta + \gamma) \right) \right);$$

$$TrG(0) = \Gamma_1 + \Gamma_2 = \frac{1}{2\varepsilon} \left(1 + E_b \frac{1}{\gamma} - \beta \frac{1}{\gamma} - 1 + \beta \frac{1}{\gamma} - E_a \frac{1}{\gamma} \right)$$

$$TrG(0) = \Gamma_1 + \Gamma_2 = \frac{(E_b - E_a)}{2\varepsilon\gamma} = -\frac{(E)}{2h\varepsilon\gamma}$$

como queremos os polos de Shockley precisamos calcular:

$$TrG(0, 0) = 0$$

logo

$$TrG(0, 0) = \frac{\frac{1}{2h\varepsilon\gamma} \frac{((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2) \pm ((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})}{4h^2} \left(\frac{h}{E} \left(-\frac{h\varepsilon}{(\gamma - \beta)^2} - 2h^2(-\beta + \gamma) \right) \right)}{\frac{(E)}{2h\varepsilon\gamma}}$$

$$TrG(0, 0) = \frac{((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2) \pm ((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})}{4Eh^2} \left(\frac{h}{E} \left(-\frac{h\varepsilon}{(\gamma - \beta)^2} - 2h^2(-\beta + \gamma) \right) \right)$$

como $TrG(0, 0) = 0$ temos

$$\frac{((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2) \pm ((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})}{8Eh^2} \left(\frac{2h}{E} \left(-\frac{2h\varepsilon}{(\gamma - \beta)^2} - 2h^2(-\beta + \gamma) \right) \right) = 0$$

$$\mathcal{G}(0, 0) = TrG(0, 0) = \frac{((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2) \pm ((E^2 + 4h^2 - \varepsilon^2)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})}{8Eh^2}. \quad (43)$$

Usando as relações dadas pelas equações 38,39,40 na equação 41 obtemos

$$\left[1 + 2\frac{\delta}{\varepsilon} - \frac{\delta^2}{\varepsilon^2} - \frac{\delta'}{\varepsilon} \frac{E}{\varepsilon} + \left(\frac{\delta'}{\varepsilon} \right)^2 \right] \beta + \frac{\varepsilon}{\delta} \left[-2\frac{h^2}{\varepsilon^2} - \frac{\delta}{\varepsilon} + \frac{\delta^2}{2\varepsilon^2} + \frac{\delta'}{\varepsilon} \frac{E}{\varepsilon} - \frac{1}{2} \left(\frac{\delta'}{\varepsilon} \right)^2 \right] \beta + \left[1 - 2\frac{\delta}{\varepsilon} + \frac{\delta^2}{\varepsilon^2} + \frac{\delta'}{\varepsilon} \frac{E}{\varepsilon} - \left(\frac{\delta'}{\varepsilon} \right)^2 \right] (\beta^2 - 1)^{1/2} = 0$$

a continuidade de modos de volume (bulk) é confinada na região de $-1 \leq \beta \leq 1$. então os estados de superfície existem somente para $\beta > 1$ ou $\beta < -1$. os limites do volume (bulk) continuo que são definidos por $\beta = \pm 1$ são quatro linhas retas $E = \pm(2h \pm \varepsilon)$. Na figura 14, a area sombreada indica a região de volume continuo. O volume das bandas são cruzadas em $h = \frac{1}{2}\varepsilon$.

Com a função de Green de superfície podemos calcular a densidade de estados

$$\mathcal{G}(0, 0) = \frac{1}{E} \left((\bar{E}^2 - \bar{\varepsilon}^2 + 1) \pm ((\bar{E}^2 - \bar{\varepsilon}^2 + 1)^2 - 4\bar{E}^2)^{\frac{1}{2}} \right), \quad (44)$$

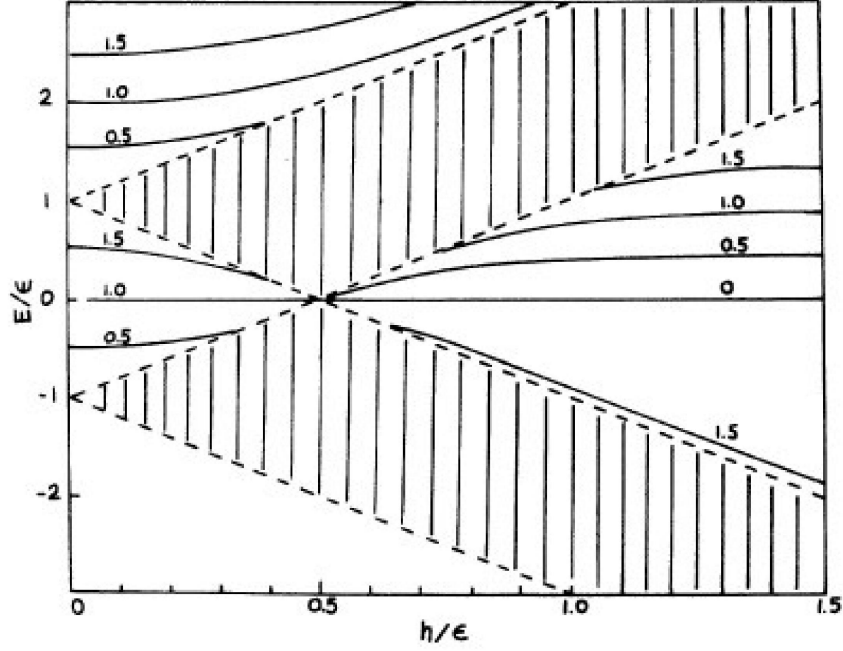


Figura 14. Energia vs h , curvas para os casos $\delta/\varepsilon = 0$ e $\delta'/\varepsilon = 0, 0.5, 1.0$ e 1.5 . Os valores de δ'/ε são indicados ao longo de cada curva [3].

$$\mathcal{G}(0, 0) = \frac{1}{E}(F(\bar{E})),$$

tal que $\bar{E} = \frac{E}{2h}$, $\bar{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{2h}$ e $F(\bar{E}) = ((\bar{E}^2 - \bar{\varepsilon}^2 + 1) \pm ((\bar{E}^2 - \bar{\varepsilon}^2 + 1)^2 - 4\bar{E}^2)^{\frac{1}{2}})$. A transição topológica ocorre para $\frac{\varepsilon}{2h} = 1$. A fase não trivial ocorre para $\frac{\varepsilon}{2h} < 1$.

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \mathcal{G}(0, 0) = \frac{1}{2h} \frac{F(\bar{E})}{\bar{E}},$$

$$n = -\frac{1}{\pi} \int \frac{d\bar{E} F(\bar{E})}{\bar{E}}. \quad (45)$$

Considere novamente a equação 43 e façamos algumas manipulações algébricas para tornar mais simples a obtenção explícita da densidade de estados

$$G(0, 0) = \frac{((E^2 + D) \pm ((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})}{8Eh^2}. \quad (46)$$

$$G(0, 0) = \frac{1}{8h^2} \left((E + \frac{D}{E}) \pm \frac{((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}}}{E} \right). \quad (47)$$

calculemos agora o imaginário da equação 47:

$$\text{Im}G(0,0) = \frac{1}{8h^2}(-\pi D\delta(E) - \text{Im} \frac{((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}}}{E}). \quad (48)$$

$$\text{Im}G(0,0) = \frac{1}{8h^2}(-\pi D\delta(E) - \text{Im}((\text{Re}((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}} + i\text{Im}((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}})(\frac{1}{E} + i\pi\delta(E))). \quad (49)$$

$$\text{Im}G(0,0) = \frac{1}{8h^2}(-\pi D\delta(E) - \text{Re}((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}}\pi\delta(E) + \frac{1}{E}\text{Im}((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}}). \quad (50)$$

$$\text{Im}G(0,0) = \frac{1}{8h^2}(-\pi D\delta(E) - \pi|D|\delta(E) - \frac{1}{E}\text{Im}((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}}), \quad (51)$$

onde $D = 4h^2 - \varepsilon^2$, usando que $\rho(E) = \frac{-1}{\pi}\text{Im}G(0,0)$

$$\rho(E) = \frac{-1}{8h^2\pi}(-\pi D\delta(E) - \pi|D|\delta(E) - \frac{1}{E}\text{Im}((E^2 + D)^2 - 16E^2h^2)^{\frac{1}{2}}), \quad (52)$$

onde $D = 4h^2 - \varepsilon^2$, veja que quando $D < 0$ o sistema se encontra na fase trivial.

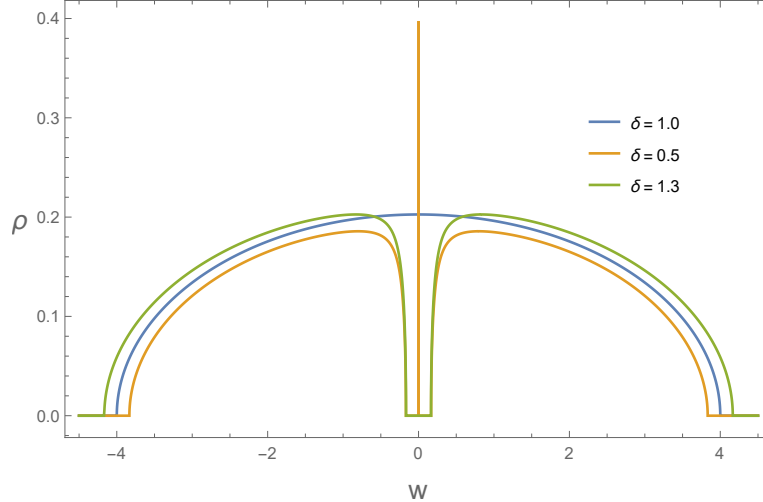


Figura 15. Densidade de estado de superfície da cadeia SP semi-infinita nas fases trivial ($\delta > 1.0$), não trivial ($\delta < 1.0$) e na transição ($\delta = 1.0$).

III.5. Propriedades elétricas e termoeétricas de um Ponto Quântico imerso em cadeias SP e SSH semi-infinitas

Pudemos notar que as equações 21 e 44 são iguais a menos de um fator 2 na equação 21. Com isto as propriedades termoeétricas são idênticas e com isto basta calcularmos as propriedades elétricas

e termoelétricas de uma delas. Consideremos então a função de Green de superfície da cadeia SSH com um PQ imerso descrita pela figura 16, podemos então calcular a função de Green do sistema

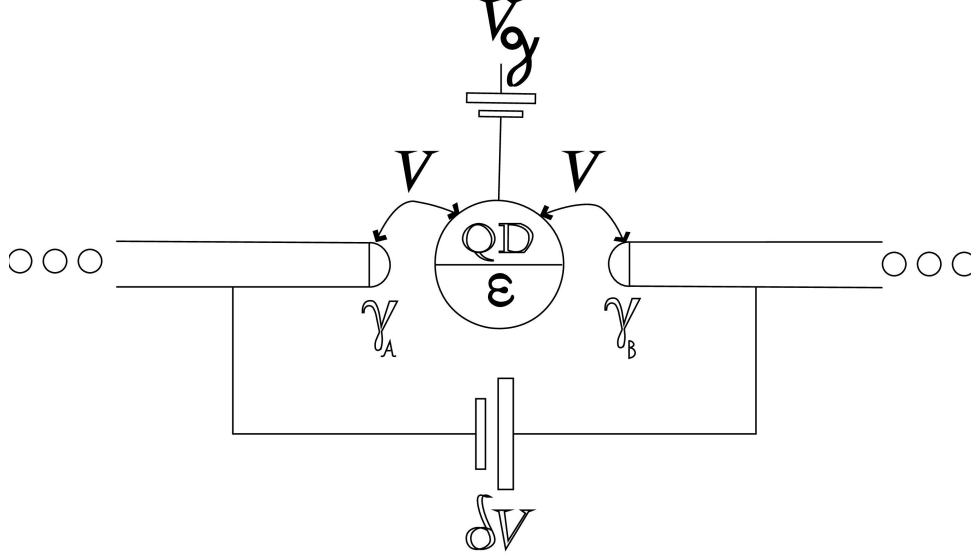


Figura 16. Cadeia SSH ligada a um PQ, onde δV é uma pequena diferença de potencial para que haja fluxo de elétrons, V_g é o potencial no PQ (nível de energia ϵ do PQ) e V é o potencial entre o PQ e as cadeias SP semi-infinitas, a realização do PQ é análoga a feita por Goldhaber-Gordon[4].

$$G^d(w) = \frac{g_d}{1 - 2V^2 g_d G_{00}} \quad (53)$$

onde

$$g_d = (w - E_0)^{-1} \quad (54)$$

e o Greeniano dos elétrons na cadeia isolada é dado por:

$$G_{00} = g(w)$$

sendo $g(w)$ definida pela equação 20. Das equações 53 e 54 temos:

$$G_d(w) = \frac{1}{(w - E_0 - 2V^2 \text{Re}G_{00} - 2iV^2 \text{Im}G_{00})}. \quad (55)$$

Com isto podemos calcular propriedades termoelétricas do sistema, vale ressaltar que aqui estamos considerando $V=0.1$.

No gráfico 17 temos a condutância elétrica do sistema nas fases topológicas trivial ($V_1 > V_2$ ou $D < 0$ onde $D = 1 - \delta^2$) e não trivial ($V_1 < V_2$ ou $D > 0$). Na fase topológica os Majoranas estão isolados nas pontas e estes atuam como centros espalhadores na cadeia, fazendo com que a condutância elétrica diminua, o mesmo ocorre para a condutância térmica 19.

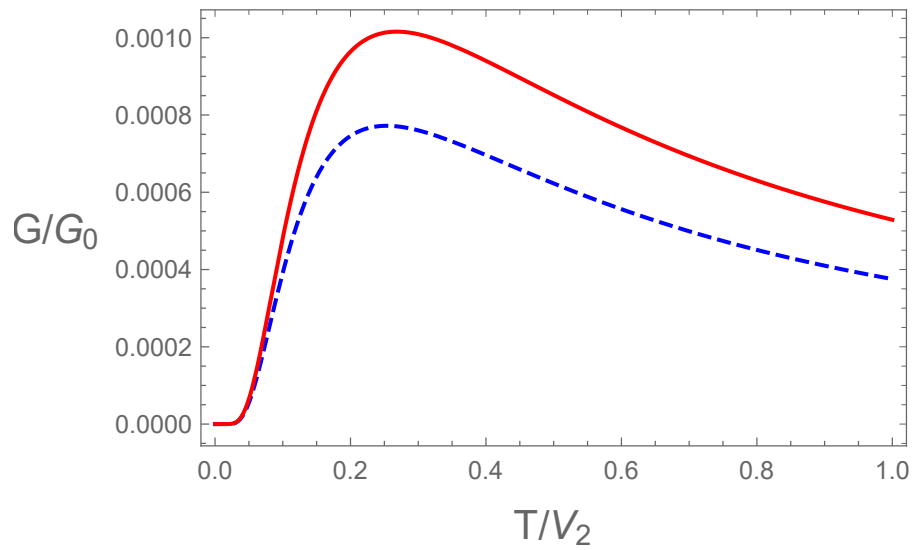


Figura 17. Condutância elétrica nas fases trivial (curva vermelha) e não trivial (curva azul tracejada), note que os modos de Majorana atuam como centros espalhadores diminuindo assim a condutância.

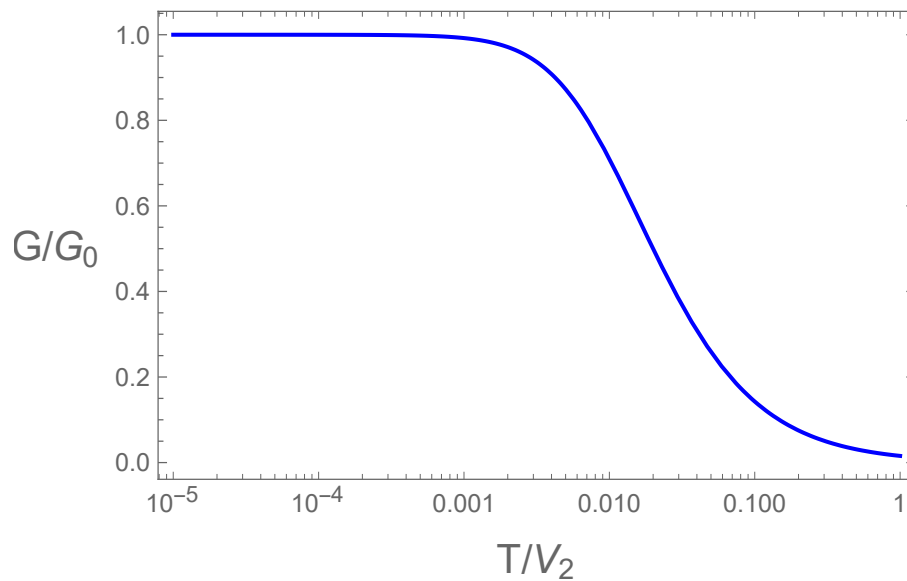


Figura 18. Condutância elétrica na transição de fase, veja que o sistema não apresenta assinatura de Majorana ($G/G_0=0.5$).

No gráfico 18 temos a condutância elétrica do sistema na transição de fase. Note que a condutância elétrica sinaliza o fluxo de elétrons no sistema, contrariando a expectativa de obtermos o sinal referente ao fluxo dos Majoranas ($G/G_0 = 0.5$). Isto ocorre pois na transição ambos os Majoranas Vazam simultaneamente resultando na condutância $G/G_0 = 1.0$.

O gráfico 21 é referente a lei de Wiedemann-Franz do sistema nas fases topológicas trivial ($V_1 > V_2$ ou $D < 0$) e não trivial ($V_1 < V_2$ ou $D > 0$). Note que obtivemos que a lei de Wiedemann-Franz é violada. E por conta da simetria de L_1 não há termopotência nem figura termoelétrica de mérito.

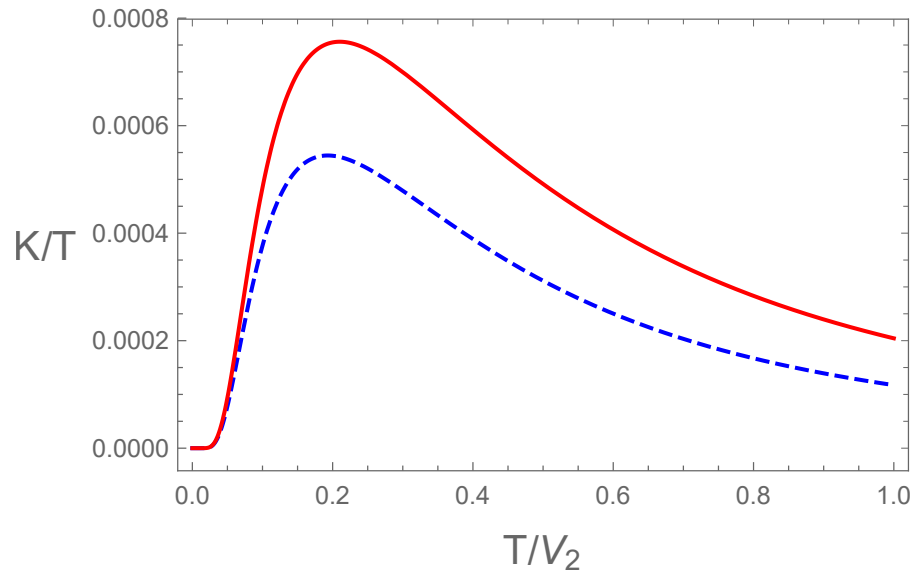


Figura 19. Condutância térmica nas fases trivial(curva vermelha) e não trivial(curva azul tracejada). Analogamente ao que obtemos para a condutância elétrica concluímos que os modos de Majorana atuam como centros espalhadores diminuindo assim a condutância.

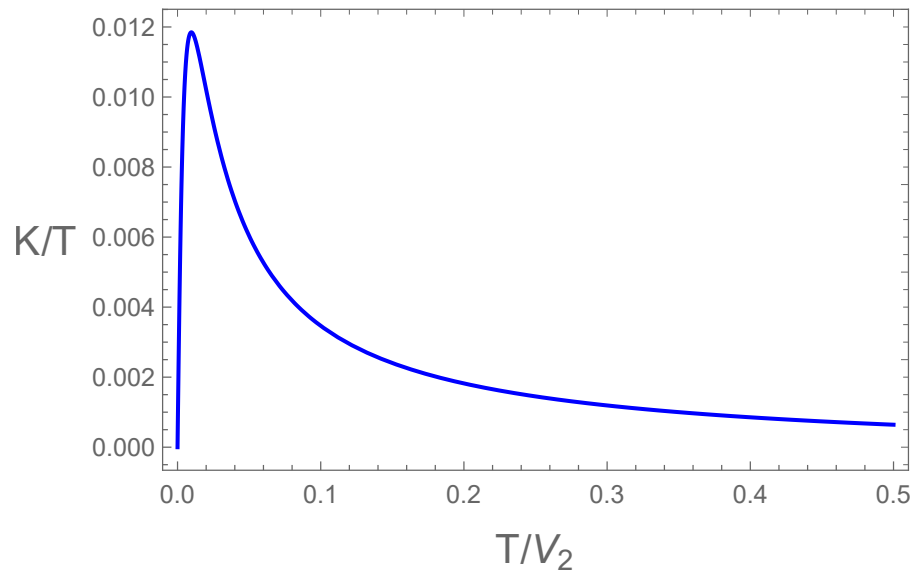


Figura 20. Condutância térmica na transição de fase.

O gráfico 22 é referente a lei de Wiedemann-Franz do sistema na transição de fase. Note que a lei de Wiedemann-Franz não é violada para temperaturas próximas de zero e que a medida que aumentamos esta, a lei de Wiedemann-Franz é violada e novamente por conta da simetria de L_1 não há termopotência nem figura termoelétrica de mérito.

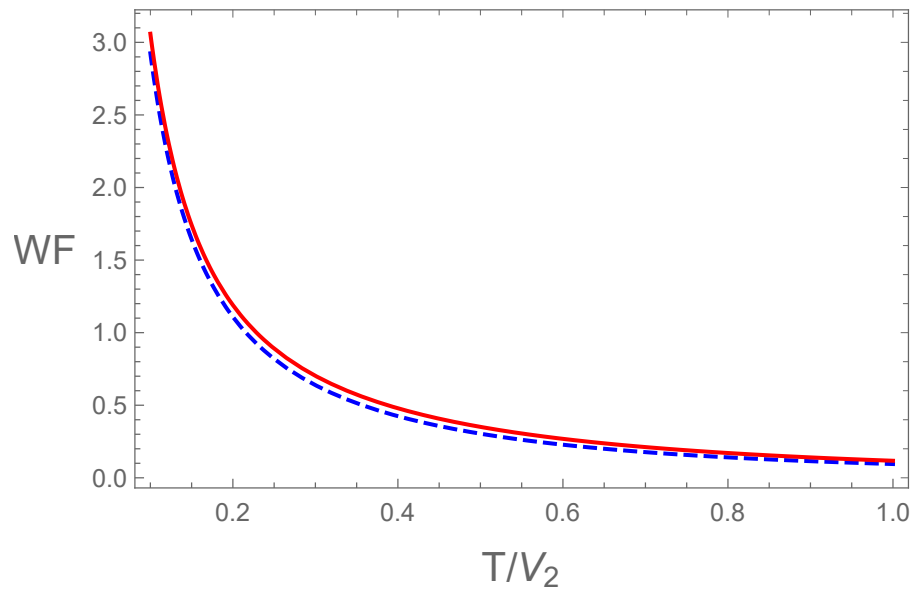


Figura 21. Lei de Wiedemann-Franz para as fases trivial(curva vermelha) e não trivial(curva azul tracejada), note que há uma violação da lei, no entanto, não há termopotência.

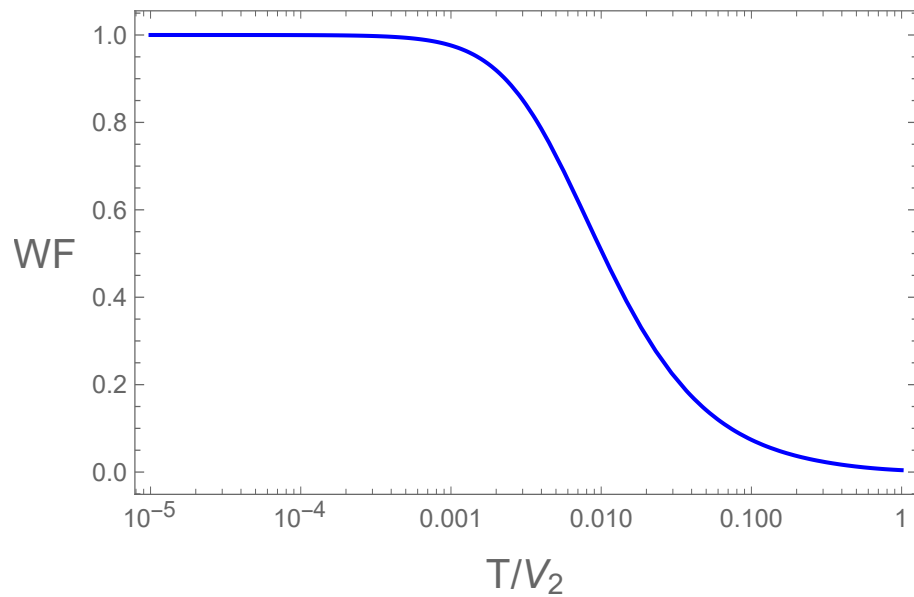


Figura 22. Lei de Wiedemann-Franz para a transição de fase.

IV. CONCLUSÃO

Nos capítulos iniciais definimos quais as propriedades que evidenciam a presença de fermions de Majorana em uma cadeia. Na cadeia SP vimos através da densidade de estados e do winding number que há existência de modos de Majorana mas não há sinal destes nas propriedades elétricas e termoelétricas da cadeia ligada a um PQ. Isto se deve ao fato de que cada nível do sistema possui um Majorana dando origem

a um elétron híbrido. A cadeia SSH também evidenciou a existência desses modos de Majorana quando estudadas a densidade de estados e o winding number no entanto não foram detectadas as assinaturas nas propriedades elétricas e termoelétricas devido ao fato curioso de que a medida que aumentamos a interação entre os Majoranas faz com que ambos vazem simultaneamente, conseqüentemente o sistema apresenta condutância referente a elétrons. Observamos que em ambas as cadeias a condutância a temperatura nula só é diferente de zero exatamente na transição topológica. Neste caso ela tem o valor de um quantum de condutância correspondente a passagem de um elétron pelo PQ, como a condutância em $T=0$ é nula na fase topológica, isto significa que os Majoranas nestes sistemas não contribuem para a condutância a não ser quando eles se recombinam em um elétron o que ocorre exatamente na transição topológica. Verificamos também que apesar das cadeias serem muito parecidas, são completamente distintas. Pois uma tem o dobro do número de ocupação da outra, em outras palavras, na cadeia SP temos dois níveis por sítio e na cadeia SSH temos um elétron por sítio. Vale ressaltar que as propriedades termoelétricas que não foram graficadas não foram pois os resultados são triviais.

Para que existam assinaturas de Majoranas nas cadeias, devemos utilizar as mesmas com algumas alterações. Na cadeia SSH, é necessário considerar a cadeia de Rice-Mele. Esta é uma cadeia SSH generalizada, onde temos dois átomos diferentes por célula unitária, dando origem assim a estados bonding e anti-bonding. Dependendo da distância entre esses níveis e da fase topológica da cadeia o sistema apresenta sinal de Majorana. Na cadeia SP a ideia é considerarmos que um nível de energia do sistema é muito mais alto do que o outro (ou esta ocupado), de maneira que haja apenas fluxo de elétrons oriundos de um dos níveis. Vale ressaltar que o nosso interesse neste modelo esta em facilitar a detecção dos Majoranas experimentalmente, pois os métodos atuais utilizam de supercondutores do tipo S depositando sobre este um nanofio com forte interação spin-orbita, e é na interface do fio com o supercondutor que surge a cadeia sem spin, no entanto, esta interface é sensível a variações e com isso surgem diversos efeitos que possuem comportamento semelhante ao que classificamos por Majoranas, um exemplo, o efeito Kondo. A realização experimental por esse método é relativamente mais simples por não haver necessidade de criarmos uma cadeia sem spin pelo método de proximidade, fazendo com que os resultados tenham menos possíveis efeitos geradores. Recentemente obtivemos resultados interessantes para o caso da cadeia de Rice-Mele que serão apresentados em um próximo trabalho, Bastando agora calcular o diagrama de fase da mesma para concluir o estudo.

V. APÊNDICE

V.1. Slater-Koster

Seja a função de Green do sistema perturbado:

$$G(z) = \frac{1}{z - H},$$

definimos então $H = H_0 + V$ temos ;

$$G(z) = \frac{1}{z - H_0 - V}$$

se multiplicarmos e dividirmos por $(z - H_0)$ e somarmos e subtraímos por V temos ;

$$G(z) = \frac{1}{z - H_0 - V} \frac{z - H_0 - V + V}{z - H_0};$$

$$G(z) = \frac{z - H_0 - V}{(z - H_0 - V)(z - H_0)} + \frac{V}{(z - H_0 - V)(z - H_0)};$$

$$G(z) = \frac{1}{z - H_0} + \frac{V}{(z - H_0 - V)(z - H_0)};$$

$$G = g_0 + g_0 V G;$$

$g_0 = \frac{1}{(z - H_0)}$ esta é a equação de Dyson

$$G_{ij}(z) = \langle i | \frac{1}{(z - H_0 - V)} | j \rangle$$

$$g_{ij}(z) = \langle i | \frac{1}{(z - H_0)} | j \rangle$$

$$G_{ij}(z) = g_{ij}(z) + \langle i | g_0 V G | j \rangle$$

usando completeza ($\sum_l |l\rangle\langle l| = \infty$)

$$G_{ij}(z) = g_{ij}(z) + \sum_{l,m} \langle i | g_0 | l \rangle \langle l | V | m \rangle \langle m | G | j \rangle$$

$$G_{ij}(z) = g_{ij}(z) + \sum_{l,m} g_{il}(z) V_{lm} G_{mj}(z)$$

$$\mathcal{H}_0 |k\rangle = \varepsilon_k |k\rangle$$

$$|k\rangle = \sum_l e^{i\vec{K}\vec{R}_l} |l\rangle$$

$$g_{ij}(z) = \sum_k \langle i | \frac{1}{(z - H_0)} | k \rangle \langle k | j \rangle$$

$$g_{ij}(z) = \sum_k \frac{\langle i|k\rangle\langle k|j\rangle}{(z - \varepsilon_k)}$$

usando que

$$\langle i|k\rangle = e^{i\vec{K}\vec{R}_i},$$

$$\langle k|i\rangle = e^{-i\vec{K}\vec{R}_i},$$

temos

$$g_{ij}(z) = \sum_k \frac{e^{i\vec{K}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)}}{(z - \varepsilon_k)}$$

como um caso particular , vamos calcular o propagador local $R_i = ai \rightarrow R_j = ai$ pois $i = j$

$$g_{ij}(z) = \sum_k \frac{1}{(z - \varepsilon_k)}$$

usando o teorema do do imaginário, lembrando que $z = \varepsilon + i\delta$ tomamos a densidade de estados do metal puro com a expressão a seguir:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}(g_{ij}(z))$$

$$V_{lm} = \langle l|V|m\rangle = \sum_l \langle l|V|l\rangle\langle l|m\rangle = \delta_{lm}\delta_{l0}V_0$$

$$G_{ij} = g_{ij}(z) + \sum_{l,m} g_{il}(z)\delta_{lm}\delta_{l0}V_0G_{0j}(z),$$

$$G_{ij} = g_{ij}(z) + g_{i0}(z)V_0G_{0j}(z),$$

$$G_{0j}(z) = g_{0j}(z) + g_{00}(z)V_0G_{0j}(z),$$

$$[1 - g_{00}(z)V_0]G_{0j}(z) = g_{0j}(z),$$

$$G_{0j}(z) = \frac{1}{(1 - g_{00}(z)V_0)} g_{0j}(z),$$

o resultado final é

$$G_{0j}(z) = g_{0j}(z) + g_{00}(z) \frac{V_0}{(1 - g_{00}(z)V_0)} g_{0j}(z),$$

vamos introduzir a matriz T definida pela fórmula

$$T(z) = \frac{V_0}{(1 - g_{00}(z)V_0)},$$

consequentemente

$$G_{0j}(z) = g_{0j}(z) + g_{00}(z)T(z)g_{0j}(z),$$

para o caso da perturbação com dois potenciais vamos supor que a perturbação V pode ser escrita como um somatório de dois termos $V = V_1 + V_2$

um interessante caminho para resolver o problema é o seguinte: introduzir uma resolução g' que inclui somente o efeito da perturbação V_1 :

$$g' = g + gV_1g'$$

g' é então a solução completa para o espalhamento por um potencial V_1 a resolução completa deve então satisfazer

$$G = g' + g'V_2G$$

para provar esse resultado da primeira equação temos:

$$(1 - gV_1)g' = g$$

multiplicando o lado esquerdo da equação V.1 por $(1 - gV_1)$. temos :

$$(1 - gV_1)G = (1 - gV_1)g' + g'V_2G(1 - gV_1)$$

usando a equação V.1 temos

$$(1 - gV_1)G = g + gV_2G$$

$$G = g + g(V_1 + V_2)G, \tag{56}$$

V.2. Teorema do salto

Vamos começar da clássica fórmula de cauchy:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{(\varepsilon - \varepsilon_k + i\delta)} = P \frac{1}{(\varepsilon - \varepsilon_k)} - i\pi\delta(\varepsilon - \varepsilon_k),$$

onde P é a parte principal. definimos a resolução $G(z)$ para um dado número complexo z por:

$$G(z) = (z - H)^{-1},$$

onde H é o Hamiltoniano, tomemos $|k\rangle$ sendo um autoestado de H definido por

$$H|k\rangle = \varepsilon_k|k\rangle,$$

os estados $|k\rangle$ s são dados, por exemplo, pela aproximação de tight-binding, logo, a matriz dos elementos de $G(z)$ é dada por:

$$\langle k|G(z)|k\rangle = \frac{1}{(z - \varepsilon_k)},$$

considere $z = \varepsilon + i\delta$ e $\delta \rightarrow 0_+$ isto é:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0_+} \frac{1}{(\varepsilon - \varepsilon_k + i\delta)} \cdot \frac{(\varepsilon + i\delta)}{(\varepsilon + i\delta)}$$

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{Tr}G(z)] = -\frac{1}{\pi} \sum_k \text{Im}[\langle k|G(z)|k\rangle]$$

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{Tr}G(z)] = -\frac{1}{\pi} \sum_k \text{Im} \frac{1}{(\varepsilon - \varepsilon_k + i\delta)}$$

então

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{Tr}G(z)] = \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = N(\varepsilon).$$

O teorema de agora em diante será chamado de teorema do imaginário e é válido para uma resolução arbitrária de $G(z)$ com $z = \varepsilon + i\delta$, conectando a parte imaginária do traço de $G(z)$ com a densidade de estados $N(\varepsilon)$.

Vamos mostrar que a equação 56 depende somente do potencial V_1

$$G = g + gV_1G + gV_2G$$

$$(1 - gV_1)G = g + gV_2G$$

definindo:

$$g' = (1 - gV_1)^{-1}g$$

ou

$$(1 - gV_1)g' = g$$

alternativamente

$$g' - g'gV_1 = g$$

$$g' = g'gV_1 + g$$

$$G = (1 - gV_1)^{-1}g + (1 - gV_1)^{-1}gV_2G$$

$$G = g' + g'V_2G.$$

Uma aplicação deste teorema é supor que V_2 é uma pequena perturbação e também que podemos resolver exatamente a equação.

$$g' = g + g'V_1g'$$

a equação completa para G pode ser resolvida formalmente com a aproximação de Born

$$G = g' + g'V_2G \simeq g' + g'V_2g'$$

note que a série de Born pode ser escrita como

$$G = g' + g'V_2g' + g'V_2g'V_2g' \dots$$

A aproximação acima corresponde a parada da série de Born no primeiro termo, que é justificada em certos casos. Uma aplicação muito concreta e usual do teorema é o espalhamento por um potencial

central com os sítios vizinhos próximos como em um sistema moderadamente concentrado e na visão de aplicações para interações hiperfinas [24].

Discutiremos agora a respeito da importância de um elétron no problema de impureza. Nomeado como a lei de Fridel, vamos começar calculando a mudança total na densidade de estados eletrônica como uma função da energia .

Iniciando com uma solução geral do problema de S-K para um potencial localizado na origem, onde a energia w contém uma pequena parte positiva imaginária, ($w = \varepsilon + i\delta$)

$$G_{ij}(w) = g_{ij}(w) + g_{i0}(w) \frac{V_0}{(1 - V_0 g_{00}(w))} g_{0i}(w)$$

em particular

$$\sum_i G_{ii}(w) = \sum_i g_{ii}(w) + g_{i0}(w) \frac{V_0}{(1 - V_0 g_{00}(w))} g_{0i}(w)$$

a variação na densidade de estados introduzida pela impureza como uma função da energia w pode ser calculada de :

$$\sum_i [G_{ii}(w) - g_{ii}(w)] = \frac{V_0}{(1 - V_0 g_{00}(w))} \sum_i g_{i0}(w) g_{0i}(w)$$

usando o resultado geral para a resolução $g_{ij}(w)$ tem-se:

$$g_{i0}(w) = \sum_k \frac{e^{i\vec{K}\vec{R}_i}}{(w - \varepsilon_k)}$$

$$g_{0i}(w) = \sum_{k'} \frac{e^{i\vec{K}'\vec{R}_i}}{(w - \varepsilon_{k'})}$$

isto segue que

$$\sum_i g_{0i}(w) g_{i0}(w) = \sum_k \frac{1}{(w - \varepsilon_k)(w - \varepsilon_{k'})} \sum_i e^{i(\vec{K} - \vec{K}')\vec{R}_i}$$

$$\sum_i g_{0i}(w) g_{i0}(w) = \sum_k \frac{1}{(w - \varepsilon_k)(w - \varepsilon_{k'})} \delta(K - K')$$

$$\sum_i g_{0i}(w) g_{i0}(w) = \sum_k \frac{1}{(w - \varepsilon_k)^2}$$

relembrando que:

$$g_{00}(w) = \sum_k \frac{1}{(w - \varepsilon_k)}$$

então:

$$\frac{\partial g_{00}(w)}{\partial w} = - \sum_k \frac{1}{(w - \varepsilon_k)^2}$$

por este caminho

$$\sum_i g_{0i}(w)g_{i0}(w) = - \frac{\partial g_{00}(w)}{\partial w}$$

então

$$\sum_i [G_{ii}(w) - g_{ii}(w)] = \frac{-V_0 \frac{\partial g_{00}(w)}{\partial w}}{(1 - V_0 g_{00}(w))} \sum_i g_{i0}(w)g_{0i}(w)$$

$$\sum_i [G_{ii}(w) - g_{ii}(w)] = \frac{d}{dw} [\ln(1 - V_0 g_{00}(w))]$$

e como usado no teorema do salto.

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} g_{00} = F_{00}(\varepsilon) - i\pi\rho(\varepsilon)$$

onde

$$F_{00}(\varepsilon) = \mathcal{P} \int d\varepsilon' \frac{1}{(\varepsilon - \varepsilon')}$$

é a parte principal da equação de cauchy e $\rho(w)$ é a densidade de estados do metal puro.

$$Z = 1 - V_0 g_{00} = Z^R + iZ^I,$$

onde $Z^R = 1 - V_0 F_{00}(\varepsilon)$ e $Z^I = \pi V_0 \varepsilon$ vamos chamar $Z_1 = \log Z$ e introduzir $Z_1 = Z_1^R + iZ_1^I$ isto implica que $Z = e^{Z_1} = e^{Z_1^R + iZ_1^I} = e^{Z_1^R} (\cos(Z_1^I) + i\sin(Z_1^I))$ por outro lado $Z = Z^R + iZ^I$ consequentemente obtemos.

$$Z^R = e^{Z_1^R} \cos(Z_1^I)$$

$$Z^I = e^{Z_1^R} \sin(Z_1^I)$$

e

$$\tan(Z_1^I) = \frac{Z^I}{Z^R} = \frac{\pi V_0 \rho(\varepsilon)}{(1 - V_0 F_{00}(\varepsilon))}$$

por outro lado conhecemos do teorema do salto

$$\Delta\rho(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_i [G_{ii}(w) - g_{ii}(w)] = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\partial \ln(1 - V_0 g_{00}(w))}{\partial w} = -\frac{1}{w} \text{Im} \frac{\partial \ln(Z)}{\partial w}$$

no $\lim_{\delta \rightarrow 0_0}$ tem-se

$$\Delta\rho(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\partial \ln(Z)}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\partial Z_1}{\partial \varepsilon}$$

então

$$\Delta\rho(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\partial Z_1^I}{\partial \varepsilon}$$

nesta conclusão , a mudança na densidade de estados é dada por :

$$\Delta\rho(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\arctan \frac{\pi V_0 \rho(\varepsilon)}{(1 - V_0 F_{00}(\varepsilon))} \right)$$

neste ponto introduzimos o importante conceito de mudança de fase definido por:

$$\delta(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \arctan \frac{\pi V_0 \rho(\varepsilon)}{(1 - V_0 F_{00}(\varepsilon))}$$

como uma escolha conveniente da definição de contagem do arco tangente nos podemos escrever

$$|\delta(\varepsilon)| = \frac{1}{\pi} \arctan \frac{\pi V_0 \rho(\varepsilon)}{(1 - V_0 F_{00}(\varepsilon))},$$

desta mudança de fase finalmente temos o famoso teorema de Fridel

$$\Delta\rho(\varepsilon) = \frac{\partial \delta(\varepsilon)}{\partial \varepsilon},$$

mais explicitamente indicando a dependencia sobre a força do potencial V_0 :

$$\Delta\rho(\varepsilon, V_0) = \frac{\partial \delta(\varepsilon, V_0)}{\partial \varepsilon}.$$

V.3. Existência de estados ligados no problema de S-K

Vamos começar da solução geral do problema de um potencial localizado na origem. novamente w inclui uma pequena parte imaginária. a resolução é dada por:

$$G_{ij}(w) = g_{ij}(w) + g_{i0} \frac{V_0}{(1 - V_0 g_{00}(w))} g_{0i}(w),$$

no caso do mesmo sítio

$$G_{ii}(w) = g_{ii}(w) + g_{i0} \frac{V_0}{(1 - V_0 g_{00}(w))} g_{0i}(w).$$

Para valores de w fora da banda não perturbada, a parte imaginária de $g_{ii}(w)$ desaparece. nós então discutiremos, para estas energias, o propagador a seguir:

$$G_{ii}(w) = g_{i0} \frac{V_0}{(1 - V_0 g_{00}(w))} g_{0i}(w),$$

vamos começar de $g_{ii}(w)$ no limite $\delta \rightarrow 0_+$

$$g_{ii}(w) = \mathcal{P} \int d\varepsilon' \frac{\rho(\varepsilon')}{(\varepsilon - \varepsilon')} - i\pi\rho(\varepsilon) = F_{00}(\varepsilon) - i\pi\rho(\varepsilon).$$

Para considerar energias desde a densidade de estados desaparecida, tem-se: $g_{00}(w) = F_{00}(\varepsilon)$.

V.4. Método da equação de movimento (EOM) para o cálculo das funções de Green

Os operadores $\hat{A}(t)$ satisfazem a equação de movimento na representação de Heisenberg:

$$i \frac{dA}{dt} = A(t)H - HA(t),$$

temos por definição que a função de Green retardada é dada por :

$$G_r(t, t') \equiv \langle \langle \hat{A}(t); \hat{B}(t') \rangle \rangle_r = \frac{1}{i} \Theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle_T, \quad (57)$$

onde na representação de Heisenberg os operadores são definidos por:

$$A(t) = e^{i\hat{H}t} \hat{A} e^{-i\hat{H}t},$$

e T é o operador de ordenamento temporal . As médias térmicas $\langle \dots \rangle$, são calculadas no ensemble grand-canônico:

$$\langle \psi \rangle_T \equiv \frac{1}{\Xi} \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \psi,$$

sendo Ξ a grande função de partição. De forma que o Hamiltoniano vem subtraído do operador número de partículas \hat{N} e μ é o potencial químico:

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv \hat{H} - \mu\hat{N}.$$

Devemos observar que na representação de Heisenberg a dependência temporal esta nos operadores, contrariamente a representação de Schrodinger onde a representação temporal está nos estados

quânticos (funções de onda em primeira quantização). Além disso, as relações de comutação podem ser escritas como:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \eta\hat{B}\hat{A}, \text{ com } \eta = \begin{cases} +1, & \text{B.E.} \\ -1, & \text{F.D.} \end{cases}$$

Derivando em relação ao tempo a Eq. 57 teremos que:

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}G_r(t, t') &= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle_T + \Theta(t-t')\langle[\frac{d}{dt}\hat{A}(t); \hat{B}(t')]\rangle_T \\ i\frac{d}{dt}\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle_r &= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle_T + \langle[\frac{d}{dt}\hat{A}(t); \hat{B}(t')]\rangle_T \\ i\frac{d}{dt}\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle_r &= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle_T + \langle[\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t); \hat{B}(t')]\rangle_T \\ &= \delta(t-t')\langle[\hat{A}(0), \hat{B}(0)]\rangle_T + \langle[\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t); \hat{B}(t')]\rangle_r, \end{aligned}$$

chegamos a equação:

$$i\frac{d}{dt}\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle_r = \delta(t-t')\langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle_T + \langle[\hat{A}(t)\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{A}(t)]; \hat{B}(t')\rangle_r$$

efetuando a transformada de Fourier chegamos a Eq. de movimento:

$$\langle\langle\hat{A}, \hat{B}\rangle\rangle_\omega = \langle[\hat{A}, \hat{B}]_+\rangle + \langle\langle[\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}]_-; \hat{B}\rangle\rangle_\omega.$$

V.5. Modelo de Fridel-Anderson-Moriya

Para dar a primeira aproximação para as impurezas magnéticas no metal, vamos começar com o modelo clássico de Fridel-Anderson-Moriya (FAM) a vantagem deste cenário é que dois tipos de estado são presentes: estados localizados no espaço e energia, os estados de condução e a mistura entre eles. isto contrasta com a ultima discussão sobre o modelo de Slater-Koster (SK) onde somente os estados itinerantes estavam presentes e o magnetismo é associado ao spin, dependendo, do espalhamento na impureza do sítio.

Para obtermos o modelo temos que:

I) O gás de elétrons livres, usualmente estados s ou sp descrevem um metal simples como Al ou Cu. Estes subsistemas são descritos pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$$

onde $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{j\sigma}$) são operadores de criação (aniquilação) para elétrons nos sítios i e j respectivamente e T_{ij} é o hopping entre estes sítios, correspondendo com uma banda de energia ε_k . para tal sistema a resolução de g_{ij} é dada por

$$g_{ij}(w) = \sum_k \frac{e^{i\vec{K}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}}{(w - \varepsilon_k)}$$

esta resolução e supostamente conhecida a princípio.

II) A impureza introduz um nível localizado que chamaremos daqui em diante de um estado d, e este é descrito pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_{imp} = \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{0\sigma}^{\dagger} d_{0\sigma} + U_{dd} n_{0\uparrow}^d n_{0\downarrow}^d$$

neste Hamiltoniano $d_{0\sigma}^{\dagger}$ e $d_{0\sigma}$ são respectivamente os operadores de criação/aniquiação de um elétron localizado no estado d na origem. A posição na energia do nível localizado é dada por ε_d , U_{dd} corresponde a interação colombiana entre eletrons do mesmo sítio. Este Hamiltoniano localizado, envolvendo uma interação elétron-elétron pode ser resolvido exatamente somente no limite onde a hibridização com estados condutores esta completamente desconsiderada. A simplificação da aproximação pode ser feita usando a aproximação de Hartree-Fock

$$\mathcal{H}_{imp} \simeq \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{0\sigma}^{\dagger} d_{0\sigma} + U_{dd} \langle n_{0\uparrow}^d \rangle n_{0\downarrow}^d + U_{dd} n_{0\uparrow}^d \langle n_{0\downarrow}^d \rangle = \sum_{\sigma} \varepsilon_d d_{0\sigma}^{\dagger} d_{0\sigma} + U_{dd} \langle n_{0-\sigma}^d \rangle n_{0\sigma}^d$$

vamos introduzir a energia renormalizada de hartree-fock do nível d.

$$\varepsilon_{d\sigma} = \varepsilon_d + U_{dd} \langle n_{0-\sigma}^d \rangle$$

então aproximadamente:

$$\mathcal{H}_{imp} \simeq \sum_{\sigma} \varepsilon_{d\sigma} d_{0\sigma}^{\dagger} d_{0\sigma}.$$

V.6. Método do potencial efetivo para superfícies

Considere uma cadeia monoatômica semi-infinita com interação V entre os primeiros vizinhos descrita pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = - \sum_i V |i\rangle \langle i+1| + V |i+1\rangle \langle i|,$$

que é representada na forma matricial como:

$$\mathcal{H} = - \begin{Bmatrix} 0 & V & 0 & 0 & . \\ V & 0 & V & 0 & . \\ 0 & V & 0 & V & . \\ 0 & 0 & V & 0 & . \end{Bmatrix}.$$

Com o Hamiltoniano definido é possível calcular a função de Green através da equação

$$G = (E - \mathcal{H})^{-1}, \quad (58)$$

obtemos assim a matriz associada a função de Green que é dada por:

$$G = \begin{pmatrix} E & V & 0 & 0 & . \\ V & E & V & 0 & . \\ 0 & V & E & V & . \\ 0 & 0 & V & E & . \end{pmatrix}. \quad (59)$$

Usando a definição dada pela equação 58, e indexando de 0 a ∞ sendo 0 o átomo da superfície, a função de Green na superfície é definida por :

$$g = \langle 0|G|0 \rangle_s = \frac{1}{(E - h)}, \quad (60)$$

onde $h(E)$ é uma auto-energia representando um lado da cadeia. Logo a função de Green do “bulk” de um átomo inserido em uma cadeia infinita é descrita por:

$$g' = \langle 0|G|0 \rangle_b = \frac{1}{(E - 2h)}, \quad (61)$$

o fator 2 surge pois existem duas auto-energia, uma associada ao lado esquerdo da cadeia e outra ao lado direito da mesma. Utilizando das equações 60 e 61 temos uma relação entre g e g' :

$$g(E - h) = 1,$$

$$2g(E - h) = 2,$$

$$E + (E - 2h) = \frac{2}{g},$$

$$E + \frac{1}{g'} = \frac{2}{g}.$$

O potencial efetivo h pode ser calculado através das equações 59 e 60:

$$g = \frac{1}{(E - h)} = \left\{ \begin{matrix} E & V \\ V & E - h \end{matrix} \right\}_{00}^{-1},$$

mas $(E - h) = g^{-1}$ logo:

$$g = \left\{ \begin{array}{cc} E & V \\ V & g^{-1} \end{array} \right\}_{00}^{-1}, \quad (62)$$

Calculando a inversa temos:

$$g = \frac{1}{(E/g - V^2)} \left\{ \begin{array}{cc} g^{-1} & -V \\ -V & E \end{array} \right\}_{00}.$$

Tomemos o termos da matriz associado ao sítio zero:

$$g = \frac{g^{-1}}{(E/g - V^2)},$$

$$g(E - V^2g) = 1.$$

$$(Vg)^2 - 2\alpha Vg + 1 = 0,$$

onde $\alpha = \frac{E}{2V}$, basta agora calcularmos as raízes da equação de segundo grau para obtermos a função de Green:

$$g = \frac{1}{V}(\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 1}).$$

A função de Green para todos os outros átomos pode ser facilmente obtida usando a notação definida na equação 62, podemos estender o método para qualquer nível tal que :

$$g = \left\{ \begin{array}{ccc} E & V & 0 \\ V & E & V \\ 0 & V & g^{-1} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{cccc} E & V & 0 & 0 \\ V & E & V & 0 \\ 0 & V & E & V \\ 0 & 0 & V & g^{-1} \end{array} \right\}.$$

V.7. Cálculo do winding number

Neste capítulo será introduzido o winding number [25] que corresponde ao número de estados de borda na cadeia do isolante topológico. Através desse invariante topológico podemos verificar em qual fase topológica o sistema se encontra. Aqui será explicado em detalhes como calcular o winding number:

1 - Expressar o Hamiltoniano do sistema em termos dos ks:

Consideremos o Hamiltoniano da cadeia SSH definido pela equação 19

$$\begin{aligned}
H_{SSH}(n) &= -V_1 \sum_{-\infty}^{\infty} (|n, 2\rangle \langle n, 1| + |n, 1\rangle \langle n, 2|) \\
&\quad - V_2 \sum_{-\infty}^{\infty} (|n+1, 1\rangle \langle n, 2| + |n, 2\rangle \langle n+1, 1|)
\end{aligned} \tag{63}$$

Usando a transformada de fourier na equação 63 temos

$$\begin{aligned}
H_{SSH}(k) &= -V_1 \sum_{-\infty}^{\infty} (|k, 2\rangle \langle k, 1| + |k, 1\rangle \langle k, 2|) \\
&\quad - V_2 \sum_{-\infty}^{\infty} (e^{-ik} |k, 1\rangle \langle k, 2| + e^{ik} |k, 2\rangle \langle k, 1|)
\end{aligned} \tag{64}$$

em notação matricial a equação 64 e dada por

$$H_{SSH}(k) = \begin{pmatrix} 0 & -V_1 - V_2 e^{ik} \\ -V_1 - V_2 e^{-ik} & 0 \end{pmatrix}$$

$$H_{SSH}(k) = \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h^*(k) & 0 \end{pmatrix}$$

onde $h(k) = -V_1 - V_2 e^{ik}$.

2 - Encontrar a matriz K que anti-comute com H(k) ($H(k)K + KH(k) = 0$):

Seja

$$K = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

$$[H(k), K] = \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h^*(k) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h^*(k) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

usando também que a matriz K tem que ser unitária concluímos que

$$K = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

3 - Calcular os autovetores da matriz k:

Neste exemplo os autovetores estão calculados

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{65}$$

4 - Definir a matriz U com os autovetores de K :

Usando 65 definimos então a matriz U

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

5 - Calcular o Hamiltoniano $H(A(k))$:

Utilizando a matriz U obtemos a matriz $H(A(k))$ usando que $U^\dagger H(k)U = H(A(k))$

$$U^\dagger H(k)U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h^*(k) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$U^\dagger H(k)U = \begin{pmatrix} 0 & -h(k) \\ -h^*(k) & 0 \end{pmatrix}$$

onde

$$H(A(k)) = \begin{pmatrix} 0 & A(k) \\ A^*(k) & 0 \end{pmatrix}$$

com $A(k) = -h(k)$.

6 - Calcular o winding number:

Com o $A(k)$ definido podemos agora calcular o winding number usando a fórmula

$$w = -1/2i\pi \int_{-\pi}^{\pi} dk \partial_k \ln(\text{Det}A(k))$$

$$w = 1/2\pi \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{eik}{e^{ik} - \mathcal{S}}$$

onde $\mathcal{S} = -\frac{V_1}{V_2}$.

V.8. Cálculo dos coeficientes termoelétricos

Neste capítulo calcularemos detalhadamente o coeficiente L_0 para entendermos como foram feitos os demais calculos. Começaremos definindo a distribuição de Fermi-Dirac

$$n_f(w) = \frac{1}{e^{\frac{w}{T}} + 1},$$

$$\frac{\partial n_f(w)}{\partial w} = \frac{-e^{\frac{w}{T}}}{T(e^{\frac{w}{T}} + 1)^2}.$$

Consideremos agora a função de Green da cadeia SSH

$$G_0(E) = \frac{1}{2V_2^2 E} ((E^2 + V_2^2 - V_1^2) \pm (((E^2 + V_2^2 - V_1^2)^2 - 4E^2 V_2^2)^{\frac{1}{2}})),$$

considerando $w = \frac{E}{V_2}$ e $V = \frac{V_1}{V_2}$ temos

$$G_0(w) = \frac{1}{2w} ((w^2 + 1 - V^2) \pm (((w^2 + 1 - V^2)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})),$$

considerando $d = 1 - V^2$ temos

$$G_0(w) = \frac{1}{2w} ((w^2 + d) \pm (((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})),$$

$$G_0(w) = \frac{1}{2} ((w + \frac{d}{w}) \pm \frac{(((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})}{w}),$$

tomando $w = w' + i\varepsilon$

$$G_0(w) = \frac{1}{2} ((w' + i\varepsilon + \frac{d}{w' + i\varepsilon}) \pm \frac{(((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})}{w}),$$

$$G_0(w) = \frac{1}{2} ((w' + i\varepsilon + \frac{d(w' - i\varepsilon)}{w'^2 + \varepsilon^2}) \pm \frac{(((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})}{w}),$$

$$G_0(w) = \frac{1}{2} ((w' + \frac{dw'}{w'^2 + \varepsilon^2} + i(\varepsilon - \frac{d\varepsilon}{w'^2 + \varepsilon^2}) \pm \frac{(((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})}{w}),$$

mas $\delta(w) = \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{w'^2 + \varepsilon^2}$

$$G_0(w) = \frac{1}{2} ((w' + \frac{dw'}{w'^2 + \varepsilon^2} + i(\varepsilon - d\pi\delta(w)) \pm \frac{(((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})}{w}),$$

tomando o imaginário $G_0(w)$ e $\varepsilon \rightarrow 0$

$$ImG_0(w) = \frac{1}{2} (-d\pi\delta(w) \pm Im \frac{(((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})}{w}),$$

$$ImG_0(w) = \frac{1}{2} (-d\pi\delta(w) + Im(ReG_d(w) + iImG_d(w))Im(\frac{1}{w' + i\varepsilon})),$$

onde $G_d(w) = ((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}}$

$$ImG_0(w) = \frac{1}{2} (-d\pi\delta(w) + Im(ReG_d(w) + iImG_d(w))Im(\frac{w' - i\varepsilon}{w'^2 + \varepsilon^2})),$$

$$ImG_0(w) = \frac{1}{2}(-d\pi\delta(w) + Im(ReG_d(w) + iImG_d(w)))Im\left(\frac{w'}{w'^2 + \varepsilon^2} - \frac{i\varepsilon}{w'^2 + \varepsilon^2}\right),$$

$$ImG_0(w) = \frac{1}{2}(-d\pi\delta(w) + Im(ReG_d(w) + iImG_d(w)))Im\left(\frac{w'}{w'^2 + \varepsilon^2} - i\pi\delta(w)\right),$$

tomando mais uma vez $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$ImG_0(w) = \frac{1}{2}(-d\pi\delta(w) + Im(ReG_d(w) + iImG_d(w)))Im\left(\frac{1}{w'} - i\pi\delta(w)\right),$$

$$ImG_0(w) = \frac{1}{2}(-d\pi\delta(w) + Im\left(\frac{ReG_d(w)}{w} - i\pi ReG_d(w)\delta(w) + i\frac{ImG_d(w)}{w} + \pi\delta(w)ImG_d(w)\right)),$$

$$G_i = ImG_0(w) = \frac{1}{2}(-d\pi\delta(w) - \pi ReG_d(w)\delta(w) + \frac{ImG_d(w)}{w}),$$

$$G_i = ImG_0(0) = \frac{-\pi}{2}(d\delta(0) + ReG_d(0)\delta(0) + \frac{ImG_d(0)}{w}),$$

mas $ReG_d(0) = (((0)^2 + d)^2 - 4(0)^2)^{\frac{1}{2}} = |d|$ logo

$$G_i = ImG_0(0) = \frac{-\pi}{2}\left(d + |d| + \frac{Im|d|}{w}\right),$$

$$G_i = ImG_0(0) = \frac{-\pi}{2}(d + |d|).$$

Calculamos agora a parte real da função de Green

$$ReG_0(w) = \frac{1}{2}\left(Re\left(w + \frac{d}{w}\right) \pm Re\frac{(((w^2 + d)^2 - 4w^2)^{\frac{1}{2}})}{w}\right),$$

$$ReG_0(w) = \frac{1}{2}\left(Re\left(w + \frac{d}{w}\right) \pm Re(ReG_d(w) + iImG_d(w))Re\left(\frac{1}{w}\right)\right),$$

tomando $w = w' + i\varepsilon$

$$ReG_0(w) = \frac{1}{2}\left(Re\left(w' + i\varepsilon + \frac{d}{w' + i\varepsilon}\right) \pm Re(ReG_d(w) + iImG_d(w))Re\left(\frac{1}{w' + i\varepsilon}\right)\right),$$

$$ReG_0(w) = \frac{1}{2}\left(Re\left(w' + i\varepsilon + \frac{d(w' - i\varepsilon)}{w'^2 + \varepsilon^2}\right) \pm Re(ReG_d(w) + iImG_d(w))Re\left(\frac{w' - i\varepsilon}{w'^2 + \varepsilon^2}\right)\right),$$

$$ReG_0(w) = \frac{1}{2}(w' + \frac{dw'}{w'^2 + \varepsilon^2}) \pm Re(\frac{w' ReG_d(w)}{w'^2 + \varepsilon^2} + \frac{w' i ImG_d(w)}{w'^2 + \varepsilon^2} - \frac{-i ReG_d(w)\varepsilon}{w'^2 + \varepsilon^2} + \frac{ImG_d(w)\varepsilon}{w'^2 + \varepsilon^2}),$$

$$ReG_0(w) = \frac{1}{2}(w' + \frac{dw'}{w'^2 + \varepsilon^2}) \pm Re(\frac{w' ReG_d(w)}{w'^2 + \varepsilon^2} + \frac{w' i ImG_d(w)}{w'^2 + \varepsilon^2} + i ReG_d(w)\pi\delta(w) + ImG_d(w)\pi\delta(w)),$$

tomando $\varepsilon \rightarrow 0$

$$ReG_0(w) = \frac{1}{2}(w' + \frac{d}{w'}) \pm Re(\frac{ReG_d(w)}{w'} + \frac{i ImG_d(w)}{w'} + i ReG_d(w)\pi\delta(w) + ImG_d(w)\pi\delta(w)),$$

$$G_r = ReG_0(w) = \frac{1}{2}(w' + \frac{d}{w'}) + \frac{ReG_d(w)}{w'} + ImG_d(w)\pi\delta(w),$$

$$G_r = ReG_0(0) = \frac{1}{2}(w' + \frac{d}{w'}) + \frac{|d|}{w'},$$

Usando

$$G_\lambda^\sigma = \begin{pmatrix} (G_\lambda^{0\sigma})^{-1} & V \\ V & (G_s^\sigma)^{-1} \end{pmatrix}^{-1}$$

onde

$$G_\lambda^{0\sigma} = (w - \varepsilon_\sigma)^{-1}$$

e o Greeniano dos elétrons na cadeia isolada é dado por:

$$G_s^\sigma = G_0$$

sendo $g(w)$ definida pela equação G_0 . Das equações V.8 e V.8 temos:

$$G(0) = G_\lambda^{0\sigma} = (w - \varepsilon - V^2 G_0)^{-1}.$$

$$G(0) = \frac{1}{w - \varepsilon - V^2 G_0},$$

mas $G_0 = G_r + iG_i$

$$G(0) = \frac{1}{(w - \varepsilon - V^2 G_r - iV^2 G_i)},$$

$$G(0) = \frac{(w - \varepsilon - V^2 G_r + iV^2 G_i)}{(E - \varepsilon - V^2 G_r - iV^2 G_i)(E - \varepsilon - V^2 G_r + iV^2 G_i)},$$

$$G(0) = \frac{(w - \varepsilon - V^2 G_r + iV^2 G_i)}{(E - \varepsilon - V^2 G_r)^2 + (V^2 G_i)^2},$$

$$ImG(0) = \frac{V^2 G_i}{(w - \varepsilon - V^2 G_r)^2 + (V^2 G_i)^2},$$

com a função de Green $G(0)$ calculada podemos obter o parâmetro de Anderson que é definido por

$$\Gamma = 2\pi V^2 \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k),$$

mas a densidade de estados pode ser definida por

$$\sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) = \frac{-1}{\pi} Im[G(0)],$$

logo

$$\Gamma = \frac{2\pi V^2}{\pi} Im[G(0)] = \frac{2V^4 G_i}{(w - \varepsilon - V^2 G_r)^2 + (V^2 G_i)^2},$$

podemos agora calcular o coeficiente de transporte que é definido por

$$\mathcal{L}_n(T) = \frac{1}{h} \int \frac{-\partial n_f(T)}{\partial w} w^n \tau(w) dw,$$

onde

$$\tau(w) = -\Gamma Im[G_0(w)] = -\Gamma G_i,$$

dessa forma temos que

$$\mathcal{L}_0(T) = \frac{1}{h} \int \frac{e^{\frac{w}{T}}}{T(e^{\frac{w}{T}} + 1)^2} \frac{2V^4 G_i^2}{(w - \varepsilon - V^2 G_r)^2 + (V^2 G_i)^2} dw,$$

tomando $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\mathcal{L}_0(T) = \frac{1}{h} \int \frac{e^{\frac{w}{T}}}{T(e^{\frac{w}{T}} + 1)^2} \frac{2V^4 G_i^2}{(w - V^2 G_r)^2 + (V^2 G_i)^2} dw.$$

- [2] M. Wimmer, A. R. Akhmerov, M. V. Medvedyeva, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, *Physical Review Letters* **105** (2010), 10.1103/physrevlett.105.046803.
- [3] E.-N. Foo and H.-S. Wong, *Phys. Rev. B* **9**, 1857 (1974).
- [4] D. Goldhaber-Gordon, H. Shtrikman, D. Mahalu, D. Abusch-Magder, U. Meirav, and M. A. Kastner, *Nature* **391**, 156 (1998).
- [5] A. Y. Kitaev, *Physics-Uspekhi* **44**, 131 (2001).
- [6] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 177002 (2010).
- [7] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, *Science* **336**, 1003 (2012), <https://science.sciencemag.org/content/336/6084/1003.full.pdf>.
- [8] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, *Science* **346**, 602 (2014), <https://science.sciencemag.org/content/346/6209/602.full.pdf>.
- [9] D. E. Liu and H. U. Baranger, *Phys. Rev. B* **84**, 201308 (2011).
- [10] L. S. Ricco, F. A. Dessotti, I. A. Shelykh, M. S. Figueira, and A. C. Seridonio, *Scientific Reports* **8**, 2790 (2018).
- [11] W. Shockley, *Phys. Rev.* **56**, 317 (1939).
- [12] F. Szmulowicz, *European Journal of Physics* **18**, 392 (1997).
- [13] I. Tamm, *Zeitschrift für Physik* **76**, 849 (1932).
- [14] D. Kalkstein and P. Soven, *Surface Science* **26**, 85 (1971).
- [15] D.-L. Deng, S.-T. Wang, K. Sun, and L.-M. Duan, *Physical Review B* **91** (2015), 10.1103/physrevb.91.094513.
- [16] T. A. Costi and V. Zlatić, *Phys. Rev. B* **81**, 235127 (2010).
- [17] D. Nemir and J. Beck, *Journal of Electronic Materials* **39**, 1897 (2010).
- [18] B. Dong and X. L. Lei, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 11747 (2002).
- [19] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698 (1979).
- [20] E.-N. Foo, M. Thorpe, and D. Weaire, *Surface Science* **57**, 323 (1976).
- [21] M. A. Continentino, H. Caldas, D. Nozadze, and N. Trivedi, *Physics Letters A* **378**, 3340–3347 (2014).
- [22] E.-N. Foo and L. G. Johnson, *Surface Science* **55**, 189 (1976).
- [23] E.-N. Foo and H. S. Wong, *Phys. Rev. B* **10**, 4819 (1974).
- [24] G. D. Mahan, *Livro* **1003** (1981), 1437043.
- [25] A. Maiellaro, F. Romeo, and R. Citro, *The European Physical Journal Special Topics* **227**, 1397 (2018).