



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DO MARAJÓ – BREVES
FACULDADE DE CIÊNCIAS NATURAIS

JOSÉ DO NASCIMENTO CARDOSO

INTRODUÇÃO AO CÁLCULO DE INVARIANTES TOPOLÓGICOS

BREVES - PA
2019

JOSÉ DO NASCIMENTO CARDOSO

INTRODUÇÃO AO CÁLCULO DE INVARIANTES TOPOLÓGICOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Faculdade de Ciências Naturais da Universidade Federal do Pará, como requisito parcial para obtenção do grau de Licenciado em Ciências Naturais.

Orientador: Prof. Dr. Leandro Oliveira do Nascimento

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) de acordo com ISBD
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Pará
Gerada automaticamente pelo módulo Ficat, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)**

C268i Cardoso, José do Nascimento.
Introdução ao cálculo de invariantes topológicos / José do Nascimento
Cardoso. — 2019.
33 f. : il.

Orientador(a): Prof. Dr. Leandro Oliveira do Nascimento
Trabalho de Curso (Graduação) - Universidade Federal do Pará,
Campus Universitário de Breves, Faculdade de Ciências Naturais, Breves,
2019.

1. Topologia. 2. Tecnologia. 3. Poliacetileno. I. Título.

CDD 530.01

JOSÉ DO NASCIMENTO CARDOSO

INTRODUÇÃO AO CÁLCULO DE INVARIANTES TOPOLÓGICOS

Trabalho de Conclusão de curso apresentado à Faculdade de Ciências Naturais da Universidade Federal do Pará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Licenciado em Ciências Naturais, aprovado com o Conceito _____.

Data de aprovação: 28 / 02 / 2019

Banca examinadora:

Prof. Dr. Leandro Oliveiro do Nascimento
UFPA-FACIN-BREVES (Orientador)

Prof. Dr. Manolo Cleiton Costa de Freitas
UFPA-FACIN-BREVES (MEMBRO INTERNO)

Prof. Esp. Edielson dos Santos Barbosa (MEMBRO EXTERNO)

A minha família por todo o apoio e dedicação incondicional e aos meus amigos.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, à minha querida mãe Madalena Resende do Nascimento que foi a mulher que sempre acreditou em mim, me motivou inúmeras vezes e me deu todo suporte necessário para entrar numa graduação. A todos os meus amigos, em especial aos da minha turma de graduação que sempre estiveram do meu lado me ajudando, Deivid Hugo, Joniel, Mateus, Ronald e Luiz Antônio, obrigado pelos 4 anos de amizades e bons momentos. A professora Gleiciane Leal Moraes Pinheiro pela oportunidade que me deu de trabalhar com um projeto. Sou muito grato ao meu professor orientador Dr. Leandro Oliveira do Nascimento pelas oportunidades de participar dos projetos de pesquisa e de ensino, além da paciência e comprometimento com meu trabalho de conclusão de curso. A todos os professores da faculdade de Ciências Naturais pela honra de participar de suas aulas e a UFPA por todo suporte que tem oferecido.

“Nem tudo que se enfrenta pode ser modificado, mas nada pode ser modificado até ser enfrentado”

Albert Einstein

RESUMO

Este trabalho consiste de uma revisão bibliográfica sobre o tema isolantes topológicos dentro do contexto da física da matéria condensada. Apresentamos os principais conceitos dessa área, bem como as ferramentas básicas para estudar o tema no Poliacetileno. Dentre essas, discutimos em detalhes o teorema do resíduo e o *winding number*. O *winding number*, também conhecido como número de preenchimento, representa um invariante topológico, o qual pode ser aplicado para a descrição de fases topológicas no Poliacetileno. Este material é um polímero orgânico, ou seja, materiais caracterizados por serem formados por átomos de carbono e hidrogênio dispostos em forma de cadeia. O estado de vácuo desse material é duplamente degenerado, sendo que apenas uma delas possui topologia não trivial, ou seja, possui *winding number* diferente de zero. Os benefícios para o ramo da tecnologia são diversos com as aplicações de isolantes topológicos, e condutores quando dopados com materiais oxidantes ou redutores.

Palavra-chave: Topologia, Tecnologia, Poliacetileno.

ABSTRACT

This work consists of a bibliographical review on the topic topological insulation within the context of condensed matter physics. We present the main concepts of this area, as well as the basic tools to study the topic in Polyacetylene. Among these, we discuss in detail the residue theorem and the winding number. The winding number, also known as fill number, represents a topological invariant, which can be applied to the description of topological phases in Polyacetylene. This material is an organic polymer, that is, materials characterized by the formation of carbon and hydrogen atoms arranged in a chair shape. The vacuum state of this material is doubly degenerate, with only one of them having non-trivial topology, that is, winding number different from zero. The benefits to the field of technology are diverse with the applications of topological insulators, and conductors when doped with oxidizing or reducing materials

Keyword: Topology, Technology, Polyacetylene.

LISTA DE ILUSTRAÇÃO

Figura 1 -	Relação de dispersão para um elétron não relativístico. Usamos $2m = 1$. Observe que apenas a região com energia positiva é acessível aos elétrons.....	16
Figura 2 -	Exemplo de relação de dispersão para um metal. Usamos $2m = 1$. Observe que no ponto $p = 0$ as duas curvas se tocam. Consideramos, por simplicidade, que a energia de Fermi está em cima da origem.....	18
Figura 3 -	Exemplo de relação de dispersão para um isolante. Usamos $2m = 1$. Observe que no ponto $p=0$ as duas curvas não se tocam. Consideramos, por simplicidade, que a energia de Fermi está em cima da origem.....	18
Figura 4 -	Ilustra as três possíveis curvas englobando o ponto z_0	20
Figura 5 -	Representação de curvas no plano complexo.....	23
Figura 6 -	Ilustra duas possíveis fases, sendo uma $\delta < 0$ e a outra $\delta > 0$	28

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	OBJETIVOS	14
2.1	Objetivo geral	14
2.2	Objetivos específicos	14
3	METAIS, ISOLANTES E SEMICONDUTORES	15
4	INTEGRAÇÃO NO PLANO COMPLEXO	19
4.1	Winding number	19
4.2	Teorema do resíduo	22
4.3	Aplicação ao cálculo de integrais reais	24
5	POLIACETILENO	27
5.1	O modelo SSH	27
6	CONCLUSÃO	31
	REFERÊNCIAS	32

1 INTRODUÇÃO

Estudamos no ensino básico que os estados físicos da matéria são: sólido, líquido e gasoso. Entretanto, existem outros estados físicos que não estudamos, por exemplo, o plasma. Para Hewitt (2002), o plasma é considerado o quarto estado da matéria e menos comum no meio ambiente, entretanto é o que prevalece no universo, o Sol e as estrelas por exemplo são formados basicamente de plasma. Embora seja muito importante estudar esse estado físico, nossa ênfase será em estados topológicos da matéria.

Com a descoberta de estados topológicos da matéria, possibilitou um novo rumo para classificar determinados sistemas de matéria condensada. Alguns efeitos como o de transporte eletrônico spin-dependente sem dissipação, estatística e carga fracionária são desprovidas pela ordem topológica em meios que possuem em suas fronteiras, estados metálicos. Segundo Ortmann *et al.*, 2015; Schmidt *et al.*, 2016, afirmam que com essas propriedades é possível o desenvolvimentos nas áreas de spintrônica, óptica e computação quântica, que são essenciais no âmbito cenário tecnológico.

No ano de 2016, a academia Real Sueca de Ciências, homenageou com o Nobel de Física três grandes cientistas que estudavam fases e estados da matéria, utilizando apenas métodos matemáticos, isso possibilitou o avanço para verificar outros estados da matéria desconhecido. Os premiados foram Frederick Duncan Michael Haldane, da Universidade de Princeton, David James Thouless, da Universidade de Washington e John Michael Kosterlitz, da Universidade Brown, todas nos Estados Unidos (COMMISSARIAT, 2016). Esses cientistas utilizaram como base, conceitos da área de topologia, que por sua vez, é o ramo da matemática que descreve as propriedades que não mudam quando uma forma é alterada de modo gradual. Sendo um dos objetivos de estudo, a verificação de propriedades da matérias que possuíam características elétricas incomum.

A teoria de Landau-Ginzburg, enfatiza a matéria e suas possíveis fases quânticas que descrevem violações em simetrias adjacentes. Um exemplo bastante peculiar seria o alinhamento de spins em um sistema magnético, a ordem ferromagnética é proveniente da quebra da simetria de rotação. Porém, com a descoberta do efeito Hall quântico (EHQ) que ocorreu no ano de 1980, acarretou na comprovação da existência de uma ordem e de estados topologicamente desconhecidos até então (THOULES, 1998; WEN, 2004).

O Efeito Hall Quântico é caracterizado por uma propagação unidirecional de estados metálicos em bordas de sistemas bidimensionais eletrônicos, sobre a influência de um campo magnético externo perpendicular aplicado ao sistema. Por conta disso, no bulk que esses sistemas apresentam, há discretização das órbitas eletrônicas e os estados possuem um *gap* de energia, tornando-se isolantes (KATO *et al.*, 2014).

David James Thouless, um dos primeiros a interpretar alguns fenômenos de quantização com o surgimento de números quânticos topológicos. E isso, foi o que ocorre no Efeito Hall Quântico inteiro, onde observaram que a condutância de uma amostra sobre um campo magnético e uma tensão elétrica resultaram em platôs que se tornaram robustos à variações tanto na composição quanto na forma da amostra. David James Thouless em colaboração com John Michael Kosterlitz, demonstraram que defeitos topológicos, chamados de vórtices e antivórtices, estão por trás de certas transições de fase em filmes finos. Quando em altas temperaturas os defeitos simultaneamente dão origem a uma estrutura desordenada. Mas, quando essa temperatura vai diminuindo, vórtices e antivórtices se combinam em pares formando-se uma fase com uma espécie de ordem topológica.

As ferramentas conceituais que os ganhadores do Nobel de 2016 ajudaram a criar baseadas em noções de topologia, são atualmente indispensáveis para o entendimento de novos e promissores materiais como isolantes topológicos. Por conta do trabalho desses cientistas, a ciência hoje, pode buscar por outras fases da matéria ainda desconhecidas, e no futuro poder aplicar em outros campos da ciência e da eletrônica, colaborando para o desenvolvimento de computadores quânticos (ORTMANN *et al.*, 2015).

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Realizar uma revisão bibliográfica sobre fases topológicas na área de física teórica, introduzindo as principais ferramentas matemáticas, tais como *winding number* e teorema do resíduo.

2.2 Objetivos específico

- Discutir o conceito de fases topológicas;
- Introduzir as ferramentas matemáticas básicas para descrever topologia no poliacetileno;
- Mostrar a relação entre o *winding number* e o teorema do resíduo;
- Exemplificar o teorema do resíduo em aplicações de integrais no plano complexo.

3 METAIS, ISOLANTES E SEMICONDUTORES

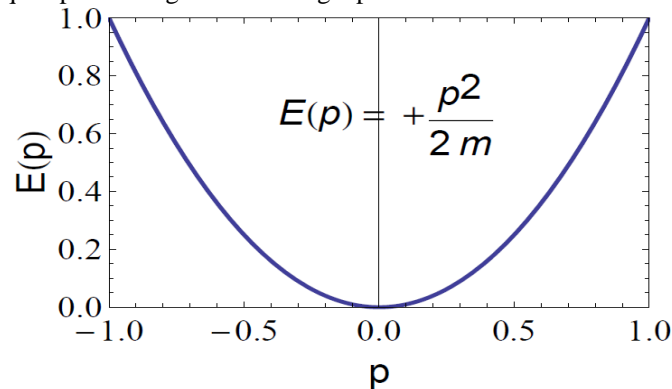
Nesta seção será apresentado a classificação dos materiais com relação a sua condutividade elétrica, usando apenas uma análise qualitativa da estrutura de bandas eletrônicas de cada um, sem nos preocuparmos com uma descrição de primeiros princípios o que necessitaria de um grande ferramental teórico em física quântica.

De acordo com essa classificação, os materiais são separados entre metais, isolantes e semicondutores. Metais são bons condutores de corrente elétrica, como por exemplo o cobre, enquanto isolantes são maus condutores de corrente elétrica, por exemplo o diamante. Semicondutores são materiais que podem conduzir eletricidade por efeito da agitação térmica (SERWAY; JEWETT, 2004).

Os sólidos são formados por átomos ligados em uma rede cristalina. Em geral, essa rede tem uma periodicidade espacial, ou seja, a disposição dos átomos tende a se repetir. Esses átomos, por sua vez, possuem elétrons que estão ligados ao núcleo atômico, sendo que os elétrons mais externos são chamados de elétrons da camada de valência (HEWITT, 2002). São esses elétrons os responsáveis por determinar a condutividade elétrica do material. Na mecânica de uma partícula, precisamos obter a energia total da partícula para descrever qualitativamente o tipo de movimento da partícula. O sistema ligado terra - lua, por exemplo, possui uma energia negativa o que faz com o que o sistema permaneça ligado, tornando impossível a lua se separar da terra. Analogamente, precisamos calcular a energia desses elétrons das bandas de valência.

Para exemplificar o que é uma banda eletrônica, iremos considerar um elétron não relativístico com massa (m) e momento (p). A energia desse elétron é $E(p) = p^2/2m$. Esse tipo de função (energia em função do momento) é também conhecida como equação de dispersão do sistema. A banda eletrônica do sistema é obtida através do gráfico dessa dispersão. Obviamente esse exemplo não é uma “banda”, já que estamos descrevendo apenas uma única partícula, ao contrário do estado sólido que é formado por um número N muito grande de átomos. No entanto, a banda eletrônica de um material também é dada por esse tipo de gráfico.

Figura 1: Relação de dispersão para um elétron não relativístico. Usamos $2m = 1$. Observe que apenas a região com energia positiva é acessível aos elétrons.



Fonte: José do Nascimento Cardoso

Com base no exemplo anterior, construiremos um exemplo de banda eletrônica para um metal. Antes disso, precisamos incluir o fato de que um sistema com uma banda eletrônica possui muitos elétrons e, portanto, é preciso determinar o comportamento coletivo deles. No caso de um sistema com muitos corpos (elétrons), um elemento fundamental é a energia de Fermi (E_F). Essa quantidade é igual ao potencial químico em temperatura zero. Por outro lado, o potencial químico é calculado pela derivada da energia interna U do sistema pelo número de partículas. Em outras palavras, ele mede quanta energia o sistema ganha ou perde ao receber ou perder um determinado número de partículas (HEWITT, 2009). Aqui, discutimos como a energia de Fermi se relaciona com o número de estados ocupados do sistema. Isso é importante, pois uma vez conhecida a banda eletrônica, precisamos determinar em qual parte da banda os estados eletrônicos estão “localizados”, sendo isso o que entendemos como comportamento coletivo dos elétrons.

A natureza dos átomos e dos elétrons que compõem o estado sólido é quântica. Por isso, sempre descrevemos o comportamento destes em termos de probabilidades. Isso também se aplica ao fato de um possível estado de energia (E) estar ocupado ou não, o que é chamado de probabilidade de ocupação $P(E)$. Note que a energia, a priori, é conhecida, pois entendemos que temos conhecimento sobre a banda eletrônica, *i.e.*, conhecemos a relação de dispersão $E(p)$.

¹ A energia de Fermi de um material é a probabilidade de 0,5 da energia do estado quântico de estar ocupado por um elétron.

Em física quântica existem apenas dois tipos de probabilidades de ocupação, uma que vale para *férmions* e outra que vale para *bósons*. Como o elétron é um *férmion*, então ele obedece a chamada estatística de Fermi-Dirac², que fornece $P(E)$, dada por

$$P(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/(k_B T)} + 1}. \quad (1.1)$$

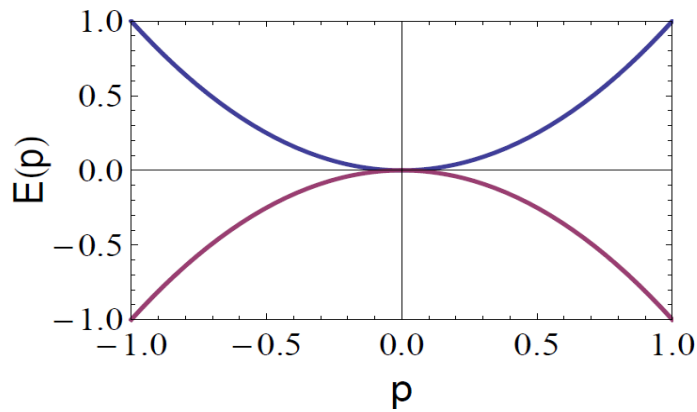
Sendo que k_B é a conhecida constante de Boltzmann e T é a temperatura do sistema. A primeira característica dessa equação é que a ocupação não depende da energia E , mas sim da diferença de energia ($E - E_F$). Como consequência, para $E = E_F$ temos que $P(E) = 1/2 = 50\%$ para qualquer temperatura diferente de zero. Isso mostra que existem muitos estados ocupados nessa região. Um caso interessante ocorre para $T = 0$, essa situação, para $E > E_F$ temos que $P(E) = 0$ e, por outro lado, para $E < E_F$ temos que $P(E) = 1$. Portanto, todos os estados abaixo da energia de Fermi estão ocupados (HALLIDAY *et al.*, 2009).

Os metais em temperatura ambiente são perfeitamente descritos pelo caso em que $T = 0$. Para entender essa aproximação, devemos lembrar que a energia de Fermi do cobre é 7,0 eV. Usando $E_F = k_B T_F$, como $k_B = 10^{-4} \text{eV/K}$, encontramos a temperatura de Fermi do cobre, dada por $T_F = 7 \cdot 10^4 \text{K}$. Aplicações experimentais, envolvendo condutividade elétrica dos metais, são realizadas normalmente em temperatura ambiente $T = 300 \text{K}$, que representa uma pequena fração da temperatura de Fermi. Portanto, seja $F(T, T_F)$ uma função tanto da temperatura de Fermi quanto da temperatura do sistema. Essa função pode representar qualquer quantidade física do cobre, como por exemplo sua condutividade elétrica. Fazendo-se uma aplicação a expansão de Taylor para $T < T_F$, temos $F(T, T_F) = F(T = 0, T_F) + A(T/T_F) + \dots$, sendo A uma constante conhecida. Como $T/T_F \ll 1$, temos que $F(T, T_F) \approx F(T = 0, T_F)$. Dessa forma, em nossas próximas interpretações consideraremos sempre o caso de um metal em temperatura zero. Para fazermos uma análise qualitativa da condutividade em um metal, vamos considerar uma simples generalização do caso não-relativístico que vimos anteriormente. Nesse caso, a relação de dispersão dos elétrons é $E(p) = \pm p^2/2m$. Note que apenas incluímos a possibilidade de termos elétrons com energia negativa. De fato, na teoria quântica com efeitos relativísticos, isso pode ser comprovado. Na figura 2, plotamos a relação de dispersão. Note que as bandas de energia positiva (também chamada de banda de condução) e a banda negativa (também chamada de banda de valência) se tocam no ponto $p = 0$. Por simplicidade, vamos assumir que $E_F = 0$. Dessa forma, todos os estados da banda de valência estão preenchidos. Quando

² A estatística de Fermi-Dirac estabelece o comportamento de sistemas formados por um grande número de elétrons, especialmente em corpos sólidos.

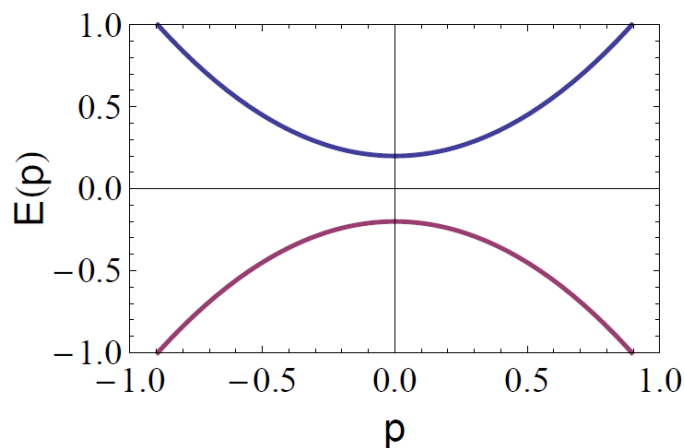
aplicamos uma diferença de potencial elétrico V (dado em Volts) no material, os elétrons vão receber uma quantidade de energia eV , sendo e a carga elétrica fundamental. Como não existe nenhum “obstáculo”, os elétrons poderão seguir livremente da banda de baixo para a banda de cima, caracterizando o processo de condução elétrica. No caso de isolantes, como ilustrado na figura 3, existe uma separação em forma de um *gap* de energia entre essas bandas. Por isso, apesar da aplicação do potencial elétrico, não ocorre condução de elétrons. Semicondutores são um caso particular no qual esse *gap* de energia é um valor muito pequeno. Dessa forma, com o uso de algumas impurezas (ou dopantes) é possível realizar a condução de elétrons.

Figura 2: Exemplo de relação de dispersão para um metal. Usamos $2m = 1$. Observe que no ponto $p = 0$ as duas curvas se tocam. Consideramos, por simplicidade, que a energia de Fermi está em cima da origem.



Fonte: José do Nascimento Cardoso.

Figura 3: Exemplo de relação de dispersão para um isolante. Usamos $2m = 1$. Observe que no ponto $p=0$ as duas curvas não se tocam. Consideramos, por simplicidade, que a energia de Fermi está em cima da origem.



Fonte: José do Nascimento Cardoso.

4 INTEGRAÇÃO NO PLANO COMPLEXO

Nesta seção vamos apresentar e discutir duas possíveis ferramentas matemáticas muito importante para esse presente trabalho que são: *winding number* e teorema do resíduo; sempre procurando enfatizar sua importância para o estudo da topologia que vem crescendo.

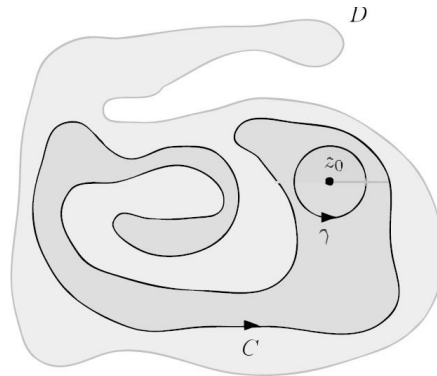
4.1 Winding number

Há alguns anos, três físicos Britânicos fizeram história para o mundo da física, pois descobriram um novo estado físico da matéria, chamado de estados topológicos da matéria, sendo o exemplo mais conhecido o Efeito Hall Quântico. Entretanto, a grande surpresa por trás de tudo isso, foi o fato de que eles conseguiram descrever fenômenos físicos através de cálculos de matemática, comum na área de topologia, dentre os quais destaca-se o cálculo do *winding number* que será o foco do nosso estudo.

O *winding number*, também conhecido como número de preenchimento, é um invariante topológico típico de sistemas físicos em $(1+1)$ D, ou seja, sistema que apresentam duas dimensões, sendo uma espacial e outra temporal. Se considerarmos uma molécula de Poliacetileno (polímero) que apresenta uma cadeia linear de átomos de carbono unidos por ligações químicas, temos um exemplo de sistema físico em $(1+1)$ D, pois a dimensão da distância vai se estabelecer ao longo da cadeia de carbono, bem como sua variação de tempo. Essa descoberta que atualmente conhecemos como estados topológicos da matéria, rendeu o Prêmio Nobel para os físicos David James Thouless da universidade de Washington, Frederick Duncan Michael Haldane da universidade de Princeton e John Michael Kosterlitz da universidade Brown no ano de 2016, os quais utilizaram conceitos e técnicas da topologia para a descobertas relacionados com transições de fases topológicas (COMMISSARIAT, 2016).

O *winding number* é entendido como sendo o número de voltas ao redor de um dado ponto. Este é simbolizado pela sigla w que representa a volta realizada pela curva C ao redor de um ponto Z_0 qualquer.

Figura 4: Ilustra as três possíveis curvas englobando o ponto z_0 .



Fonte: Dr. Leandro O. do Nascimento

Como w é independente da curva C em volta do ponto Z_0 , logo w será igual a 1. Por conta disso todas as curvas C , D e γ vão apresentar o mesmo *winding number*, ou seja, todas elas completam uma única volta em torno do ponto Z_0 . Sendo que γ é um círculo ao redor do ponto Z_0 , C e D são curvas complexas que também completam uma volta ao redor do ponto Z_0 . Note que todas essas três curvas, embora diferentes, apresentam o mesmo *winding number* igual a 1, por conta disso, dizemos que todas tem a mesma topologia. Se uma das curvas não engloba o ponto Z_0 , então essa curva possui *winding number* igual a 0, por não realizar nenhuma volta em torno do ponto estabelecido Z_0 de acordo com a definição inicial, quando isso acontece dizemos que a curva representa um isolante trivial. Essas afirmações poderão ser comprovadas no próximo capítulo no qual estudaremos um exemplo concreto.

Por enquanto, necessitamos de uma expressão matemática que forneça o w de uma dada curva. Se considerarmos a curva γ para calcular w , sendo γ um círculo, uma curva mais simples, então ao traçar dois eixos sendo um horizontal e o outro vertical ao redor do ponto Z_0 estabelecido acima, teremos um sistema de coordenadas cartesianas, no qual $Z_0 = 0$ é a origem. Por simplicidade, vamos definir a curva γ sendo um círculo unitário, logo chegamos em uma situação análoga a de um ciclo trigonométrico para o ângulo θ formado entre o vetor que sai do ponto Z_0 até o círculo e o eixo horizontal. Se $\theta = 0$, fazendo uma volta completa em torno do ponto Z_0 no sentido anti-horário, então chegaremos no ponto $\theta = 2\pi$, logo $\Delta\theta = 2\pi$ que é a variação do ângulo θ no sentido anti-horário. Podemos de imediato deduzir que $w = 1$ pelo simples fato de completar uma única volta em torno do ponto Z_0 , então a única possibilidade é de $w = \Delta\theta/2\pi$. Generalizando essa equação para uma representação integral obtemos:

$$w = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} d\theta = \frac{2\pi - 0}{2\pi}. \quad (2.1)$$

De acordo com o número de voltas que se completam em torno do ponto Z_0 , o ângulo final obtido seria $\theta = 2\pi n$, sendo (n) um número inteiro. Quando essas curvas são realizadas no sentido anti-horário especificamos ela com o sinal de +, e no sentido horário com o sinal de -.

Dessa forma obtemos a seguinte equação

$$w = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma} d\theta = \frac{\pm 2\pi n - 0}{2\pi} = \pm n. \quad (2.2)$$

Portanto, conseguimos definir o *winding number* de uma forma mais geral. Entretanto, queremos calcular ele de diversas maneiras, uma delas seria através de números complexos (z).

Nesse caso, podemos escrever

$$w = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{dz}{z}. \quad (2.3)$$

Se γ for um círculo, então $z = Re^{i\theta}$, sendo R constante e igual a 1. Além disso, $dz = e^{i\theta} id\theta$ e $dz/z = id\theta$. Substituindo isso na eq. (2.3) fica claro que reobtemos a eq. (2.1). Por conta disso, podemos afirmar que a definição de w , através de números complexos, está correta, mas não está totalmente clara, pois ainda não esclarecemos como ela inclui outros tipos de curvas.

Podemos generalizar a definição do *winding number* na Eq. (2.3) para considerar outros tipos de curva, em particular, alguma que possua significado físico. Para isso, basta supor que z é uma função de algum parâmetro k . Em aplicações na física do estado sólido, esse parâmetro k é o momento linear dos elétrons na primeira zona de Brillouin, ou seja, é um intervalo de integração que vai de $-\pi/a$ a $+\pi/a$, sendo “ a ” o parâmetro da rede, cujo valor normalmente é da ordem de um Angstrom. Dessa forma, temos que $z = z(k)$, cuja derivada com relação ao momento é representada por $dz/dk \equiv \partial_k z(k)$. Portanto, usando isso na Eq. (2.3), obtemos que o *winding number* é

$$w = \frac{1}{2\pi i} \oint_{BZ} dk z^{-1}(k) \partial_k z(k). \quad (2.4)$$

Note que a integral é agora calculada sobre a primeira zona de Brillouin (BZ). No próximo capítulo estudaremos o modelo SSH, o qual representa uma cadeia de átomos unidimensionais. Curiosamente, sabendo que w nada mais é do que um número inteiro, então qual seria a utilidade de calcular essa quantidade novamente? Ocorre que a função $z(k)$ naturalmente depende de alguns parâmetros que vêm do modelo da rede.

Podemos escrever então $z = z(k, \{p\})$, sendo $\{p\}$ algum conjunto de parâmetros. Portanto, após a integração em k , concluímos que $w = w(\{p\})$ é também uma função desses parâmetros. Os valores de $\{p\}$ que modificam w são responsáveis por determinar em qual fase o sistema tem topologia não trivial, sendo este o principal objetivo de calcular a Eq. (2.3), ou seja, determinar quais valores $\{p\}$ fornecem w diferente de zero. Vale ressaltar que os diferentes valores de $\{p\}$ representam as diferentes curvas que discutido anteriormente.

4.2 Teorema do resíduo

Neste tópico, será analisado e descrito o Teorema do Resíduo, que é uma ferramenta matemática muito poderosa e importante para este presente trabalho. Deduziremos ela com muita calma e utilizá-la em algumas aplicações.

Considerando que uma função $f(z)$ é analítica em um domínio D , onde não possui descontinuidade, por conta disso, a função $f(z)$ vai admitir uma serie de Laurent nas vizinhanças do ponto Z_0 dada por

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n(z - z_0)^n. \quad (2.5)$$

Precisamos calcular a integral fechada I no plano complexo, dada por

$$I = \oint_C f(z) dz. \quad (2.6)$$

Repare que, a curva C deve levar em consideração o ponto Z_0 , porque a série de Laurent atua nas vizinhanças de Z_0 . Usando a Eq. (2.5) na Eq. (2.6), tem-se:

$$I = \oint_C f(z) dz = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \oint_C a_n(z - z_0)^n dz. \quad (2.7)$$

Escolhendo C como um círculo ao redor do ponto Z_0 , temos

$$z - z_0 = e^{i\theta} \Rightarrow dz = e^{i\theta} i d\theta. \quad (2.8)$$

Utilizando a Eq. (2.8) na Eq. (2.7), tem-se:

$$I = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \oint_{\theta} a_n e^{i\theta n} e^{i\theta} i d\theta = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i a_n \int_0^{2\pi} e^{i\theta(n+1)} d\theta = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i a_n I_n, \quad (2.9)$$

Onde

$$I_n = \int_0^{2\pi} e^{i\theta(n+1)} d\theta \quad (2.10)$$

Sendo que K representa a quantidade de voltas ao redor do ponto Z_0 . Entretanto, nosso foco é calcular a integral na Eq. (2.10) onde ela depende de n . Repare que para $n = -1$, temos que $I_1 = 2\pi k$. E para $n \neq -1$, temos $I_n = 0$. Realizando uma volta no sentido anti-horário ao redor do ponto Z_0 , obtemos $k = 1$, com isso, tem-se:

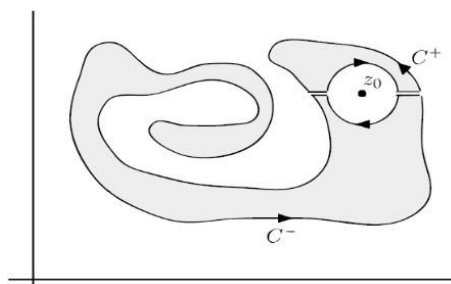
$$I = \oint_C f(z)dz = 2\pi i a_{-1}.$$

A Eq. acima é conhecida como teorema do resíduo, porque o coeficiente a_{-1} da série de Laurent é chamado de resíduo. Esse termo pode ser representado como $a_{-1} \equiv \text{Res} \{f(z), z_0\}$, onde o ponto z_0 é chamado de pólo de $f(z)$. Repare que a integral I depende diretamente de um único coeficiente que é o a_{-1} e de certa forma, precisamos saber calcular esse coeficiente. Se por acaso C não percorrer o ponto z_0 , com isso, temos que $I = 0$, logo o resíduo vai ser zero. Portanto, para uma função $f(z)$ analítica, tem-se:

$$I = \oint_C f(z)dz = 0,$$

Além disso, precisamos provar que independente da curva C a Eq. (2.11) ainda pode ser válida, lembrando que assumimos que a curva C é um círculo, então isso não é geral. Por causa disso, vamos recorrer ao recurso gráfico. A Fig. (5) apresenta as curvas C_+ e C_- da função analítica $f(z)$ no plano complexo, onde ambas apresentam o valor igual a zero,

Figura 5: Representação de curvas no plano complexo.



Fonte: Dr. Leandro O. do Nascimento

$$\oint_{C_+} f(z)dz = 0$$

E

$$\oint_{C_-} f(z)dz = 0,$$

Pois elas passam perto mas não englobam o ponto z_0 . Mas por outro lado, apresenta uma curva γ que é o círculo envolta do ponto z_0 que satisfaz,

$$\oint_{\gamma} f(z)dz = 2\pi ia_{-1}, \quad (2.15)$$

Que está de acordo com a Eq. (2.11). Imaginando agora uma curva C , que é formada pela união de γ , C_+ e C_- , ou seja, $C = \gamma + C_+ + C_-$. Logo,

$$\oint_C f(z)dz = \oint_{\gamma} f(z)dz + \oint_{C_+} f(z)dz + \oint_{C_-} f(z)dz,$$

Utilizando a Eq. (2.13) e Eq. (2.14), tem-se,

$$\oint_C f(z)dz = \oint_{\gamma} f(z)dz = 2\pi ia_{-1},$$

Repare que C que não é um círculo, também satisfaz o teorema do resíduo. Por outro lado, C pode ser qualquer curva que engloba o pólo z_0 .

Agora que sabemos um pouco sobre o teorema do resíduo, que por sua vez, é um poderoso método para calcular integrais. O importante agora é aprender como encontrar o resíduo a_{-1} de uma função $f(z)$ qualquer.

4.3 Aplicação ao cálculo de integrais reais

Nesta seção vamos exemplificar e colocar em práticas os conhecimentos da ferramenta matemática mencionadas no capítulo anterior, para resolver alguns exemplos.

Mas de início vamos provar a seguinte igualdade com base na Eq. (2.18).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+x^2} dx = \pi$$

O primeiro passo para resolver esse problema é fazer uma extensão analítica do plano real para o plano complexo. Por simplicidade, podemos escrever a variável $x \rightarrow z$, ou seja, saímos da variável real para a variável complexa. Com isso, podemos escrever a função analítica $f(z)$, dada por

$$f(z) = \frac{1}{1+z^2}.$$

Se igualarmos o denominador da função $f(z)$ a zero, obtemos $1 + z^2 = 0$, logo os polos simples estão em $z = \pm i$ (no eixo imaginário de z). Com base nisso, e nós conhecimentos do teorema do resíduo, tem-se:

$$\oint_C f(z)dz = 2\pi ia_{-1}.$$

Portanto,

$$\oint_C f(z)dz = \int_{-R}^{+R} \frac{1}{1+x^2}dx + \int_{C_+} \frac{1}{1+z^2}dz = 2\pi ia_{-1}. \quad (2.21)$$

Sendo que C_+ é um semi - círculo de raio R no plano superior de z (onde $\text{Im}z > 0$).

Com isso,

$$\oint_C f(z)dz = \int_{-R}^{+R} \frac{1}{1+x^2}dx + \int_0^\pi \frac{Re^{i\theta}id\theta}{1+R^2e^{2i\theta}} = 2\pi ia_{-1}. \quad (2.22)$$

Calculando o limite de $R \rightarrow \infty$ da Eq. (2.22). Isso nos leva a integral da curva C_+ que vai a zero, levando ao seguinte ponto

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+x^2}dx = 2\pi ia_{-1}, \quad (2.23)$$

Repare que a_{-1} é o resíduo $z = i$, ou seja, é o único que está sendo contornado pela curva C . Portanto,

$$a_{-1} = \text{Res}\{f(z), i\} = \lim_{z \rightarrow i} (z - i) \frac{1}{(z - i)(z + i)} = \frac{1}{2i}. \quad (2.24)$$

Utilizando isso, podemos chegar à seguinte conclusão

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+x^2}dx = 2\pi i \frac{1}{2i} = \pi, \quad (2.25)$$

O resultado proposto na Equação (2.25) foi de encontro ao da equação (2.18) mencionada no início do capítulo.

Dando continuidade, utilizaremos agora o mesmo princípio descrito acima, para resolver o próximo exemplo que tem como base a seguinte equação

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos x}{1+x^2}dx = \frac{\pi}{e}$$

Para começar, precisamos definimos a função $f(z)$, tal que

$$f(z) = \frac{e^{iz}}{1 + z^2}.$$

Repare que

$$\frac{\cos x}{1 + x^2} = \operatorname{Re} \left\{ \lim_{z \rightarrow x} \frac{e^{iz}}{1 + z^2} \right\}.$$

Os polos de $f(z)$ são $z = \pm i$. De acordo com o exemplo anterior, precisamos escolher um contorno conveniente, que faça com que no limite $R \rightarrow \infty$, a integral da curva C_R vai a zero. Se você for reparar, isso depende diretamente do comportamento do numerador $f(z)$, ou seja, a exponencial e^{iz} . Fazendo $z = x + iy$, portanto $e^{iz} = e^{ix-y}$. Resolvendo o módulo quadrático desse termo, obtemos $|e^{iz}| = e^{-y}$. Para que esse termo possa ir a zero, o $\operatorname{Im} z > 0$, portanto, $y \rightarrow \infty$. O único polo que satisfaz isso é $z = i$. O resíduo nesse ponto é

$$a_{-1} = \operatorname{Res}\{f(z), i\} = \lim_{z \rightarrow i} (z - i) \frac{e^{iz}}{(z - i)(z + i)} = \frac{e^{-1}}{2i}.$$

Com isso,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos x dx}{1 + x^2} = \operatorname{Re} \left\{ \lim_{z \rightarrow x} \oint \frac{e^{iz} dz}{1 + z^2} \right\} = 2\pi i \frac{e^{-1}}{2i} = \frac{\pi}{e}.$$

O resultado obtido na Eq. (2.30) foi de encontro ao resultado esperado da Eq. (2.26). Assim como na primeira quanto na segunda aplicação, os resultados obtidos estavam de acordo com o esperado, enfatizando a eficácia de se utilizar essa ferramenta matemática nesses cálculos.

5 POLIACETILENO

Nesta seção, vamos discutir e utilizar o modelo Su-Schrieffer-Hegger (SSH) na rede, o qual também pode ser aplicado para descrever o Poliacetileno (Polímero Orgânico). Polímeros por sua vez, são materiais orgânicos, ou seja, são constituídos de carbono e hidrogênio, dessa maneira, são conhecidos como excelentes isolantes térmicos e elétricos. Entretanto, uma nova series de polímeros orgânicos estão sendo desenvolvidos para que possa conduzir corrente elétrica com muito mais eficácia, estes são denominados polímeros condutores.

O poliacetileno é um isolante natural, apresenta em sua conformação repetidas unidades de carbono e hidrogênio. Quando está no estado de vácuo, ou seja, quando a temperatura é igual a zero, ele é duplamente degenerado, se apresentando em duas fases, sendo que apenas uma delas possui topologia não trivial, ou seja, possui *winding number* diferente de zero. Os benefícios para o ramo da tecnologia são diversos com as aplicações de isolantes topológicos, e condutores quando topados com materiais oxidantes ou redutores.

O dopamento para polímeros condutores seria uma substância, inseridas em pequenas quantidades no material, no caso o polímero, alterando drasticamente as propriedades eletrônicas, óticas, magnéticas ou estruturais do polímero, acompanhadas por um grande aumento na condutividade elétrica. Entretanto o foco do nosso trabalho vai ser voltado para a verificação de topologia nessas fases quando ele é duplamente degenerado, para isso, vamos necessitar do uso do modelo SSH.

5.1 O modelo SSH

O Hamiltoniano do modelo Su-Schrieffer-Hegger (SSH) é dado pela Eq. (3.1):

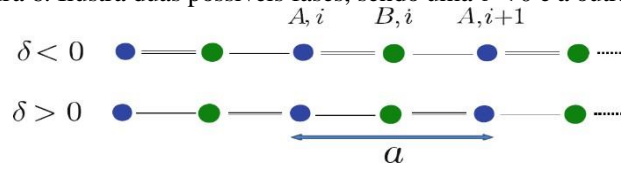
$$H = - \sum_{n=1}^N (t + \delta) [(c_{An}^\dagger c_{Bn} + h.c) + (t - \delta) (c_{A_{n+1}}^\dagger c_{Bn} + h.c)],$$

Sendo que, $t + \delta$ e $t - \delta$ são os parâmetro de salto maior e menor respectivamente e $n_{in} = c^\dagger c$ é o operador número de partícula, (A e B) são as duas subredes.

in in

Quando δ é positivo e passa a ser negativo, dizemos que ocorreu uma mudança de fase, ou seja se o parâmetro maior se transformou no parâmetro menor.

Figura 6: Ilustra duas possíveis fases, sendo uma $\delta < 0$ e a outra $\delta > 0$.



Fonte: <https://arxiv.org/abs/1701.08416v1>.

Essas duas fases têm diferentes topologias, e isso se deve as condições de contorno aberta, logo vão possuir diferentes invariantes topológicos.

Vamos provar essa seguinte afirmação com base na fase de Barry. Quando se trata de um sistema unidimensional, como no caso do poliacetileno, essa fase de Barry vai ser o próprio *winding number* discutido na seção 4.1.

O *winding number* para o modelo unidimensional é dado por

$$\nu_{SSH} = -\frac{i}{2\pi} \int_{B.Z} dk \hat{d}^{-1}(k) \partial_k \hat{d}(k), \quad (3.2)$$

A integral na Eq. (3.2) é calculada na zona de Brillouin $k \in [-\pi, +\pi]$, o *winding number* é:

$$\nu_{SSH} = -\frac{i}{2\pi} \int_{B.Z} dk d^{-1}(k) \partial_k d(k). \quad (3.3)$$

Depois de algumas simplificações temos

$$\nu_{SSH} = -\frac{i}{2\pi} \int_{B.Z} dk \mathcal{K}(k, t, \delta) \quad (3.4)$$

Sendo

$$\mathcal{K} = i \frac{(t - \delta)^2 + (t^2 - \delta^2) \cos k}{[t + \delta + (t - \delta) \cos k]^2 + (t - \delta)^2 \sin^2 k}. \quad (3.5)$$

Agora basta apenas integrar k na Eq. (3.4) para $t > 0$ e vamos obter

$$\nu_{SSH} = \frac{1}{2} (1 - \text{sgn} \delta). \quad (3.6)$$

Sendo que o $\text{sgn} \delta = +1$, para $\delta > 0$ e -1 , para $\delta < 0$. Com isso, os valores do *winding number* são:

$$V_{SSH} = \frac{1}{2} (1 - 1) = 0 \quad (3.7)$$

E

$$V_{SSH} = \frac{1}{2} (1 - (-1)) = 1 \quad (3.8)$$

Ou seja,

$$\nu_{\text{SSH}} = \begin{cases} 1, & \delta < 0, \\ 0, & \delta > 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

A Eq. (3.9) representa o $w = 1$ apenas quando $\delta < 0$, o que representa uma das possíveis fases do sistema onde possui topologia (NASCIMENTO, 2017).

Agora vamos exemplificar o *winding number* para qualquer tipo de sistema unidimensional. A equação desse sistema é dado abaixo

$$w = \frac{-i}{2\pi} \oint_{BZ} z_{(k)}^{-1} \frac{dz_{(k)}}{dk} dk$$

Reescrevendo a equação acima, temos

$$w = \frac{-i}{2\pi} \oint \frac{d}{dk} \ln z(k) dk$$

Só que a integral é calculada na zona de Brillouin, portanto

$$w = -\frac{i}{2\pi} \ln z(k) \Big|_{k=-\pi/a}^{k=+\pi/a}$$

Reescrevendo a Eq. (3.12) tem-se:

$$w = -\frac{i}{2\pi} \ln \left[\frac{z(k = +\pi/a)}{z(k = -\pi/a)} \right]$$

Por simplicidade, vamos adotar o w sendo um número real e inteiro, logo $w = \pm n$, e fazendo

$$x = \ln \left[\frac{z(k = +\pi/a)}{z(k = -\pi/a)} \right]$$

Tem-se:

$$\pm n = \frac{-i}{2\pi} = x$$

Existem duas possibilidades de se resolver esse problema, primeiro quando $n = 0$, e a segunda quando $n \neq 0$. Para $n = 0$, temos que $x = 0$, portanto

$$x = \ln \left[\frac{z(k = +\pi/a)}{z(k = -\pi/a)} \right] = 0$$

Logo

$$z(k = +\pi/a) = z(k = -\pi/a)$$

A segunda possibilidade é quando $n \neq 0$

$$\pm n = \frac{-i}{2\pi} x$$

Organizando, temos

$$x = \frac{\pm 2\pi \cdot n}{i}$$

Logo

$$x = \ln \left[\frac{z(k = +\pi/a)}{z(k = -\pi/a)} \right] = \pm \frac{2\pi n}{i} \quad (3.20)$$

Reescrevendo $\pm 2\pi n/i$ em termo de exponencial e multiplicado por 1/1, temos (3.21)

$$e^{\pm 2\pi ni}$$

Portanto

$$e^{\pm 2\pi ni} = \frac{z(k = +\pi/a)}{z(k = -\pi/a)} \quad (3.22)$$

Por fim, temos

$$z(k = +\pi/a) = e^{\pm 2\pi ni} z(k = -\pi/a) \quad (3.23)$$

No primeiro caso obtivemos resultado para um isolante e no segundo caso, para um sistema topológico.

6 CONCLUSÃO

Este trabalho é resultado de uma revisão bibliográfica na qual abordamos os conceitos básicos da teoria de isolantes topológicos junto com alguns artifícios matemáticos. De uma forma geral, revisamos o teorema do resíduo, relacionado com os estados topológicos da matéria. Além disso, destacamos os principais cientistas envolvidos na busca desses novos fenômenos que podem ser muito úteis para o campo da ciência e tecnologia, como por exemplo, na obtenção de computadores quânticos.

Quero ressaltar a importância de se fazer pesquisas nessa área nos dias atuais, mesmo com todas as dificuldades que os pesquisadores enfrentam atualmente, sendo que essa área é muito recente e promissora, o que me motivou a estudar esse campo de conhecimento. Entretanto, deveríamos investir mais nesse campo de estudo, pois no futuro ele vai trazer grandes benefícios. Por esse motivo, este presente trabalho deve ser compreendido como ponto de partida para novas pesquisas relacionadas aos estados topológicos da matéria.

REFERÊNCIAS

- COMMISSARIAT, T. **David Thouless, Duncan Haldane and Michael Kosterlitz win Nobel Prize for Physics**. 2016. Disponível em: <<http://physicsworld.com/cws/article/news/2016/oct/04/2016-nobel-prize-forphysics>>. Acesso em: 21 de jan. 2019
- HALLIDAY, D.; RESNICK, R. & WALKER, J. **Fundamentos de Física vol. 4: Ótica e Física Moderna**, 9ª ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2009.
- HEWITT, P. G. **Física Conceitual**. Porto Alegre: Bookman, 2002. 215-216 p.
- HEWITT, P. G. **Fundamentos de Física Conceitual**. Porto Alegre: Bookman, 2009. Disponível em: <<http://www.saense.com.br/2016/10/e-o-nobel-vai-para-topologia-quantica/#more-3866>>. Acesso em: 20 de ago. 2018.
- ABDO, Humberto. Conheça os vencedores do nobel de física de 2016. **Revista Galileu**, out., 2016. Disponível em: <<https://revistagalileu.globo.com/Ciencia/noticia/2016/10/conheca-os-vencedores-do-nobel-de-fisica-de-2016.html>> Acesso em: 20 de ago. 2018.
- KATO, Y. K.; MYERS, R. C.; GOSSARD, A. C. & AWSCHALOM, D. D. Observation of the spin Hall effect in semiconductors, **Science**, 306, 2014. 5703.
- MELO, Thiago Martins. **Estudo sobre a eletrodinâmica de isolantes Topológicos e de metamateriais**. Orientador: Winder Alexander de Moura Melo. 2016. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal de Viçosa, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, 2016.
- NASCIMENTO, L. O. Introduction to Topological Phases and Electronic Interactions in (2+1) Dimensions, **Braz. J. Phys.**, v. 48, p. 1-16, 2017.
- ORTMANN, F. S.; ROCHE, S. O.; VALENZUELA, L. W. & MOLENKAMP, A. K. Geim. Topological Insulators: Fundamentals and Perspectives, **Stephan Roche**, First Edition. 2015.
- SERWAY, R. A. & JEWETT, J. W. J. **Princípio de Física vol. 3: Eletromagnetismo**. São Paulo: Cengage Learning, 2013. 679 p.
- SU, W. P.; SCHRIEFFER, J. R. & HEEGER, A. J. Solitons in Polyacetylene, **Phys. Rev. Lett.**, 42, 1979.
- SCHMIDT, T. M.; MIWA, R. H. & FAZZIO, A. Ultrafast spin-polarization control of Dirac fermions in topological insulators, **Physical Review**, B 93, 155426. 2016.
- THOULES, D. J. Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics, **World Scientific**, 1998.
- WEN, X. G. **Quantum Field Theory of Many-Body Systems: from the origin of sound to an origin of light and electrons**, New York: Oxford University Press, 2014



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DO MARAJÓ - BREVES
FACULDADE DE CIÊNCIAS NATURAIS

**ATA DE DEFESA PÚBLICA DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO DO
CURSO DE LICENCIATURA EM CIÊNCIAS NATURAIS**

Ao vigésimo oitavo dia do mês de fevereiro do ano de dois mil e dezenove, às 11:00 horas no Campus Universitário do Marajó-Breves, reuniu-se a banca examinadora composta por: Prof. Dr. Leandro Oliveira do Nascimento (presidente/orientador), Prof. Dr. Manolo Cleiton Costa de Freitas (UFPA-Breves) e Prof. Esp. Edielson dos Santos Barbosa, para de acordo com o Regimento Geral da Universidade Federal do Pará, proceder a avaliação da Monografia, intitulada “**INTRODUÇÃO AO CÁLCULO DE INVARIANTES TOPOLÓGICOS**”, do(a) discente **José do Nascimento Cardoso**, matrícula **201514140037**. Após a apresentação e arguição, a banca reuniu-se em separado para avaliação. A Banca ora constituída considerou:

APROVADO

atribuindo a este trabalho o conceito EXCELENTE.

E, para constar, lavrou-se esta ata que foi lida e assinada por todos os membros da banca examinadora.

Breves (PA), 28 de FEVEREIRO de 2019.

Leandro Oliveira do Nascimento

Prof. Dr. Leandro Oliveira do Nascimento
(Presidente/Orientador)

UFPA/Campus do Marajó – Breves

Manolo Cleiton Costa de Freitas

Prof. Dr. Manolo Cleiton Costa de Freitas
(Membro Examinador)

UFPA/Campus do Marajó – Breves

Edielson dos Santos Barbosa

Prof. Esp. Edielson dos Santos Barbosa
(Membro Examinador)