



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

LAURA ELAIDY DA SILVA MACHADO

ASPECTOS DO ACOPLAMENTO TIPO EXCÍTON DE MAJORANA
UNIDIMENSIONAIS

FORTALEZA

2024

LAURA ELAIDY DA SILVA MACHADO

ASPECTOS DO ACOPLAMENTO TIPO EXCÍTON DE MAJORANA UNIDIMENSIONAIS

Dissertação apresentada ao Curso de do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida.

FORTALEZA

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

M132a Machado, Laura Elaidy da Silva.

Aspectos do Acoplamento Tipo Excíton de Majorana Unidimensionais / Laura Elaidy da Silva Machado. – 2024.

94 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2024.

Orientação: Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida.

1. Férmions de Majorana. 2. Acoplamento tipo excíton. 3. Massa dependente da posição.
4. Mecânica Quântica Relativística. I. Título.

CDD 530

LAURA ELAIDY DA SILVA MACHADO

ASPECTOS DO ACOPLAMENTO TIPO EXCÍTON DE MAJORANA UNIDIMENSIONAIS

Dissertação apresentada ao Curso de do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em: 26/07/2024.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Paulo de Tarso Cavalcante Freire
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Ramon Sampaio Ferreira
Universidade Federal do Piauí (UFPI)

Prof. Dr. Francisco Cleiton Estevão Lima
Universidade Federal do Maranhão (UFMA)

À minha irmã.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar minha gratidão a todos aqueles que estiveram presentes em minha vida neste ano, contribuindo de forma direta ou indireta para a realização deste trabalho.

Primeiramente agradeço à minha mãe, Lucineide, por me incentivar diariamente mesmo estando distante de mim. A determinação e a força que existem em mim são uma das coisas mais valiosas herdadas de ti. Sua preocupação, carinho e admiração são meus motivadores diários;

À minha irmã Lídia, por acreditar em mim até quando eu mesma não acredito. Muito do que sou hoje veio de ti e sua relevância na minha vida é incomensurável;

À minha família em sua totalidade, e pessoas com quem construí laços tão importantes, em especial Adriel, Adriana e João Emmanuel;

A Ariel e Gustavo, amigos conhecidos ainda na escola, com quem eu sempre posso conversar, apesar da distância;

Ao meu orientador, Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida, pelo trabalho que se estende desde a graduação até o presente momento, pelas discussões, diálogos e toda a ajuda que recebi ao longo destes anos;

Agradeço também a Cleiton Estevão, colega de grupo e professor, por me ajudar em inúmeros aspectos neste trabalho, pelas dúvidas tiradas, dicas e conselhos dados, além da paciência e compreensão;

Aos meus amigos, em especial Brício e Cleber, pelo companheirismo de todos os dias, pelas inúmeras conversas acompanhadas de café (ou cerveja), por me ajudarem em tantos sentidos, pela paciência e por todo o apoio. E também ao Vasco, ao Wallace, ao João, à Sarah, Júnior e Ivo;

À minha amiga Roberta Dárlla, pessoa maravilhosa que tive a sorte de conhecer no ano final do mestrado e que me ofereceu uma amizade genuína, repleta de incentivo e admiração mútuas;

Aos membros da banca, pela disponibilidade de avaliar este trabalho;

À coordenação da Pós-Graduação em Física, na pessoa do coordenador Prof. Dr. Carlos William de Araújo Paschoal, por toda infraestrutura fornecida;

À Funcap - Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico pelo apoio financeiro.

"O caos é uma ordem por decifrar."
(José Saramago)

RESUMO

Esta dissertação dedicou-se ao estudo de um sistema fermiônico tipo majorana unidimensional no regime de massa dependente da posição e sujeito a condições de energia de uma cadeia linear de partículas. O intuito dessa análise é verificar como o tratamento de partículas relativísticas usando aproximações usuais de semicondutores como a teoria de massa efetiva e o modelo *tight-binding* afeta o espectro energético e as propriedades termodinâmicas das mesmas. Para isso, foram revisados aspectos centrais da Mecânica Quântica Relativística, especialmente conceitos ligados a equação de Dirac, a representação de Majorana e suas aplicações no contexto da física do estado sólido. Posteriormente, discutiu-se a teoria de massa efetiva em heteroestruturas que foi combinada a descrição de excítons para formular uma equação geral para férmions de Majorana com interações excitônicas. Finalmente, foi demonstrada a presença de estados ligados e construído um ensemble canônico para análise estatística do sistema.

Palavras-chave: Férmions de Majorana; Excítons; Massa dependente da posição.

ABSTRACT

This master's thesis was dedicated to the study of a one-dimensional Majorana fermionic system in the position-dependent mass regime and subject to the energy conditions of a linear chain of particles. The purpose of this analysis is to investigate how the treatment of relativistic particles using common semiconductor approximations such, as effective mass theory and the tight-binding model affects the energy spectrum and thermodynamic properties of the system. To this end, central aspects of Relativistic Quantum Mechanics were reviewed, especially concepts related to the Dirac equation, the Majorana representation, and their applications in the context of solid state physics. Subsequently, the theory of effective mass in heterostructures was discussed, which was combined with the description of excitons to formulate a general equation for Majorana fermions with excitonic interactions. Finally, the presence of bound states was demonstrated and a canonical ensemble was constructed for the statistical analysis of the system.

Keywords: Majorana fermions; Excitons; Position-dependent mass.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Representação do mar de Dirac - Considerando que elétrons relativísticos poderiam emitir energia na forma de fótons continuamente e alcançar níveis de energia cada vez mais baixos, Dirac propôs que existe, abaixo do nível zero de energia, um "mar" de elétrons ocupando todos os estados negativos. Assim, a exclusão de Pauli garante que nenhum estado negativo adicional possa ser ocupado por elétrons de energia positiva. Se existir um estado negativo não ocupado no mar, esse buraco se comportaria como um elétron de carga positiva, ou um pósitron. 23
- Figura 2 – Ettore Majorana (1906 - ca. 1938): Reconhecido como um prodígio por seu mentor Enrico Fermi, Majorana foi autor de trabalhos promissores em sua breve e significativa carreira científica. Antes de desaparecer misteriosamente em 1938, ele publicou seu último artigo, "Teoria simmetrica del' eletrone e del positrone", no qual foram introduzidas as partículas de Majorana (Wilczek, 2009). 34
- Figura 3 – A quiralidade se associa ao *spin* S (em vermelho) de uma partícula. Se as partículas giram em sentido indicado pela mão direita, diz-se que ela tem helicidade positiva ou simplesmente destra, e se o giro ocorre de acordo com a mão esquerda, sua helicidade é negativa ou canhota. A quiralidade é determinada observando se a partícula se transforma numa representação de mão esquerda ou de mão direita. 42
- Figura 4 – Formação de Excítons em um semicondutor - Ao deixar a banda de valência, o elétron excitado liga-se à lacuna deixada por ele, criando um par de cargas opostas que se comporta como partícula. A energia de ligação é menor que a energia necessária para separar completamente o elétron da banda de condução e o buraco da banda de valência, "aprisionando" o par. 44
- Figura 5 – Bandas de energia para o Silício (Si) e o Arseneto de Gálio (GaAs), ambos materiais semicondutores - A relação de dispersão tem comportamento parabólico nas proximidades dos pontos extremos. 50
- Figura 6 – Representação de uma cadeia linear com um sítio por célula unitária. 71
- Figura 7 – Comportamento parabólico da dispersão de energia em função do vetor de onda k do espaço recíproco para diferentes valores do parâmetro γ 73

Figura 8 – Comportamento da razão entre a massa efetiva m^* e a massa do elétron em repouso m_e no espaço recíproco para valores distintos do parâmetro de salto γ e um espaçamento $a = 1\text{Å}$	74
Figura 9 – Comportamento da razão entre a massa efetiva m^* e a massa do elétron em repouso m_e no espaço das posições para valores distintos do parâmetro de salto γ e um espaçamento $a = 1\text{Å}$	74
Figura 10 – Potencial efetivo da equação 5.55 em termos da posição para valores distintos de γ	75
Figura 11 – Soluções numéricas das autofunções de onda dos três primeiros auto-estados obtidas pelo método dos elementos finitos. (a) Solução quando $\gamma = 0,45$. (b) Solução quando $\gamma = 0,55$. (c) Solução quando $\gamma = 0,65$. (a) Solução quando $\gamma = 0,75$	77
Figura 12 – Soluções numéricas da energia em termos do número quântico n para os 100 primeiros autoestados . (a) Solução quando $\gamma = 0,45$. (b) Soluções para $\gamma = 0,55$. (c) Soluções para $\gamma = 0,65$. (d) Soluções para $\gamma = 0,75$	78
Figura 13 – Propriedades termodinâmicas dos férmions de Majorana com massa efetiva do tipo excíton para valores distintos de γ . (a) Comportamento da energia livre Helmholtz sobre o número de partículas \mathcal{F}/N em função da temperatura T . (b) Energia interna U/N em função de T . (c) Entropia S/N em função de T . (d) Calor específico C_v/N em função de T	81

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	MECÂNICA QUÂNTICA RELATIVÍSTICA	15
2.1	A equação de Dirac	15
2.1.1	<i>Solução da equação de Dirac</i>	19
2.1.2	<i>Interpretação das soluções para a partícula livre</i>	22
2.2	Limite não-relativístico da equação de Dirac	23
2.3	Simetrias na equação de Dirac	27
3	A REPRESENTAÇÃO DE MAJORANA	34
3.1	A equação de Majorana em (1+1) dimensões	35
3.1.1	<i>Simetrias discretas na equação de Majorana (1+1)</i>	37
3.1.2	<i>A representação de Weyl</i>	38
3.2	Formalismo de operadores	40
3.3	Aplicações e perspectivas dos férmions de Majorana	41
4	SISTEMAS COM MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO	48
4.1	O tensor de massa efetiva	48
4.2	O teorema da massa efetiva	52
4.3	Massa dependente da posição em semicondutores de composição não-uniforme	55
4.4	Teorema de Bargmann e sistemas com MDP	57
4.5	Ordenamento de von Roos para aproximações MDP	59
5	A REPRESENTAÇÃO DE MAJORANA COM MDP	62
5.1	Equações relativísticas com MDP	62
5.2	Limite não-relativístico	64
5.3	O modelo <i>Tight-Binding</i>	66
5.3.1	<i>A combinação linear dos orbitais atômicos</i>	67
5.3.2	<i>A equação secular</i>	68
5.3.3	<i>Exemplo de uma cadeia linear</i>	70
5.4	Formalismo de excítons unidimensionais	71
6	RESULTADOS OBTIDOS	76
6.1	Soluções numéricas e energia	76

6.2	Propriedades Termodinâmicas	78
7	CONCLUSÃO	82
7.1	Perspectivas futuras	83
	REFERÊNCIAS	85

1 INTRODUÇÃO

Durante a década de 1920, o físico britânico Paul A. M. Dirac foi autor de contribuições fundamentais para a recém surgida teoria quântica (Atkins, 1991). Conhecido por seu brilhantismo e excentricidade, Dirac desenvolve em 1925 uma formulação mais profunda e geral da Mecânica Quântica, estabelecendo relações entre a Mecânica Matricial de Heisenberg e os parênteses de Poisson na Mecânica Clássica (Farmelo *et al.*, 2009). Sua contribuição mais notória, a formulação de uma equação relativística do elétron que levou seu nome, é o ponto de partida do presente trabalho.

Antes dos resultados de Dirac, outra equação relativística já havia sido proposta em 1926, a chamada equação de Klein-Gordon (Klein, 1926), (Gordon, 1926). Tal relação contém certas limitações (conforme veremos adiante), como a obtenção de probabilidades negativas, um fator que motivou a busca por uma relação alternativa (Greiner *et al.*, 2000). Os resultados insatisfatórios gerados por essa equação aliados a visão de Dirac sobre a beleza e simetria nas teorias físicas o guiaram a formulação de uma equação que descreve com êxito o comportamento dos elétrons, incorporando a propriedade de spin das partículas e prevendo a existência de estados de energia positiva e negativas para elétrons.

A discussão sobre a antimatéria surge a partir da interpretação dada por Dirac dos estados de energia negativos provenientes de sua equação. Ele notou que esses estados poderiam representar partículas com propriedades equivalentes as do elétron, porém com carga oposta. Posteriormente, essas partículas foram encontradas experimentalmente e nomeadas de anti-elétrons ou pósitrons. Alguns anos após a publicação da equação de Dirac, o físico italiano Ettore Majorana se dedicou a estudar a simetria entre partícula e anti-partícula, explorando soluções puramente reais da equação de Dirac. Ao considerar a possibilidade de uma partícula de spin $1/2$ ser sua própria antipartícula, Majorana desenvolveu uma equação que descreveria tais férmions.

Apesar da recepção fria na época de sua publicação, os resultados de Majorana atualmente tem repercussão em domínios da física que vão muito além das áreas de altas energias e mecânica quântica (Stanescu *et al.*, 2013; Lutchyn *et al.*, 2010; Wu *et al.*, 2013; Harle *et al.*, 2023). As potencialidades dessa espécie fermiônica hipotética foram exploradas nas últimas décadas em cenários diversos, como na cosmologia (Hojman *et al.*, 2015), na física de neutrinos (Agostini *et al.*, 2019), em computação quântica (Tutschku *et al.*, 2020), e na aplicação mais relevante para o contexto desta dissertação: os sistemas de estado sólido e matéria condensada. Nesta última, os férmions deixam seu caráter de partículas elementares e tornam-se excitações

ou quasipartículas, objetos ativos de estudo em materiais condutores (Lutchyn *et al.*, 2018a; Antipov *et al.*, 2018).

A estrutura eletrônica dos semicondutores é modelada através de abordagens diversas, como a teoria de bandas, a teoria do funcional de densidade ou modelos tipo *Tight-Binding* (TB) e massa efetiva. A compreensão do movimento dos portadores de carga nesse contexto usualmente requer o emprego da equação de Schrödinger combinada a teorias de perturbação ou aproximações que levam em conta propriedades da estrutura, como a sua periodicidade. Em vários casos, mais de uma abordagem é necessária para uma descrição mais completa da estrutura, o que nos leva a combinação dos métodos de massa efetiva e TB.

No caso da aproximação de massa efetiva, os elétrons ou buracos são tratados matematicamente como partículas livres que possuem uma massa distinta que depende de uma série de fatores, dentre os quais, a posição (Burt, 1992). O modelo TB por sua vez, considera que os elétrons estão fortemente localizados nos orbitais atômicos. Desse modo, a junção de ambas as técnicas permitem derivar, por exemplo, a energia de dispersão da estrutura de bandas de energia em torno de pontos de interesse (pontos de máximo ou mínimo) (Paxton *et al.*, 2009).

Neste trabalho, trataremos especificamente de Massas Dependentes da Posição (MDP), um tipo usual em semicondutores de composição química variável ou em heteroestruturas. Nesses materiais, o Hamiltoniano do sistema apresenta uma massa que varia em função de coordenadas espaciais (von Roos, 1983). A inclusão desses termos de massa, entretanto, altera a teoria trazendo problemas na definição do operador de energia cinética que discutiremos ao longo desta dissertação. Uma possibilidade de contornar essas dificuldades é partir de uma relação relativística em vez da equação de Schrödinger, o que nos leva a equação de Dirac e a representação de Majorana. Aqui chegamos ao cerne deste trabalho: a análise da dinâmica de férmions de Majorana com uma condição de Massa Dependente da Posição (MDP).

Aliado ao formalismo de MDP, utilizaremos o modelo TB aplicável em excítons, quasipartículas típicas de semicondutores, para determinar o perfil de energia e massa que será imposto ao sistema. Com esse intuito, esta dissertação está estruturada da seguinte forma: nos Capítulos 2 e 3 trataremos da descrição de partículas em mecânica quântica partindo da equação de Dirac, considerando suas soluções, interpretações e simetrias. Em seguida, abordaremos a equação de Majorana, investigando as representações matriciais, o formalismo de operadores quânticos e as aplicações atreladas a mesma.

Aprofundada a discussão acerca da hipótese de Majorana em física do estado sólido

chegamos ao Capítulo 4, no qual apresentaremos conceitos relevantes, como alguns princípios básicos da teoria de bandas, o tensor de massa efetiva e o teorema de massa efetiva, tópicos necessários para construir o fundamento teórico do uso de MDP em semicondutores. No Capítulo 5, verificaremos a compatibilidade da representação de Majorana com a teoria de massa efetiva, através do limite não-relativístico do Hamiltoniano. Introduziremos também o modelo TB, exemplificando sua utilização em uma cadeia de átomos unidimensionais.

Com isso, construiremos a equação geral das partículas de Majorana com acoplamento tipo excíton, que será resolvida no Capítulo 6, no qual discutiremos as soluções da função de onda, a energia e a presença de estados ligados, além da análise termo-estatística do sistema. Finalmente, no Capítulo 7 apresentamos as conclusões acerca dos resultados obtidos e as perspectivas futuras de continuidade deste projeto.

2 MECÂNICA QUÂNTICA RELATIVÍSTICA

A necessidade da criação de uma mecânica quântica relativística tornou-se evidente no início do século XX, quando duas teorias físicas fundamentais surgiram: a relatividade especial e a mecânica quântica. Essas teorias desenvolveram-se de modo independente, com cada uma abordando diferentes aspectos do mundo físico. A relatividade de Einstein se propunha a investigar o espaço e o tempo, além do movimento de objetos em altas velocidades, enquanto a mecânica quântica dedicava-se a descrição microscópica da natureza a nível atômico.

Para descrever partículas em altas energias, apenas os formalismos quânticos de Heisenberg e Schrödinger não eram satisfatórios, era preciso incorporar os princípios da relatividade especial a teoria, e conseqüentemente, criar uma nova formulação para a mecânica quântica. Com esse intuito surgiram as equações relativísticas que serão apresentadas nesse capítulo.

2.1 A equação de Dirac

No contexto da Mecânica Quântica, a descrição do comportamento de sistemas físicos é dada através de funções de onda, como a equação de Schrödinger

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \quad (2.1)$$

na qual H é o hamiltoniano e ψ é a função de onda do sistema. Essa relação, contudo, não se aplica a partículas sujeitas aos efeitos da relatividade especial ¹. Com intuito de solucionar esse problema, a primeira equação de onda relativística surgiu, a chamada equação de Klein-Gordon

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2\right)\psi = 0, \quad (2.2)$$

onde m é a massa da partícula. Essa equação pode ser obtida considerando que o hamiltoniano obedece a relação relativística entre a energia e o momento

$$E^2 = H^2 = p^2 + m^2, \quad (2.3)$$

na qual E corresponde a energia e p o momento da partícula. Esperava-se que essa equação descrevesse propriedades quânticas das partículas relativísticas, o que não ocorreu. Entre os problemas da expressão (2.2) está o fato de que ela nos conduz a uma densidade de probabilidade

¹ A equação de Schrödinger não incorpora princípios fundamentais da teoria da relatividade, como a invariância de Lorentz.

que não é positivamente definida (Ryder, 1996), além de prever soluções de energia negativas, que não foram esclarecidas até o surgimento da equação de Dirac.

Apesar das discrepâncias e problemas conceituais, verificou-se posteriormente que a equação de Klein-Gordon está associada às partículas de *spin* nulo. Dirac prosseguiu na formulação de uma teoria relativística do elétron, buscando uma equação diferencial de primeira ordem, como a equação de Schrödinger (2.1). Tal equação tem, em unidades naturais ($\hbar = c = 1$), a forma

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = [\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m]\psi, \quad (2.4)$$

com o hamiltoniano de Dirac correspondendo a

$$H = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m. \quad (2.5)$$

Tal hamiltoniano deve obedecer à relação (2.3), portanto, podemos dizer que:

$$p^2 + m^2 = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m)^2, \quad (2.6)$$

considerando que $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, e $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$, desenvolveremos o lado direito da equação acima

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m)(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m) = \alpha_i^2 p_i^2 + (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) p_i p_j + (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) m p_i + \beta^2 m^2, \quad (2.7)$$

o qual iremos comparar com o lado esquerdo de (2.6) para obtermos as condições:

$$(\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) = 2\delta_{ij} \quad (2.8)$$

$$(\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) = 0 \quad (2.9)$$

$$\alpha_i^2 = \beta^2 = 1. \quad (2.10)$$

Para que as equações acima sejam satisfeitas, as quantidades α_i e β não podem ser simples números, já que ambos não comutam entre si. A única possibilidade é que tais quantidades sejam matrizes, que obedecerão às relações de anti-comutação da álgebra de Clifford (Neto, 2017). Conseqüentemente, ψ não pode ser um escalar, mas também uma matriz, na forma

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x, t) \\ \psi_2(x, t) \\ \vdots \\ \psi_N(x, t) \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

É necessário que o hamiltoniano escolhido na equação (2.5) seja hermitiano, pois a hermiticidade² de um operador determina se os seus autovalores de energia são reais e se seus autovetores constituem uma base completa e ortogonal. Para garantir a hermiticidade de H , α_i e β também deverão ser Hermitianos (e, portanto, diagonalizáveis) com autovalores ± 1 . Além disso, podemos demonstrar que essas matrizes terão traço nulo. Multiplicando a relação 2.9 por β , teremos

$$\beta^2 \alpha_i = -\beta \alpha_i \beta, \quad (2.12)$$

onde podemos considerar que $\beta^2 = 1$ e aplicar o traço em ambos os lados da equação (2.12), chegando a

$$\begin{aligned} \text{Tr } \alpha_i &= -\text{Tr}(\beta \alpha_i \beta) \\ &= -\text{Tr}(\alpha_i) = 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

O mesmo procedimento pode ser feito para demonstrar que o traço de β é nulo. O traço de uma matriz corresponde a soma de seus autovalores, que correspondem a diagonal principal (para uma matriz diagonal). Isso nos permite concluir que as matrizes α_i e β devem ter dimensão par. A menor dimensão par, $N = 2$ é excluída, porque existem apenas 3 matrizes que anticomutam, as chamadas matrizes de Pauli, definidas como

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

A menor dimensão para qual a regra da anticomutação é satisfeita é $N = 4$. Entre as representações possíveis para as matrizes α_i e β adotaremos a seguinte, em função das matrizes de Pauli

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Utilizando essa representação, é conveniente usarmos a notação covariante para reescrever a equação (2.4). A covariância é uma propriedade fundamental dentro de teorias relativísticas, pois ela assegura que equações sejam válidas em qualquer sistema inercial. Para isso, definiremos as matrizes γ , que se relacionam com as matrizes α e β pelas relações

$$\gamma^0 = \beta \quad e \quad \vec{\gamma} = \beta \vec{\alpha}, \quad (2.16)$$

² Um operador hermitiano \hat{A} é hermitiano se satisfaz a relação $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, onde o símbolo \dagger representa o adjunto da matriz, ou seu transposto conjugado.

isto é:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

uma notação nos permite escrever as equações 2.8, 2.9 e 2.10 através da expressão única

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}, \quad (2.18)$$

onde $\eta^{\mu\nu}$ é a métrica do espaço de Minkowski, definida pela matriz

$$\eta^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.19)$$

Mais propriedades das matrizes γ podem ser encontradas em (Weinberg, 1995) e (Messiah, 2014). A partir dessas definições, a equação de Dirac assume a forma

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0. \quad (2.20)$$

É interessante analisar como se comporta a densidade de corrente, afim de verificar se a interpretação probabilística dessa equação não recai em problemas semelhantes aos encontrados na equação de Klein-Gordon. Para isso, começaremos por considerar que

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \quad \psi^\dagger = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \psi_3^* \quad \psi_4^*), \quad (2.21)$$

e definimos o adjunto de ψ , $\bar{\psi}$ como

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0, \quad \psi^\dagger = \bar{\psi} \gamma^0. \quad (2.22)$$

Tomando o conjugado Hermitiano da equação (2.4), temos

$$-i\gamma^{\mu\dagger} \partial_\mu \psi^\dagger - m\psi^\dagger = 0, \quad (2.23)$$

na qual as matrizes γ possuem como propriedade: $\gamma_\mu = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$. Logo

$$-i\gamma^{0\dagger} \gamma^{\mu\dagger} \gamma^{0\dagger} \partial_\mu \psi^\dagger - m\psi^\dagger = 0. \quad (2.24)$$

Multiplicar a equação acima por γ^0 pela direita e lembrar a definição de $\bar{\psi}$, resulta em

$$-i\gamma^\mu \partial_\mu \bar{\psi}^\dagger - m\bar{\psi} = 0, \quad (2.25)$$

ou seja, a equação de Dirac adjunta. Agora multiplicaremos essa equação por ψ pela direita, o que resulta em

$$-i\partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi - m\bar{\psi} \psi = 0. \quad (2.26)$$

Se multiplicarmos a equação (2.4) por $\bar{\psi}$ pela esquerda, teremos

$$i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - \bar{\psi} m \psi = 0. \quad (2.27)$$

Subtraindo (2.27) de (2.26), temos

$$i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi + i\partial^\mu \bar{\psi} \gamma_\mu \psi = i\partial^\mu (\bar{\psi} \gamma_\mu \psi). \quad (2.28)$$

Definimos então a densidade de corrente J^μ como

$$J^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi = (P, J), \quad (2.29)$$

onde P é a densidade de probabilidade, dada pela coordenada temporal de J^μ . Perceba que

$$J^0 = \bar{\psi} \gamma^0 \psi = \psi^\dagger \psi > 0, \quad (2.30)$$

portanto, a densidade de probabilidade é positivamente definida, e por isso, é possível fazer uma interpretação probabilística semelhante à feita para a equação de Schrödinger.

2.1.1 Solução da equação de Dirac

Apesar do êxito de uma densidade de probabilidade positiva, ainda havia um conceito problemático a ser interpretado pela equação de Dirac: as soluções de energia negativas. Conforme vimos, para obedecer à relação relativística (2.3), a equação de Dirac deve permitir que energias negativas existam. Em vez de descartar essas soluções, Dirac forneceu um significado físico para elas, como veremos adiante. Começaremos escrevendo a equação na forma

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m)\psi. \quad (2.31)$$

Partiremos do seguinte *ansatz* para a solução da função de onda plana

$$\psi(x, t) = u(\vec{p}, s) e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{x})}, \quad (2.32)$$

onde $u(\vec{p}, s)$ é um *spinor* de quatro componentes associado ao momento p e a direção do *spin* s , definido como

$$u(\vec{p}, s) = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Na equação acima, ϕ e χ são *spinors* de Pauli de 2 componentes, dependentes de (\vec{p}, s) . Colocando o *ansatz* de 2.32 em 2.31, temos

$$[\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m] u(\vec{p}, s) = E u(\vec{p}, s), \quad (2.34)$$

e substituindo $u(\vec{p}, s)$ de (2.33) na equação acima, chegamos na expressão

$$\begin{pmatrix} (E - m) & -\vec{\alpha} \cdot \vec{p} \\ -\vec{\alpha} \cdot \vec{p} & (E + m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = 0. \quad (2.35)$$

A multiplicação dessas matrizes vai nos retornar o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} (E - m)\phi - (\vec{\alpha} \cdot \vec{p})\chi &= 0, \\ (E + m)\chi - (\vec{\alpha} \cdot \vec{p})\phi &= 0. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Sabendo que $E = \sqrt{p^2 + m^2} = \pm E_p$, vamos analisar a solução positiva ($E = +E_p$), isolando χ da segunda equação em (2.36),

$$\chi = \frac{(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})}{E_p + m} \phi. \quad (2.37)$$

Isso nos leva ao *spinor* de energia positiva $u_+(\vec{p}, s)$, definido como

$$u_+(\vec{p}, s) = v(\vec{p}, s) = N \begin{pmatrix} \phi(s) \\ \frac{(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})}{E_p + m} \phi(s) \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

onde N é uma constante de normalização que será determinada posteriormente. De modo semelhante, isolamos ϕ da primeira equação em 2.36,

$$\phi = -\frac{(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})}{E_p + m} \chi, \quad (2.39)$$

para encontrar o *spinor* de energia negativa $u_-(\vec{p}, s)$:

$$u_-(\vec{p}, s) = w(-\vec{p}, s) = N \begin{pmatrix} -\frac{(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})}{E_p + m} \chi(s) \\ \chi(s) \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Para determinar os spinores ϕ e χ , podemos definir uma direção para o *spin* (*up* ou *down*) em seu referencial de repouso. Se escolhermos quantizar o *spin* no eixo z e colocarmos a condição de que $v(\vec{p} = 0, s)$ e $w(\vec{p} = 0, s)$ sejam autovetores do operador de *spin* S , definido como

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}, \quad (2.41)$$

com autovalores $s = \pm \frac{1}{2}$. Teremos então

$$S_z v(\vec{p} = 0, s) = s v(\vec{p} = 0, s) \implies \frac{1}{2} \sigma_z \phi(s) = s \phi(s), \quad (2.42)$$

$$\phi\left(+\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

$$S_z w(\vec{p} = 0, s) = s w(\vec{p} = 0, s) \implies \frac{1}{2} \sigma_z \chi(s) = s \chi(s), \quad (2.44)$$

$$\chi\left(+\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

É necessário determinar o valor do fator N . Para isso, assumiremos a condição de normalização: $\phi^\dagger(s') \phi(s) = \delta_{s's}$. Isso resulta em

$$N = \sqrt{\frac{E_p + m}{2m}}. \quad (2.46)$$

Finalmente, as funções de onda 2.32 são normalizadas num volume V de acordo com a relação

$$\int_V \psi^\dagger(x, t) \psi(x, t) d^3x = 1, \quad (2.47)$$

e agora podemos escrever as soluções finais da equação (2.31):

– Solução de energia positiva

$$\begin{aligned} \psi_{p,s}^{(+)}(x, t) &= \left(\frac{1}{\sqrt{V}} \right) \sqrt{\frac{m}{E_p}} v(\vec{p}, s) e^{-i(E_p t - \vec{p} \cdot \vec{x})}, \\ v(\vec{p}, s) &= \sqrt{\frac{E_p + m}{2m}} \begin{pmatrix} \phi(s) \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \phi(s) \\ E_p + m \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

– Solução de energia negativa

$$\begin{aligned}\psi_{p,s}^{(-)}(x,t) &= \left(\frac{1}{\sqrt{V}}\right) \sqrt{\frac{m}{E_p}} w(-\vec{p},s) e^{-i(E_p t - \vec{p} \cdot \vec{x})}, \\ w(\vec{p},s) &= \sqrt{\frac{E_p + m}{2m}} \begin{pmatrix} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \phi(s) \\ \phi(s) \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (2.49)$$

Conforme veremos na seção seguinte, a solução de energia positiva está associada à partícula e à energia negativa, por sua vez, a uma antipartícula.

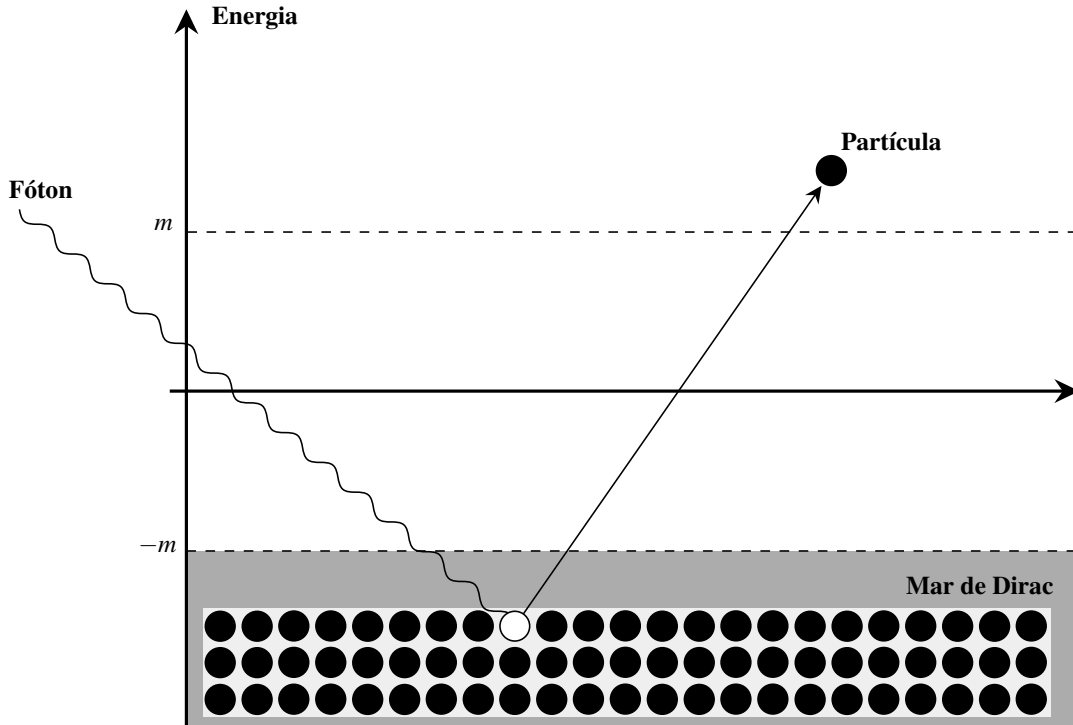
2.1.2 Interpretação das soluções para a partícula livre

Uma explicação para os estados anômalos de energia negativas previstas por sua equação foi formulada por Dirac em 1930. Partindo do princípio da exclusão de Pauli (que postula que dois elétrons num átomo não podem compartilhar o mesmo estado de energia), Dirac teorizou que o que entendemos por vácuo seria equivalente a uma configuração na qual todos os estados de energia negativa estão preenchidos e os de energia positiva estão vazios (Gaumé *et al.*, 2005). Se quiséssemos introduzir um elétron nessa configuração, ele deveria obrigatoriamente ocupar um estado positivo, e ainda que essa partícula perdesse energia pela emissão de fótons, ela não poderia assumir uma energia abaixo de zero. O vácuo seria portanto, um mar de energia negativas, que foi nomeado de mar de Dirac.

Posteriormente, Dirac supôs uma situação onde todos os estados de energia negativa estão ocupados, exceto um (Dirac, 1930). Isso criaria um buraco no mar, que iria interagir com campos elétricos como se fosse uma partícula positiva, conforme a Figura 1. Inicialmente, pensou-se que essa partícula era um próton. J.R. Oppenheimer apontou que esse buraco e um elétron iriam aniquilar-se mutuamente liberando energia na forma de fótons, de modo que não haveria átomos estáveis caso os buracos fossem prótons (Dirac, 1931). Hermann Weyl também notou que o buraco teria a mesma massa do elétron, enquanto um próton é cerca de 2000 vezes mais pesado (Obertelli *et al.*, 2021). É nesse contexto que temos o surgimento da ideia de antimatéria. Dirac, apesar de inicialmente relutante, concluiu que o buraco seria na realidade uma partícula exatamente como o elétron, porém de carga positiva.

Essa nova partícula, a primeira anti-partícula foi encontrada experimentalmente em 1932, confirmando a previsão de Dirac (Anderson, 1933). Apesar da genialidade da teoria do mar de Dirac, essa ideia não foi a palavra final na solução do problema da energia negativa. Esse

Figura 1 – Representação do mar de Dirac - Considerando que elétrons relativísticos poderiam emitir energia na forma de fótons continuamente e alcançar níveis de energia cada vez mais baixos, Dirac propôs que existe, abaixo do nível zero de energia, um "mar" de elétrons ocupando todos os estados negativos. Assim, a exclusão de Pauli garante que nenhum estado negativo adicional possa ser ocupado por elétrons de energia positiva. Se existir um estado negativo não ocupado no mar, esse buraco se comportaria como um elétron de carga positiva, ou um pósitron.



Fonte: (Gaumé *et al.*, 2005, Adaptada)

modelo não leva em consideração partículas como os bósons, que não obedecem ao princípio de exclusão de Pauli e poderiam, portanto, ocupar estados de energia já preenchidos. Com o desenvolvimento da Teoria Quântica de Campos a partir de 1930, foi possível reformular o entendimento dos resultados da equação de Dirac, e passou-se a compreender que a antimatéria é constituída de partículas reais em vez de buracos e o vácuo como um estado no qual nenhuma partícula existe, em vez de um mar infinito de partículas.

2.2 Limite não-relativístico da equação de Dirac

Analisar o limite não-relativístico (NR) de uma teoria nos permite verificar se a mesma é consistente com as previsões para situações nas quais as velocidades envolvidas são baixas, o que é fundamental para garantir que a teoria seja aplicável em um amplo espectro de sistemas físicos. Considerando que a maioria dos objetos do nosso cotidiano se move em velocidades muito inferiores a da luz, o limite NR auxilia na simplificação de cálculos,

na compreensão e na aplicação de resultados de equações clássicas e quânticas em diversos contextos (Manfredi, 2013),(Kutzelnigg, 1989).

Portanto, estudaremos o comportamento de equações relativísticas no contexto de baixas velocidades ($v \ll c$), ou seja, quando efeitos relativísticos tornam-se desprezíveis. Começaremos escrevendo a equação de Dirac na presença de potenciais eletromagnéticos

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[c\vec{\alpha} \cdot \left(\vec{p} - \frac{e}{c}A \right) + eA_0 + \beta m_0 c^2 \right] \psi, \quad (2.50)$$

onde A é o quadrivetor potencial eletromagnético, definido como

$$A^\mu = \{A_0(x), A(x)\}. \quad (2.51)$$

Para manter a invariância de *gauge* da teoria, consideraremos o acoplamento mínimo

$$\vec{p}^\mu \rightarrow \vec{p}^\mu - \frac{e}{c}A^\mu \equiv \vec{\Pi}^\mu, \quad (2.52)$$

onde $\vec{\Pi}^\mu$ é o momento cinético e \vec{p}^μ é o momento canônico³. Escrevendo o *spinor* ψ na forma

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

a relação 2.50 se torna

$$i\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} & 0 \end{pmatrix} + eA_0 + m_0 \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (2.54)$$

Se considerarmos que o *spinor* em 2.53 pode ser separado na forma

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} e^{-im_0 t}, \quad (2.55)$$

a equação 2.54 se torna

$$i\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} & \chi \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} & \phi \end{pmatrix} + eA_0 \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} - 2m_0 \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (2.56)$$

A equação 2.56 por sua vez, se torna um sistema de equações para ϕ e χ . Analisando a segunda equação do sistema, em χ , e considerando que $\left| i\frac{\partial \chi}{\partial t} \right| \ll |m_0 \chi|$ e $|eA_0 \chi| \ll |m_0 \chi|$ (ou seja, que a

³ O momento canônico, definido como $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$ é utilizado na formulação hamiltoniana da mecânica para sistemas com coordenadas generalizadas.

energia cinética e potencial são muito pequenas comparadas a energia de repouso), podemos isolar uma equação para χ ,

$$\chi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}}{2m_0} \phi. \quad (2.57)$$

A relação acima indica que χ representa as componentes menores do *spinor* ψ . Conseqüentemente, a componente significativa está na variável ϕ , e portanto, as componentes de energia positiva são mantidas enquanto as componentes de energia negativa são desprezadas. Tendo em vista isso, obtemos a seguinte equação para ϕ

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})}{2m_0} \phi + eA_0 \phi. \quad (2.58)$$

Reorganizando a relação acima, teremos

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t} \phi = \left[\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi})^2}{2m_0} + eA_0 \right] \phi, \quad (2.59)$$

expressão que corresponde a equação de Pauli, uma relação obtida a partir da equação de Schrödinger que leva em consideração partículas de *spin* 1/2 com baixas velocidades ($v \ll c$) na presença de um campo eletromagnético. Contudo, podemos analisar o limite não-relativístico de outra forma, a partir da representação conhecida como Foldy-Wouthuysen. Tal representação nos permite descrever uma função de onda em termos de duas componentes, generalizando essa propriedade para partículas sujeitas a altas velocidades (Greiner *et al.*, 2000). Buscaremos então uma transformação unitária \hat{U} que mudará a representação de Dirac para a representação que queremos encontrar, através de uma modificação no operador hamiltoniano. Para isso, começaremos por considerar

$$\phi = \hat{U} \psi = e^{i\hat{S}} \psi, \quad (2.60)$$

onde \hat{S} é um operador Hermitiano que iremos determinar. Podemos perceber que a transformação é unitária⁴, isto é: ($\hat{U}^\dagger \hat{U} = e^{-i\hat{S}} e^{i\hat{S}} = \mathbb{1}$). A partir da equação de Dirac, podemos definir que o hamiltoniano na nova representação \hat{H}_ϕ obedece à expressão

$$\hat{H}_\phi \phi = i \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (2.61)$$

e portanto,

$$\hat{H}_\phi e^{i\hat{S}} \psi = -e^{i\hat{S}} \psi \frac{\partial S}{\partial t} + ie^{i\hat{S}} \frac{\partial \psi}{\partial t} = e^{i\hat{S}} \hat{H} \psi - \frac{\partial S}{\partial t} e^{i\hat{S}} \psi. \quad (2.62)$$

⁴ Em Mecânica Quântica, essas matrizes representam operadores unitários que descrevem evoluções temporais em sistemas preservando a norma dos vetores de estado, ou seja, a sua probabilidade total.

Multiplicando a expressão do lado direito da equação acima por $e^{-i\hat{S}}$, obtemos \hat{H}_ϕ na forma

$$\hat{H}_\phi = e^{i\hat{S}} \hat{H} e^{-i\hat{S}} - \frac{\partial \hat{S}}{\partial t}. \quad (2.63)$$

Consideraremos que o operador \hat{S} gera uma transformação independente do tempo, ou seja, $\partial \hat{S} / \partial t = 0$. Assumindo o *ansatz* para \hat{S} ,

$$\hat{S} = \left(\frac{-i}{2m_0} \right) \beta \alpha \cdot p \omega \left(\frac{p}{m_0} \right), \quad (2.64)$$

no qual a função $\omega(p/m_0)$ será determinada posteriormente. Percebe-se que por tal definição o operador \hat{S} é de fato Hermitiano. Retornando a equação 2.63, temos

$$\hat{H}_\phi = e^{i\hat{S}} (\hat{\alpha} \cdot p + \hat{\beta} m_0) e^{-i\hat{S}} = e^{i\hat{S}} \hat{\beta} e^{-i\hat{S}} \hat{\beta} (\hat{\alpha} \cdot p + m_0), \quad (2.65)$$

e sabendo que \hat{S} comuta com $\hat{\beta} p \cdot \hat{\alpha}$, podemos usar a relação

$$\hat{\beta} (\hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot p)^n = (-1)^n (\hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot p)^n \hat{\beta}, \quad (2.66)$$

para escrever

$$\hat{\beta} e^{-i\hat{S}} = \hat{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-1}{2m_0} \right)^n \frac{(\hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot p)^n}{n!} \omega^n = e^{i\hat{S}} \hat{S}. \quad (2.67)$$

Na equação acima, $e^{-i\hat{S}}$ foi expandido numa série de potências, e a expressão 2.65 se torna

$$\hat{H}_\phi = e^{2i\hat{S}} (\hat{\alpha} \cdot p + \hat{\beta} m_0). \quad (2.68)$$

De modo semelhante, expandiremos $e^{2i\hat{S}}$

$$e^{2i\hat{S}} = 1 + \frac{\hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot p}{m_0} \omega + \left(\frac{\hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot p}{m_0} \right)^2 \frac{\omega^2}{2!} + \left(\frac{\hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot p}{m_0} \right)^3 \frac{\omega^3}{3!} + \dots, \quad (2.69)$$

observando que $(\hat{\beta} \hat{\alpha} \cdot p)^2 = -p^2$. Na equação acima, pode-se reconhecer também as expansões em série de $\sin(p\omega/m_0)$ e $\cos(p\omega/m_0)$, o que nos permite escrever

$$\hat{H}_\phi = \left[\cos \left(\frac{p\omega}{m_0} \right) + \hat{\beta} \frac{\hat{\alpha} \cdot \hat{p}}{p} \sin \left(\frac{p\omega}{m_0} \right) \right] [\hat{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta m_0], \quad (2.70)$$

$$\hat{H}_\phi = \hat{\beta} \left[m_0 \cos \left(\frac{p\omega}{m_0} \right) + p \sin \left(\frac{p\omega}{m_0} \right) \right] + \frac{\hat{\alpha} \cdot \hat{p}}{p} \left[p \cos \left(\frac{p\omega}{m_0} \right) - m_0 \sin \left(\frac{p\omega}{m_0} \right) \right].$$

Agora escolheremos um valor para ω de modo a eliminarmos o termo com $\hat{\alpha}$, já que este termo conecta as componentes maiores e menores do *spinor*, logo,

$$\omega = \frac{m_0}{p} \arctan\left(\frac{p}{m_0}\right), \quad (2.71)$$

e o termo restante do hamiltoniano é

$$\hat{H}_\phi = \hat{\beta} \left[m_0 \cos\left(\arctan\left(\frac{p}{m_0}\right)\right) + p \sin\left(\arctan\left(\frac{p}{m_0}\right)\right) \right]. \quad (2.72)$$

A expressão acima pode ser simplificada para

$$\hat{H}_\phi = \hat{\beta} \sqrt{p^2 + m_0^2} = \hat{\beta} E_p, \quad (2.73)$$

onde o hamiltoniano encontrado corresponde à energia da partícula no limite não-relativístico. Utilizaremos novamente a transformação FW para encontrar um hamiltoniano na representação de Majorana no Capítulo 5.

2.3 Simetrias na equação de Dirac

No contexto da física de altas energias, falamos de simetria quando uma determinada propriedade ou característica de um sistema se mantém inalterada sob efeito de uma determinada transformação. A importância desse conceito reside no fato de que as simetrias garantem a coesão de teorias e orientam verificações experimentais, além de explicarem alguns fenômenos físicos (Neto, 2017). Tendo isso em mente, analisaremos o comportamento da equação de Dirac em relação a 3 simetrias discretas, denominadas simetrias Carga, Paridade e Tempo (CPT) e em seguida a simetria contínua de Lorentz.

Como consequência da introdução do conceito de antimatéria por Dirac surge a simetria de conjugação de carga, na qual temos uma transformação que promove a troca de partícula por sua respectiva anti-partícula (Al-Hashimi *et al.*, 2017). Tendo isso em vista, partiremos da equação de Dirac na presença de potenciais eletromagnéticos

$$[\gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) - m] \psi = 0, \quad (2.74)$$

para a qual tomaremos o seu complexo conjugado

$$[-i(\gamma^{\mu*})\partial_\mu - e(\gamma^{\mu*})A_\mu - m]\psi^* = 0. \quad (2.75)$$

Podemos realizar uma operação de conjugação através de uma matriz unitária C , que satisfaz a relação

$$C(\gamma^\mu)^* C^{-1} = -\gamma^\mu. \quad (2.76)$$

Aplicando a matriz acima na relação 2.75, teremos

$$C [(\gamma^\mu)^* (-i\partial_\mu - eA_\mu) - m] C^{-1} C\psi^* = 0, \quad (2.77)$$

ou seja,

$$\gamma^\mu (i\partial_\mu + eA_\mu - m) C\psi^* = 0. \quad (2.78)$$

Observe que $C\psi^*$ satisfaz a equação de Dirac para o pósitron (isto é, quando trocamos a carga e por $-e$). Observando as propriedades das matrizes γ^μ , temos que apenas γ^2 tem componentes imaginárias, de modo que $\gamma^{2*} = -\gamma^2$. Se definirmos

$$C = i\gamma^2 = C^{-1}, \quad (2.79)$$

então o operador C satisfaz a equação 2.76 e transforma o *spinor* de uma partícula no *spinor* de sua antipartícula. Portanto, a função de onda conjugada é

$$\psi^c = C\psi = i\gamma^2\psi^*. \quad (2.80)$$

Analisaremos agora a transformação de paridade, na qual inverte-se o sinal de uma coordenada espacial, ou seja: $\hat{P}(x, y, z) \rightarrow \hat{P}(-x, -y, -z)$. Aplicando essa transformação na equação de Dirac, alteraríamos a posição \vec{r} o momento \vec{p} de modo que

$$\hat{P} \vec{r} \hat{P}^{-1} = -\vec{r}, \quad (2.81)$$

$$\hat{P} \vec{p} \hat{P}^{-1} = -\vec{p}. \quad (2.82)$$

Como consequência, o Hamiltoniano \hat{H} seria modificado. Para evitar essa alteração e preservar a simetria, adicionaremos um operador unitário U_p de modo que

$$\hat{P} = U_p \hat{P}, \quad e \quad \hat{P} \hat{H} \hat{P} = \hat{H}. \quad (2.83)$$

Se considerarmos o hamiltoniano de Dirac na forma

$$\hat{H} = \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m + V(r), \quad (2.84)$$

as seguintes condições devem ser satisfeitas:

$$U_p(\vec{\alpha})U_p^{-1} = -\vec{\alpha}, \quad e \quad U_p(\beta)U_p^{-1} = \beta. \quad (2.85)$$

Disso concluímos que operador U_p deve anticomutar com $\vec{\alpha}$ e comutar com β . Nesse caso, podemos escolher $U_p = \beta$, de modo que as condições são satisfeitas. Portanto, definimos o operador paridade como

$$\hat{P} = \beta \hat{P}, \quad (2.86)$$

e sua ação sobre um *spinor* obedece a

$$\hat{P}\psi(\vec{r}) = \beta\psi(-\vec{r}). \quad (2.87)$$

Por fim, temos a simetria temporal, que é analisada a partir da transformação: $\hat{T}\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, -t)$. O operador temporal \hat{T} tem a forma

$$\hat{T} = U_t \hat{K}, \quad (2.88)$$

onde \hat{K} é um operador que atua conjugando coeficientes. Escrevendo a equação de Dirac de forma mais conveniente,

$$i\partial_t\psi(\vec{r}, t) = (-i\gamma^0\vec{\gamma}\cdot\vec{\nabla} + \gamma^0 m)\psi(\vec{r}, t), \quad (2.89)$$

e aplicando a transformação temporal no lado esquerdo de 2.89, temos

$$\begin{aligned} \hat{T}(i\partial_t)\hat{T}^{-1}\psi(\vec{r}, t) &= U_t\hat{K}(i\partial_t)\hat{K}U_t^{-1}U_t\hat{K}\psi(\vec{r}, t) \\ &= -i\partial_t U_t\psi^*(\vec{r}, t) \\ &= i\partial_{-t} U_t\psi^*(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (2.90)$$

onde o termo $U_t\psi^*(\vec{r}, t)$ deve obedecer a equação de Dirac revertida no tempo. Aplicaremos agora a transformação temporal no lado direito da expressão 2.89, o que nos leva as condições:

$$\hat{T}(i\gamma^0\vec{\gamma})\hat{T}^{-1} = i\gamma^0\vec{\gamma} \quad (2.91)$$

$$\hat{T}\gamma^0\hat{T}^{-1} = \gamma^0. \quad (2.92)$$

Podemos escrever a equação 2.92 como

$$\gamma^0 = \hat{K}U_t^{-1}\gamma^0U_t\hat{K}, \quad (2.93)$$

e ao multiplicarmos a expressão acima por \hat{K} pela esquerda, teremos

$$\begin{aligned}\hat{K}\gamma^0 &= U_t^{-1}\gamma^0U_t\hat{K} \\ (\gamma^0)^* &= U_t^{-1}\gamma^0U_t,\end{aligned}\tag{2.94}$$

se o mesmo processo para a equação 2.91, chegamos a

$$-(\vec{\gamma})^* = U_t^{-1}(\vec{\gamma})U_t.\tag{2.95}$$

Na representação escolhida, temos as seguintes condições para as matrizes γ :

$$(\gamma^0)^* = \gamma^0 = U_t^{-1}\gamma^0U_t;\tag{2.96}$$

$$-(\gamma^2)^* = \gamma^2 = U_t^{-1}\gamma^2U_t;\tag{2.97}$$

$$-(\gamma^1)^* = \gamma^1 = U_t^{-1}\gamma^1U_t;\tag{2.98}$$

$$-(\gamma^3)^* = \gamma^3 = U_t^{-1}\gamma^3U_t.\tag{2.99}$$

As equações acima nos mostram que U_t comuta com γ^0 e γ^2 e anticomuta com γ^1 e γ^3 . A escolha que satisfaz essas condições é

$$U_t = \gamma^1\gamma^3.\tag{2.100}$$

e finalmente, temos que a operação

$$\hat{T}\psi(\vec{r},t) = \gamma^1\gamma^3\hat{K}\psi(\vec{r},t) = \gamma^1\gamma^3\psi^*(\vec{r},t),\tag{2.101}$$

satisfaz a equação de Dirac. É importante salientar que além das simetrias discretas, que envolvem transformações que podem ser aplicadas apenas em etapas bem definidas (com um conjunto finito de parâmetros discretos), temos também as simetrias contínuas, que estão relacionadas a transformações que podem ser aplicadas continuamente, com um número infinito de parâmetros. Uma forma mais simples de visualizar a diferença entre os dois tipos seria imaginar as simetrias discretas como a invariância perante a troca de um estado por outro, enquanto simetrias contínuas envolveriam o conceito de movimento.

As simetrias contínuas associam-se ao teorema de Noether, resultado fundamental em teoria quântica de campos. Em resumo, o teorema anuncia que um sistema físico que apresenta uma certa simetria contínua tem necessariamente uma quantidade física vinculada a ele que se conserva (Gross, 1999). Se tomarmos como exemplo a simetria de transformação global de fase obedecida pela equação de Dirac, esta implica na conservação da corrente de probabilidade J^μ .

Outros exemplos de simetrias contínuas incluem as simetrias de translação e rotação espaciais, de Lorentz e de calibre. Para a construção de uma teoria relativística, a simetria de Lorentz tem destaque especial, pois seu uso permite que leis físicas se mantenham invariantes quando mudamos de um referencial para outro no espaço de Minkowski. Para isso, usaremos as chamadas transformações de Lorentz (TL). Consideraremos que tais transformações seguem a forma

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda_\nu^\mu x^\nu, \quad (2.102)$$

com a métrica

$$\Lambda_m^\mu (g_{\mu\nu}) \Lambda_n^\nu = g_{mn}, \quad (2.103)$$

na qual Λ_ν^μ é uma matriz de elementos reais. Se aplicarmos essa transformação na equação de Dirac

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0, \quad (2.104)$$

para que tenhamos uma invariância sob as TL, o *spinor* transformado $\psi'(x')$ deve obedecer a

$$(i\gamma^\mu \partial'_\mu - m)\psi'(x') = 0. \quad (2.105)$$

Agora buscaremos encontrar uma relação entre o *spinors* antes e depois da transformação, que é obtida a partir de uma representação $S_{ab}(\Lambda)$ para as TL dada por

$$\psi'_a(x') = S_{ab}(\Lambda)\psi_b(x), \quad (2.106)$$

onde os índices $a, b = 1, 2, 3$ dizem respeito as componentes do *spinor*. Se multiplicarmos 2.104 por um S pela esquerda obteremos

$$(iS\gamma^\mu S^{-1})\partial_\mu [S\psi(x)] - mS\psi(x) = 0. \quad (2.107)$$

Aplicando 2.106 na relação acima, teremos

$$(iS\gamma^\mu S^{-1}\partial'_\mu - m)\psi'(x') = 0, \quad (2.108)$$

onde usamos $S\partial_\mu S^{-1} = \partial'_\mu$. Da relação 2.102 podemos escrever $\partial_\mu = \Lambda_\mu^\nu \partial'_\nu$ e conseqüentemente, $\partial'_\nu = \Lambda_\nu^\mu \partial_\mu$. Para recuperarmos o resultado 2.105 devemos ter

$$S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda) = \Lambda_\mu^\nu \gamma^\nu. \quad (2.109)$$

Podemos ainda multiplicar a equação acima por S^{-1} pela esquerda, por S pela direita e por Λ_{μ}^{ν} pela esquerda novamente, temos

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^{\mu}S(\Lambda) = \Lambda_{\nu}^{\mu}\gamma^{\nu}, \quad (2.110)$$

expressão que nos permite concluir que γ^{μ} se transforma como um vetor de Lorentz, além de possibilitar uma condição para a construção da matriz S que representa as TL. Iremos encontrar a forma desta matriz, partindo das transformações infinitesimais de Lorentz⁵

$$\Lambda_{\nu}^{\mu} = \delta_{\nu}^{\mu} + \varepsilon_{\nu}^{\mu}, \quad (2.111)$$

na qual $\varepsilon_{\mu\nu} = \varepsilon_{\nu\mu}$ é infinitesimal. Em primeira ordem, S tem a forma

$$S(\Lambda) = 1 - \frac{i}{4}\varepsilon^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}, \quad (2.112)$$

onde

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}(\gamma_{\mu}\gamma_{\nu} - \gamma_{\nu}\gamma_{\mu}) = \frac{i}{2}[\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}]. \quad (2.113)$$

Tal resultado é demonstrado com mais detalhes em (Neto, 2010). Assim, encontramos a representação $S(\Lambda)$ que torna a equação de Dirac invariante sob as TL. As simetrias das transformações de Lorentz associam-se, pelo teorema de Noether, a conservação da energia e do momento de um sistema. A simetria de calibre ou de *gauge*, por sua vez, está relacionada a propriedade de uma teoria de *gauge*⁶ na qual as leis da física permanecem inalteradas quando os campos de *gauge* são transformados localmente por um grupo de simetria. As teorias de calibre descrevem a natureza quântica do eletromagnetismo, e das forças fraca e forte, unificando-as na teoria do modelo padrão (O’Raifeartaigh *et al.*, 2000).

O primeiro exemplo de simetria de calibre descoberto foi o eletromagnetismo clássico (Perkins, 2000), o que nos diz que as leis físicas que regem eletricidade e magnetismo (as equações de Maxwell) são invariantes sob transformações de calibre. Nesse sentido, a descrição de férmions na presença de um campo eletromagnético requer que a equação de Dirac seja compatível com a invariância de calibre da teoria eletromagnética.

⁵ Tal transformação descreve a mudança nas coordenadas espaço-temporais de eventos e as componentes de vetores e tensores entre dois sistemas de referência que estão em movimento relativo em uma vizinhança muito próxima do ponto de interesse.

⁶ Em teorias de campos, uma mudança na configuração de um campo para outra é chamada de transformação de *gauge*. Caso essa mudança não afete quantidades mensuráveis, temos uma invariância de *gauge*. A invariância sob uma transformação de campo constitui uma simetria, chamada de simetria de *gauge* ou de calibre.

Para verificar essa compatibilidade, partimos da equação

$$i\gamma^\mu [\partial_\mu + iqA_\mu(x)]\psi(x) - m\psi(x) = 0, \quad (2.114)$$

e consideraremos que todos os potenciais vetores A_μ que diferem entre si por uma transformação de calibre são equivalentes e portanto, podemos escrever para um novo potencial A'_μ

$$A'_\mu(x) = A_\mu(x) + \partial_\mu\chi(x), \quad (2.115)$$

onde $\chi(x)$ é uma função real suave arbitrária que se anula rapidamente quando x tende ao infinito.

Reescrevendo a equação de Dirac 2.114 para esse novo potencial, teremos

$$i\gamma_\mu [\partial_\mu + iqA'_\mu(x)]\psi'(x) - m\psi'(x) = 0, \quad (2.116)$$

Onde $\psi'(x)$ é o *spinor* que representa a solução dessa nova equação, definido como

$$\psi'(x) = e^{-iq\chi(x)}\psi(x). \quad (2.117)$$

Substituir a definição do *spinor* transformado acima em 2.116 retorna a equação

$$i\gamma_\mu [\partial_\mu + iqA'_\mu(x)]\psi(x) - m\psi(x) = 0. \quad (2.118)$$

A expressão acima é equivalente à equação 2.114, e portanto, podemos dizer que a equação de Dirac é de fato invariante de *gauge*. Continuaremos a discutir a relevância de simetrias físicas no capítulo seguinte, estendendo esses conceitos para a equação de Majorana.

3 A REPRESENTAÇÃO DE MAJORANA

Após a publicação e o êxito dos trabalhos de Dirac, muitos físicos dedicaram-se ao estudo do comportamento das partículas no contexto de sua equação, explorando possíveis representações distintas. Dentre estes, o italiano Ettore Majorana, que considerou uma modificação na equação de Dirac que conduziria a soluções puramente reais. Tal ideia nos levou a hipótese de uma partícula equivalente a sua própria anti-partícula, nomeada de férmion de Majorana (Majorana, 1937).

Figura 2 – Ettore Majorana (1906 - ca. 1938): Reconhecido como um prodígio por seu mentor Enrico Fermi, Majorana foi autor de trabalhos promissores em sua breve e significativa carreira científica. Antes de desaparecer misteriosamente em 1938, ele publicou seu último artigo, "Teoria simmetrica del'eletrone e del positrone", no qual foram introduzidas as partículas de Majorana (Wilczek, 2009).



Fonte: (Gandolfi, 2023)

Para entender como Majorana formulou sua hipótese, partiremos da formulação covariante da equação de Dirac,

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0 \quad (3.1)$$

Na qual, conforme vimos no capítulo anterior, o *spinor* ψ é complexo. Ao considerar princípios de simetria nas equações relativísticas, Majorana percebeu que, alterando a representação, seria possível encontrar um *spinor* puramente real, isto é, um *spinor* que obedeceria à relação $\psi^* = \psi$. Para isso, um novo conjunto foi escolhido para as matrizes γ^μ , preservando a relação da álgebra de Clifford,

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}. \quad (3.2)$$

Semelhante à representação de Dirac, as matrizes foram escritas em termos das matrizes de Pauli, porém, tornaram-se puramente imaginárias. Na nova representação, podemos ter a seguinte escolha:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ \sigma^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} i\sigma^3 & 0 \\ 0 & i\sigma^3 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^2 \\ -\sigma^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} -i\sigma^3 & 0 \\ 0 & -i\sigma^3 \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

A equação de Majorana é, portanto, escrita nessa base, com ψ_M correspondendo ao *spinor* de Majorana,

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi_M = 0. \quad (3.4)$$

Outra forma de descrever a equação de Majorana independente da base é utilizando a conjugação de carga. Conforme visto no capítulo anterior, podemos definir uma operação de conjugação tal que: $\psi^c = C\psi$ que também satisfaz a equação de Dirac (porém, a partícula descrita tem carga oposta). Para isso, temos as condições a seguir:

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0 \quad e \quad (\gamma^j)^\dagger = -\gamma^j. \quad (3.5)$$

Relembrando a condição de que o *spinor* seja real, concluímos que

$$\psi^c = \psi. \quad (3.6)$$

E como consequência da relação acima, temos um *spinor* que descreve partículas equivalentes a suas antipartículas e de carga elétrica neutra.

3.1 A equação de Majorana em (1+1) dimensões

Ao longo deste trabalho, optamos por analisar as propriedades das partículas de majorana no contexto de duas dimensões, sendo uma espacial e a outra temporal. Faremos nessa seção uma breve descrição das simetrias na representação de majorana. Partiremos da equação de Dirac em (1+1) dimensões,

$$i\partial_t \psi(x,t) = (-i\gamma^0 \gamma^1 \partial_x + \gamma^0 m)\psi(x,t), \quad (3.7)$$

onde as matrizes γ escolhidas são

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

A métrica satisfeita é $g_{\mu\nu} = \text{diag}(+, -)$. Definimos também as matrizes imaginárias para a base de Majorana,

$$\bar{\gamma}^0 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\gamma}^1 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

As bases de Dirac e Majorana relacionam-se entre si através da transformação unitária

$$\gamma^\mu = \hat{U}(\bar{\gamma}^\mu)\hat{U}^\dagger, \quad (3.10)$$

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Os *spinors* em cada representação possuem componentes ψ_1, ψ_2 e obedecem a relação

$$\psi(x, t) = U\bar{\psi}(x, t). \quad (3.12)$$

Aplicando $\bar{\psi}^* = \bar{\psi}$ na equação acima,

$$\psi(x, t) = \hat{U}[\hat{U}^\dagger \psi(x, t)]^*, \quad (3.13)$$

$$\begin{pmatrix} \psi_1(x, t) \\ \psi_2(x, t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^*(x, t) \\ \psi_2^*(x, t) \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Efetuando o produto entre as matrizes da relação 3.14, iremos obter

$$\psi_1(x, t) = i\psi_2^*(x, t), \quad \psi_2(x, t) = i\psi_1^*(x, t). \quad (3.15)$$

Aqui introduziremos o *spinor* $\Psi(x, t) = \psi_1(x, t)$ que nos permite escrever a relação 3.7 como

$$i\partial_t \begin{pmatrix} \Psi(x, t) \\ i\Psi^*(x, t) \end{pmatrix} = (-i\gamma^0\gamma^1\partial_x + \gamma^0 m) \begin{pmatrix} \Psi(x, t) \\ i\Psi^*(x, t) \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

e obter a expressão

$$i\partial_t \Psi(x, t) = \partial_x \Psi^*(x, t) + m\Psi(x, t), \quad (3.17)$$

que corresponde a equação de Majorana de uma componente. Pode-se perceber que, partindo da equação de Dirac e impondo a condição de um *spinor* real, chegamos em uma equação que envolve tanto Ψ como Ψ^* . Enquanto o *spinor* de Dirac tem dois graus de liberdade (um correspondente a descrição da partícula e o outro da antipartícula), o *spinor* de Majorana tem apenas metade, já que não há distinção entre partícula e antipartícula.

3.1.1 Simetrias discretas na equação de Majorana (1+1)

Analisaremos agora como se aplicam as simetrias de paridade, tempo e carga para férmions de Majorana em uma dimensão espacial. Começando pela paridade, essa transformação em um férmion de Dirac tem a forma:

$$P\psi(x,t) = \gamma^0\psi(-x,t), \quad (3.18)$$

$$P\psi_1(x,t) = \psi_1(-x,t), \quad P\psi_2 = -\psi_2(-x,t). \quad (3.19)$$

Perceba que a equação 3.19 é incompatível com a condição do *spinor* de Majorana encontrada na relação 3.15. Todavia, podemos combinar a paridade com uma multiplicação por um fator de fase i , teremos uma transformação de paridade

$$P\psi(x,t) = i\psi(-x,t), \quad (3.20)$$

que ao ser aplicada em 3.17, nos retorna

$$\begin{aligned} i\partial_t[P\Psi(x,t)] &= -\partial_t\Psi(-x,t) = \partial_x[i\Psi(-x,t)]^* + im\Psi(-x,t) \\ &= \partial_x P\Psi^*(x,t) + mP\Psi(x,t), \end{aligned} \quad (3.21)$$

expressão que nos mostra a invariância na equação de majorana sob a transformação P . Do mesmo modo, podemos definir uma transformação de reversão temporal

$$T\Psi(x,t) = \Psi(x,-t)^*, \quad (3.22)$$

que aplicaremos em 3.17,

$$\begin{aligned} i\partial_t T\Psi(x,t) &= i\partial_t \Psi(x,-t)^* = -i\partial_{-t} \Psi(x,-t)^*, \\ &= \partial_x \Psi(x,-t) + m\Psi(x,-t)^*, \\ &= \partial_x T\Psi(x,t)^* + mT\Psi(x,t), \end{aligned} \quad (3.23)$$

e novamente, a equação de Majorana se mantém invariante sob essa transformação. Por fim, consideraremos a conjugação de carga, cuja transformação para um férmion de Dirac tem a forma

$$C\psi(x,t) = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \psi(x,t)^*, \quad (3.24)$$

o que nos retorna duas equações:

$$C\psi_1(x,t) = i\psi_2(x,t)^*, \quad C\psi_2(x,t) = i\psi_1(x,t)^*. \quad (3.25)$$

As relações acima correspondem à condição de Majorana encontrada em 3.15, e, portanto, temos uma invariância ante a conjugação de carga.

3.1.2 A representação de Weyl

Podemos obter *spinors* de Majorana utilizando uma notação alternativa das matrizes gama desenvolvida por Hermann Weyl, na qual

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{I} \\ \mathbb{I} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Aplicando essa representação na equação de Dirac (2.4), obtemos

$$\begin{pmatrix} -m & i\partial_t - \sigma \cdot p \\ i\partial_t + \sigma \cdot p & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix} = 0, \quad (3.27)$$

Na qual as 4 componentes do *spinor* de Dirac são separadas em pela sua quiralidade em componentes esquerdas (Left) e direitas (Right)¹ (Aguado, 2017). Se a condição $\psi = \psi^C$ for utilizada nesse *spinor*, teremos

$$\begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma^2 \\ -i\sigma^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_L^* \\ \psi_R^* \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

$$\begin{pmatrix} \psi_L \\ \psi_R \end{pmatrix} = i\sigma^2 \begin{pmatrix} \psi_R^* \\ -\psi_L^* \end{pmatrix}.$$

A equação 3.27 retorna o sistema de equações

$$\begin{aligned} (i\partial_t - \sigma \cdot p)\psi_R - m\psi_L &= 0, \\ (i\partial_t + \sigma \cdot p)\psi_L - m\psi_R &= 0, \end{aligned} \quad (3.29)$$

que pode ser desacoplado usando a segunda relação de 3.28:

$$\begin{aligned} (i\partial_t + \sigma \cdot p)\psi_L + im\sigma^2\psi_L^* &= 0, \\ (i\partial_t - \sigma \cdot p)\psi_R - im\sigma^2\psi_R^* &= 0. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Aqui podemos ver a semelhança da estrutura das equações acima com a equação encontrada em (3.17). Definimos, portanto, dois *spinors* de majorana em termos das componentes quirais,

$$\psi_L = \begin{pmatrix} \psi_L \\ -i\sigma^2\psi_L^* \end{pmatrix}, \quad \psi_R = \begin{pmatrix} i\sigma^2\psi_R^* \\ \psi_R \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

¹ ψ_L e ψ_R correspondem a férmions canhotos e destros de Weyl, respectivamente. A quiralidade está associada a assimetria entre a mão esquerda e direita que surge quando uma partícula gira em torno de seu eixo, conforme veremos na seção seguinte.

O termo de massa nas equações 3.30 reúne partículas e antipartícula de maneira que a conservação da carga não é obedecida, dada a igualdade entre ambas. A propriedade de carga das partículas de Majorana está associada à simetria de calibre discutida no capítulo anterior, em que a invariância da equação de Dirac sob uma transformação de calibre é mostrada. Ao analisar as transformações de Poincaré² para *spinor* de Dirac e de seu conjugado de carga, Majorana propõe uma alteração na equação de Dirac 2.114 através da inclusão do termo $m_M \psi_c(x)$:

$$i\gamma^\mu [\partial_\mu + iqA_\mu(x)]\psi(x) - m\psi(x) - m_M \psi_c(x) = 0, \quad (3.32)$$

Na qual o *spinor* conjugado de carga é definido como

$$\psi_c(x) = i\gamma^2 \psi^*(x). \quad (3.33)$$

Se aplicarmos uma transformação de calibre A'_μ na expressão acima, teremos

$$i\gamma^\mu [\partial_\mu + iqA'_\mu(x)]\psi'(x) - m\psi'(x) - m_M \psi'_c(x) = 0, \quad (3.34)$$

onde o *spinor* se transforma de acordo com

$$\psi'(x) = e^{-iq\chi(x)} \psi(x), \quad (3.35)$$

e seu conjugado de carga,

$$\psi'_c(x) = e^{iq\chi(x)} \psi_c(x). \quad (3.36)$$

Substituindo os *spinors* definidos acima em 3.34, os termos exponenciais não são cancelados, de modo que a equação não mantém a forma de 3.32 e conseqüentemente a invariância de calibre é perdida devido a inclusão do termo adicional. O único modo de preservar essa invariância é tornar $q = 0$, ou seja, é necessário tornar a carga elétrica da partícula nula, o que resulta na equação

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) - m_M \psi_c(x) = 0. \quad (3.37)$$

Para além da carga, a mudança proposta por Majorana tem implicações profundas na estrutura da teoria. O princípio de superposição é quebrado parcialmente, já que a equação de Dirac original admite para ψ soluções complexas e suas combinações lineares, enquanto a

² As transformações de Poincaré constituem um conjunto de simetrias fundamentais que descrevem o comportamento de leis físicas em diferentes sistemas de referência inerciais. Elas combinam as transformações de Lorentz, e as transformações de translação no espaço e no tempo.

proposta por Majorana permite apenas soluções reais (devido à presença do *spinor* conjugado ψ_c). Os termos de massa da equação acima podem ser combinados num termo único m e os *spinores* ψ, ψ_c podem ser escritos em termo de um *spinor* único, em um processo detalhado em (Arodz, 2020). Ao fazer isso, iremos obter a equação de Majorana na forma equivalente à de Dirac mostrada em 3.4.

3.2 Formalismo de operadores

É interessante tratar de relações relativísticas através do formalismo da segunda quantização, uma abordagem da mecânica quântica que lida com sistemas de muitas partículas interagentes. Em vez de tratarmos partículas individuais por meio de funções de onda da primeira quantização, utilizaremos operadores que criam e destroem partículas em determinados estados quânticos. Nesse sentido, definimos o operador de criação de férmions a^\dagger e de aniquilação a , que obedecem às relações de anticomutação:

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij}, \quad (3.38)$$

$$\{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0. \quad (3.39)$$

Podemos então definir um operador responsável pela criação de férmions de Majorana γ , que por sua vez, obedece as relações ligadas à álgebra de Clifford:

$$\gamma^\dagger = \gamma, \quad \gamma^2 = 1. \quad (3.40)$$

$$\{\gamma_i, \gamma_j\} = 2\delta_{ij}. \quad (3.41)$$

Os operadores a^\dagger e a podem então ser escritos em termos do operador γ , na forma

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma_1 + i\gamma_2), \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma_1 - i\gamma_2). \quad (3.42)$$

As relações acima nos dizem que, para a criação de um férmion único, é preciso haver uma superposição de dois operadores de Majorana que seguem a relação de anticomutação. A linguagem de operadores da segunda quantização é o formalismo mais utilizado para definir Hamiltonianos de partículas ou quasipartículas em estruturas de semicondutores e supercondutores, conforme veremos na seção seguinte (Alicia, 2010).

3.3 Aplicações e perspectivas dos férmions de Majorana

Os resultados de Majorana, publicados há 85 anos, permaneceram inexplorados por algumas décadas, até que a relevância destes se fez presente em áreas diversas da física, com aplicações teóricas e experimentais que discutiremos ao longo dessa seção.

- **Física de Neutrinos:** Uma das primeiras possibilidades de utilização desses férmions, apresentada pelo próprio Majorana (Majorana, 1937), foi o estudo de neutrinos, uma categoria de férmions que interagem apenas via interação eletrofraca e gravitacional. No fim da década de 1930, tais partículas eram ainda uma mera hipótese formulada por Pauli para explicar o decaimento beta, e sua verificação experimental se deu apenas em 1956 (Cowan *et al.*, 1956).

Dada a neutralidade de carga elétrica dos neutrinos, especulou-se que eles poderiam ser partículas de Majorana, uma ideia que perdeu força quando surgiram evidências experimentais da distinção entre o neutrino e o antineutrino (Wilczek, 2009). Mais especificamente, essa distinção está associada com a lei de conservação do número leptônico, princípio de conservação que assegura que o número de léptons³ (n_l) e antiléptons ($n_{\bar{l}}$) em uma reação de partículas deve ser constante, ou seja: $L = n_l - n_{\bar{l}}$. Naturalmente, se neutrinos diferem de anti-neutrinos, eles não podem ser categorizados como férmions de Majorana.

Entre o fim da década de 1990 e começo dos anos 2000, experimentos indicaram um fenômeno interessante: neutrinos podem mudar de um tipo (ou de sabor) para outro à medida que viajam no espaço (Bahcall *et al.*, 1998). Tal condição foi chamada de oscilação de neutrinos e ocorre quando, por exemplo, um neutrino do elétron emitido pelo Sol se converte em um neutrino do múon ao chegar a Terra. Tal descoberta abriu espaço para questionar se a diferença entre neutrinos e suas antipartículas é, de fato, verdadeira.

Analisando o decaimento de mésons π ,⁴ podem ser gerados neutrinos ν_e e antineutrinos $\bar{\nu}_e$ segundo as reações (Fazzini *et al.*, 1958):



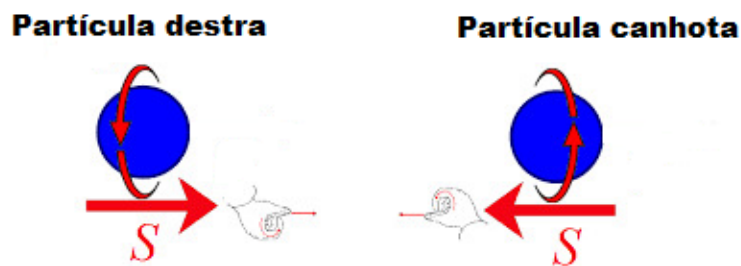
Nesse caso, uma justificativa apontada para $\nu_e = \bar{\nu}_e$ está na suposição de que o neutrino e seu antineutrino seriam distinguidos apenas por um estado de movimento, devido a

³ Léptons são uma classe de partículas subatômicas a qual pertencem elétrons (e), neutrinos (ν), múons (μ) e táons (τ)

⁴ Os píons ou mésons pi são sub-partículas associadas a interação nuclear forte, sendo compostas por quarks e antiquarks. Elas dividem-se em três tipos: π^0, π^+ , e π^- .

propriedade física denominada quiralidade, explicada na Figura 3. Consequentemente, poderíamos ter uma partícula com duas possíveis quiralidades, porém equivalente a sua antipartícula. Ainda não sabemos que tipo de férmions os neutrinos são de fato, porém, caso sejam férmions de Majorana, poderíamos explicar características ainda obscuras dos neutrinos, como o fato de sua massa ser muito pequena em comparação a outras partículas. Também teríamos como implicação a permissão de processos que violam a conservação do número leptônico, como o duplo decaimento beta. (Brofferio *et al.*, 2019)

Figura 3 – A quiralidade se associa ao *spin* S (em vermelho) de uma partícula. Se as partículas giram em sentido indicado pela mão direita, diz-se que ela tem helicidade positiva ou simplesmente destra, e se o giro ocorre de acordo com a mão esquerda, sua helicidade é negativa ou canhota. A quiralidade é determinada observando se a partícula se transforma numa representação de mão esquerda ou de mão direita.



Fonte: da Motta (2020, Adaptada).

- **Supersimetria:** Para além dos neutrinos, uma outra aplicabilidade pode ser discutida no contexto de altas energias. A supersimetria é uma teoria física que estende o modelo padrão de partículas ao propor a existência de uma simetria entre partículas de *spin* inteiro e de *spin* semi-inteiro. Sua formulação tem o intuito de esclarecer certas limitações do modelo padrão, como o problema da hierarquia entre as forças e a instabilidade da massa do bóson de Higgs, além de ser uma proposta de unificação das quatro interações fundamentais (Martin, 2010).

Se a supersimetria for válida, então teríamos para cada bóson um férmion correspondente, também chamado de superparceiro, e vice-versa. Como exemplo, um elétron dentro desta teoria teria um superparceiro, um bóson denominado seléctron. Nesse cenário, podemos ter uma simetria perfeita quando as partículas tem as mesmas propriedades (massa e números quânticos), excetuando o *spin*, ou pode haver uma quebra na simetria que permite que as partículas parceiras possuam massas distintas.

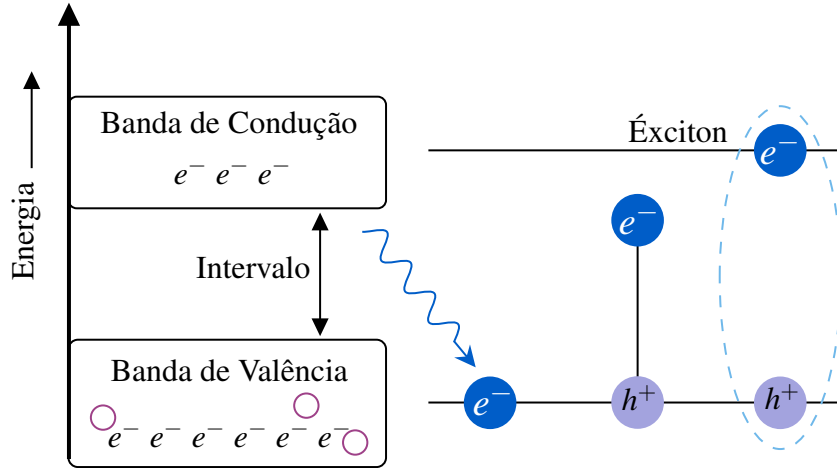
Quando consideramos o fóton, bóson mediador da força eletromagnética com carga e massa nula, seu parceiro supersimétrico, denominado fotino, deve ser equivalente à sua própria anti-partícula para espelhar as propriedades do bóson. Pelas mesmas razões, outras partículas hipotéticas, dentro da supersimetria (como o neutralino, gauginos neutros e higgsinos) poderiam ser classificadas como férmions de Majorana (Feng, 2010). Tais partículas, em especial o neutralino, mostram relevância especial na cosmologia, já que estas são possíveis candidatas a constituírem a matéria escura do universo.

- **Matéria Condensada** A hipótese de Majorana ganhou relevância nas últimas décadas em uma área totalmente distinta de sua origem: a física do estado sólido. Divergindo da abordagem em altas energias, em sistemas do estado sólido os férmions de Majorana não seriam partículas fundamentais propriamente ditas, e sim o que denominamos de quasipartícula, conceito que trata das interações coletivas entre partículas que se comportam como entidades independentes, simplificando a descrição de fenômenos em materiais complexos (Zhang *et al.*, 2018).

Em semicondutores, quando os elétrons do material recebem energia e deixam a banda de valência para a banda de condução, temos o surgimento de um buraco positivamente carregado que forma um estado ligado com este elétron por meio da força de Coulomb (Scholes *et al.*, 2006). Tal configuração caracteriza a quasipartícula nomeada excíton, esquematizada na Figura 4. O par elétron-buraco seria nesse caso um análogo a interação matéria-antimatéria, o que nos permitiria explorar a possibilidade de quasipartículas comportarem-se como férmions de Majorana. Apesar dos excítons terem carga elétrica total nula e serem constituídos por partículas fermiônicas, eles podem assumir configurações de energia que violam o princípio da exclusão de Pauli, o qual férmions por definição obedecem. Desse modo, essas quasipartículas estão associadas a bósons e não poderiam ser excitações de Majorana propriamente ditas (Wilczek, 2009). Todavia, o acoplamento elétron-buraco configura o que chamaremos de ligação tipo excíton, conceito que pode ser aplicado a sistemas fermiônicos com a condição de Majorana e será abordado nos capítulos posteriores.

Além das possibilidades em semicondutores, o estudo da supercondutividade em matéria condensada traz perspectivas otimistas para a detecção das partículas de Majorana. Nos materiais supercondutores em baixas temperaturas, temos a formação dos chamados pares de Cooper, uma ligação entre elétrons mediada por fônons (Kadin, 2007). Estes

Figura 4 – Formação de Excítons em um semiconductor - Ao deixar a banda de valência, o elétron excitado liga-se à lacuna deixada por ele, criando um par de cargas opostas que se comporta como partícula. A energia de ligação é menor que a energia necessária para separar completamente o elétron da banda de condução e o buraco da banda de valência, "aprisionando" o par.



Fonte: Elaborada pela autora.

pares se condensam num estado quântico único, formando um condensado que origina as propriedades características do estado de supercondutividade. Nesse condensado, pares podem ser adicionados ou retirados sem alteração em suas propriedades, de modo que não há conservação do número de elétrons e nem da carga. Quando os pares de Cooper interagem entre si, são geradas excitações de baixa energia denominadas quasipartículas de Bogoliubov (Aguado, 2017). Para obter a descrição dinâmica dessas excitações, começamos com um Hamiltoniano genérico que considera o emparelhamento em um supercondutor

$$H = \int \left[H_0(c_{r,\uparrow}^\dagger c_{r,\uparrow} + c_{r,\downarrow}^\dagger c_{r,\downarrow}) + (\Delta(r)c_{r,\uparrow}^\dagger c_{r,\downarrow}^\dagger) + h.c \right], \quad (3.44)$$

no qual c_r^\dagger e c_r são operadores de criação e aniquilação de elétrons com *spin up* e *spin down*, H_0 é a matriz que representa o hamiltoniano de um elétron (energia cinética e potencial), $\Delta(r)$ é o potencial do par supercondutor e $h.c$ representa o hermitiano conjugado.

A função de onda Ψ desse sistema é dada em termos dos operadores c_r^\dagger e c_r , através do

spinor 4×1 de Nambu ⁵:

$$\Psi(r) = \begin{pmatrix} c_{r,\uparrow} \\ c_{r,\downarrow} \\ -c_{r,\uparrow}^\dagger \\ c_{r,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \Psi(r) \\ i\sigma^y \Psi^*(r) \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

O uso dessa representação nos permite escrever o hamiltoniano 3.44 de forma mais compacta,

$$H = \frac{1}{2} \int \Psi^\dagger(r) H_{BdG}(r) \Psi(r) dr. \quad (3.46)$$

O termo H_{BdG} corresponde ao Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes, dado pela matriz

$$H_{BdG} = \begin{pmatrix} H_0(r) & \Delta(r) \\ \Delta^*(r) & -\sigma^y H_0^*(r) \sigma^y \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

Dada a definição do hamiltoniano, chegamos na relação de Bogoliubov-de Gennes, que apresenta a mesma forma da equação de Schrödinger

$$H_{BdG}(r) \phi_n(r) = E_n \phi_n(r), \quad (3.48)$$

na qual

$$\phi_n(r) = [u_{n\uparrow}(r), u_{n\downarrow}(r), v_{n\uparrow}(r), v_{n\downarrow}(r)]^T. \quad (3.49)$$

O hamiltoniano é, portanto, diagonalizável e se torna

$$H = \frac{1}{2} \sum_n E_n a_n^\dagger a_n, \quad (3.50)$$

onde a_n são operadores que originam quasipartículas BdG, na forma:

$$a_n = \int \phi_n^\dagger(r) \Psi(r) dr = \int [u_{n,\uparrow}^* c_{r,\uparrow} + u_{n,\downarrow}^* c_{r,\downarrow} - v_{n,\uparrow}^* c_{r,\downarrow}^\dagger + v_{n,\downarrow}^* c_{r,\uparrow}^\dagger] dr. \quad (3.51)$$

A dimensão do Hamiltoniano pode ser reduzida através de uma restrição na simetria nos autoestados, aplicando-se a operação P

$$P H_{BdG}(r) P^\dagger = -H_{BdG}(r), \quad (3.52)$$

⁵ O *spinor* de Nambu é uma representação criada por Yoichiro Nambu para descrever a condensação de pares de Cooper em supercondutores (Lutchyn *et al.*, 2011).

na qual $P = CK$, com C representando o operador conjugação de carga e K o operador de conjugação complexa, está associada à simetria do par elétron-buraco. Isso nos diz que, se houver uma solução ϕ_n com energia positiva E_n , também teremos uma solução ϕ_m com energia $E_m = -E_n$, que obedecem a

$$\phi_m(r) = P\phi_n(r). \quad (3.53)$$

Temos também que $a_n^\dagger = a_m$, ou seja, criar uma quasipartícula de Bogoliubov de energia E é equivalente a destruir uma outra de energia $-E$. Temos aqui uma conexão com as propriedades da equação de Majorana, de modo que o *spinor* de Nambu definido em 3.45 é de fato uma versão do *spinor* de Majorana escrito em operadores, satisfazendo a condição,

$$\Psi(r) = P\Psi(r) = C\Psi^*(r). \quad (3.54)$$

Observe que a representação do *spinor* de Nambu não satisfaz a condição de realidade de Majorana propriamente dita, mas sim uma pseudo-realidade mostrada na relação acima. Contudo, a equação 3.54 pode ser convertida em uma condição de realidade através de uma transformação unitária que é discutida nas referências (Aguado, 2017) e (Jackiw, 2011), tornando essa representação equivalente à de Majorana. As quasipartículas descritas por esse formalismo podem se ligar a um defeito topológico em um estado de energia zero, criando assim os estados ligados de Majorana ou os Modos Zero de Majorana (MZM), tópico que vem sendo amplamente discutido na teoria da matéria condensada (Lutchyn *et al.*, 2018b).

Os MZMs associam-se a supercondutividade topológica, um estado especial dos supercondutores no qual os pares de Cooper possuem propriedades topológicas distintas que os tornam materiais resistentes a perturbações, variações na temperatura e desordens locais. Nesses materiais podem surgir defeitos topológicos (como vórtices quânticos ou descontinuidades em sua estrutura cristalina) que permitem a formação de estados de energia nula e de carga neutra que são próprios dos MZMs. Um modelo teórico proposto por Alexei Kitaev permite detectar e analisar o comportamento dos MZMs em um supercondutor topológico unidimensional e sem *spin*⁶, por meio de uma cadeia de N sítios fermiônicos que podem ser descritos por operadores de Majorana (Kitaev, 2001). Outra possibilidade de detecção foram exploradas no trabalho de (Fu *et al.*, 2008), no qual a interface entre

⁶ O termo sem *spin* refere-se ao emparelhamento de pares de Cooper com apenas um grau de liberdade para o *spin*, em vez dos dois graus usuais.

supercondutores e isolantes topológicos apresentaria vórtices que permitem a formação de estados ligados de Majorana.

Outro aspecto fomenta o interesse pelos MZMs: a estatística não-abeliana a qual eles obedecem. Diferente de férmions, estamos tratando nesse caso de ânions não-abelianos, para os quais estados podem ser trocados entre si, alterando a energia do sistema numa configuração que depende apenas da ordem de troca⁷. Essa estatística pode ser usada na criação de *qubits* topologicamente protegidos, resistentes a erros locais e a decoerência (perda de informação quântica devido a interações externas), além de capacitar operações quânticas não triviais, fatores que tornam os MZMs candidatos promissores para a realização de uma computação quântica topológica (Sarma *et al.*, 2015).

Discutida a relevância das aplicações, abordaremos no capítulo seguinte um outro conceito atrelado à física do estado sólido e matéria condensada: a massa efetiva dependente da posição, uma ideia que será utilizada neste trabalho para analisar a dinâmica de partículas de Majorana.

⁷ Ânions não-abelianos são quasipartículas que não comutam sobre operações de troca.

4 SISTEMAS COM MASSA DEPENDENTE DA POSIÇÃO

Quando descrevemos fenômenos físicos por meio de equações, sejam elas clássicas ou quânticas, a massa de corpos ou partículas é geralmente tomada como uma grandeza constante, ou invariante. Porém, em certos sistemas físicos surge o conceito de uma massa que altera-se com o tempo, em função de uma distância, gerando uma Massa Dependente da Posição (MDP). A relevância desse conceito é explorada em múltiplos contextos físicos, como, por exemplo no estudo de osciladores de massa variável (Flores; Solovey; Gil, 2003), na evolução de sistemas binários (Hadjidemetriou, 1967), em efeitos de perda de massa galáctica (Richstone *et al.*, 1982), na oscilação da massa de neutrinos (Bethe, 1986) e especialmente na teoria de semicondutores (Young, 1989).

Sistemas com MDP podem ser tratados dentro de um conceito mais amplo denominado de massa efetiva, uma simplificação utilizada em matéria condensada para descrever o comportamento de portadores de carga em um sólido cristalino que nos ajuda a compreender o transporte eletrônico em materiais. Em semicondutores podemos ter variações da massa efetiva de elétrons e buracos devido à estrutura cristalina, composição química e a interação com outras partículas e a rede atômica, ou seja, partículas ou excitações de regiões diferentes podem se comportar como se tivessem massas distintas. Nos deteremos a analisar neste trabalho casos em que essa variação se dá em função de uma posição, e para explorar sistemas como esse iniciaremos com uma revisão sobre a aproximação de massa efetiva e sua aplicação em estado sólido, principalmente em semicondutores.

4.1 O tensor de massa efetiva

Os portadores de carga em cristais estão arranados no que chamamos de bandas de energia, estruturas compostas por uma banda de valência e de condução que se encontram separadas por um intervalo, nomeado de lacuna ou *gap*, na qual a existência de orbitais eletrônicos não é permitida. Os semicondutores se caracterizam por possuir uma banda de valência preenchida e uma banda de condução vazia em $T = 0K$, espaçadas por um *gap* de energia em torno de $E_g \approx 2eV$, o que resulta em uma condutividade elétrica intermediária entre a dos metais e a de isolantes (Rezende, 2004).

A análise dessas estruturas nos leva a teoria de bandas, que nos diz que o movimento de elétrons em um potencial periódico para distâncias maiores que o espaçamento da rede pode

diferir do movimento do mesmo no vácuo. A ideia de massa efetiva é usada para simplificar a estrutura de bandas, assumindo que os elétrons comportam-se como partículas livres que possuem uma massa distinta m^* de sua massa usual m_e (Grundmann, 2010).

A massa efetiva associa-se diretamente a uma energia $E(\vec{k})$, também chamada de dispersão, que depende do vetor de onda k e pode ser determinada em regiões distintas do espaço recíproco. Se considerarmos uma partícula livre, a relação entre energia e momento para os casos clássico e quântico tem a forma

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (4.1)$$

ou seja, temos uma curva de dispersão em função do momento com comportamento de parábola. Na maioria dos semicondutores as estruturas de bandas também apresentam dispersões aproximadamente parabólicas, conforme apresentado na figura 5. Para pontos de máximo e mínimo da dispersão, isto é, para elétrons com valores de energia mais altos na banda de valência e mais baixos na banda de condução, a energia aproximada tem a forma

$$E \approx E_0 + \frac{\hbar^2 (k - k_0)^2}{2m^*}, \quad (4.2)$$

onde E_0 e k_0 correspondem a energia e o vetor de onda definidos nos extremos da banda. Assim, podemos dizer que os elétrons respondem às forças geradas por interações com campos elétricos e magnéticos da mesma forma como o fariam no vácuo, embora com a distinção na massa. A aproximação utilizada em 4.2 trata a estrutura de bandas como isotrópica¹ e parabólica, o que não é válido para a descrição de materiais mais complexos, como cristais com impurezas ou defeitos topológicos. Nesses casos, a massa m^* deve ser precisamente definida, o que é feito através do tensor inercial de massa efetiva.

Para obter esse tensor, considere que a velocidade da partícula livre, também chamada de velocidade de grupo v_g , corresponde a velocidade de fase do pacote de onda e se relaciona a energia e o momento de acordo com

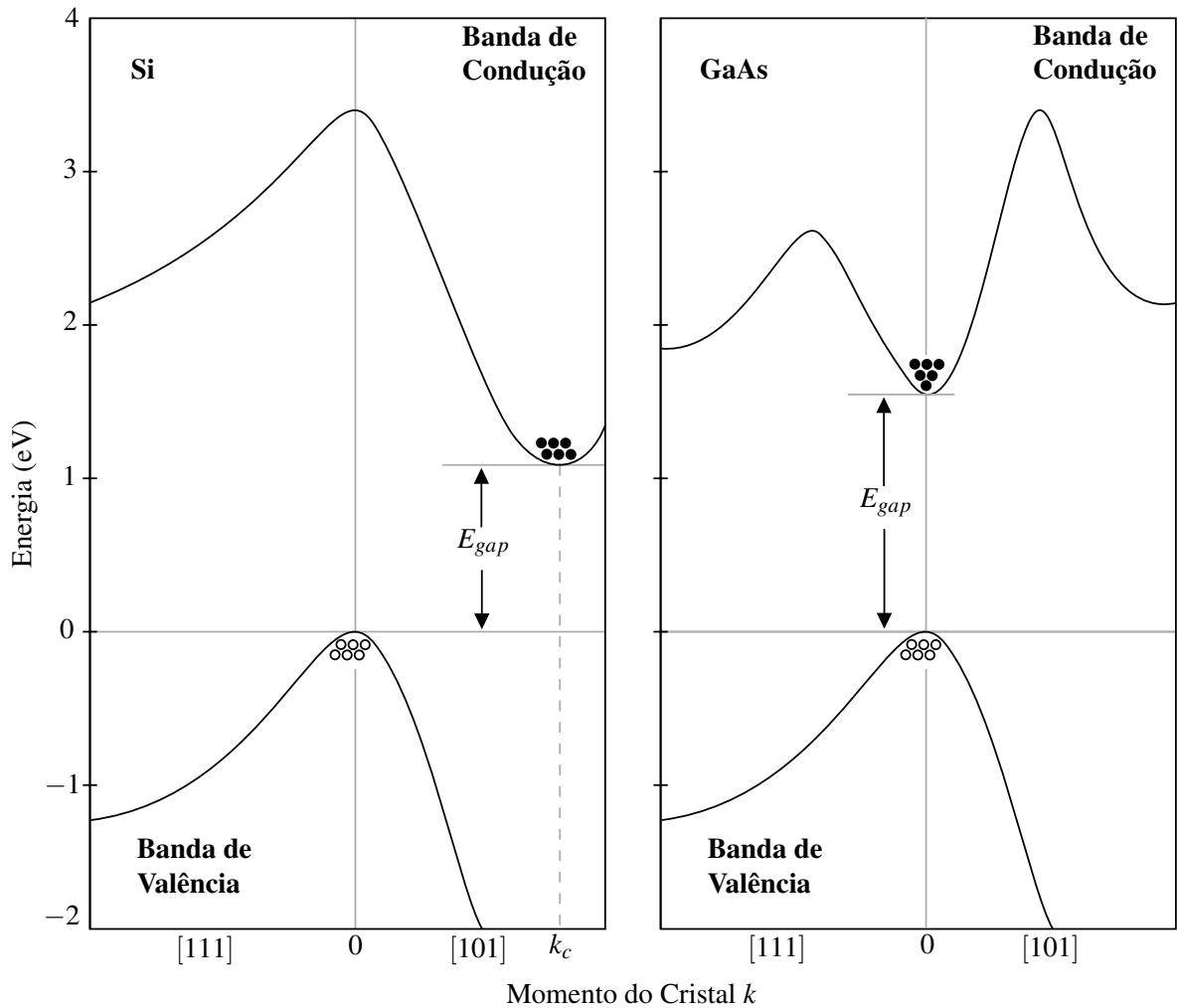
$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (4.3)$$

Se uma força externa F age sobre o pacote de onda, teremos um trabalho exercido pela mesma que pode ser escrito como

$$dE = F \cdot dx = F v_g dt, \quad (4.4)$$

¹ Assumir que as bandas de energia são isotrópicas significa considerar que as propriedades eletrônicas do material são uniformes em todas as direções.

Figura 5 – Bandas de energia para o Silício (Si) e o Arseneto de Gálio (GaAs), ambos materiais semicondutores - A relação de dispersão tem comportamento parabólico nas proximidades dos pontos extremos.



Fonte: Elaboração própria.

de modo que

$$F = \frac{1}{v_g} \frac{dE}{dt}. \quad (4.5)$$

Utilizando 4.3 na equação acima, a força se torna

$$F = \hbar \frac{dk}{dt}, \quad (4.6)$$

uma relação importante que determina a força externa exercida sobre o elétron em um cristal. Podemos utilizar essas definições para descrever o movimento de ambos os tipos de portadores de carga nas estruturas de banda, isto é, elétrons e buracos. Para o caso de buracos, entretanto, obteríamos as mesmas expressões para a energia e vetor de onda com a distinção de sinais opostos (Kittel, 2005). Se derivarmos a expressão da velocidade em 4.3 em relação ao tempo,

iremos obter uma aceleração na forma

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right). \quad (4.7)$$

Considerando que a energia também pode ser escrita em termos da velocidade angular da onda $\omega(k)$, através da expressão $E(k) = \hbar\omega(k)$, reescrevemos o lado direito da equação acima como

$$\frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{d}{dt} [\nabla_k \omega(k)] = \nabla_k \frac{d}{dt} \omega(k), \quad (4.8)$$

e aplicamos a regra da cadeia para obter a expressão para a aceleração

$$a = \nabla_k \left[\frac{dk}{dt} \cdot \nabla_k \omega(k) \right]. \quad (4.9)$$

Recordando a definição de força de 4.6 e substituindo $\omega(k)$ pela energia $E(k)$ na equação acima, teremos

$$a = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_k [F \cdot \nabla_k E(k)]. \quad (4.10)$$

Supondo a força F uniforme, podemos dizer que $\nabla_k F = 0$, de modo que nos resta apenas

$$a = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_k [\nabla_k E(k)] \cdot F, \quad (4.11)$$

expressão que pode ser comparada a segunda lei de Newton, na qual a massa inercial $m = a^{-1}F$ nesse caso torna-se uma quantidade tensorial definida como

$$m^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_k [\nabla_k E(k)]. \quad (4.12)$$

Na equação acima, o termo $\nabla_k [\nabla_k E(k)]$ corresponde a matriz hessiana² da energia no espaço recíproco. As componentes do tensor são dadas por

$$m_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_k [\nabla_k E(k)]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (4.13)$$

Nesse caso, a força e a aceleração não são colineares, de modo que a relação $F = m^* a$ (o símbolo $*$ é utilizado usualmente para especificar que tratamos de uma massa efetiva) se torna uma equação tensorial. Para um elétron em um cristal em 3 dimensões, por exemplo, teremos uma massa efetiva na forma

$$\frac{1}{m^*} = \begin{pmatrix} m_{xx}^{-1} & m_{xy}^{-1} & m_{xz}^{-1} \\ m_{yx}^{-1} & m_{yy}^{-1} & m_{yz}^{-1} \\ m_{zx}^{-1} & m_{zy}^{-1} & m_{zz}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

² A matriz hessiana é uma matriz quadrada que contém as derivadas parciais de segunda ordem de funções ou campos escalares, descrevendo a sua curvatura local.

Na eq. 4.13 podemos perceber que o termo m_{ij-1} é dependente da curvatura da energia, de modo que, quanto maior a curva de dispersão, menor será a massa efetiva do portador de carga. É válido ressaltar que existem pontos singulares para a massa, nos quais ela pode tender a zero ou ao infinito. No caso do grafeno, por exemplo, a relação de dispersão é linear e a estrutura de bandas é modelada via uma equação tipo Dirac para elétrons cuja massa efetiva é nula. A explicação para a ausência da massa ou a divergência para um valor infinito pode ser compreendida através dos conceitos de massa efetiva transversal e longitudinal, ligadas a variação do momento perpendicular ou paralela em relação à direção da força. Mais detalhes sobre essa classificação podem ser encontrados no artigo de (Ullal *et al.*, 2019). O tensor de massa efetiva, portanto, desempenha um papel importante na descrição dinâmica de elétrons e buracos, gerando equações semelhantes às relações para partículas livres que são precisamente aplicáveis a semicondutores (Ashcroft *et al.*, 2022).

4.2 O teorema da massa efetiva

Outro conceito associado ao tensor da seção anterior é o teorema de massa efetiva, um resultado fundamental para o estudo de propriedades eletrônicas e ópticas de materiais. Ele nos permite descrever o comportamento de elétrons em sólidos cristalinos diante de forças externas e perturbações que afetam a massa dos mesmos (Dresselhaus *et al.*, 2018). Demonstraremos o teorema para um caso mais simples, no qual a banda de energia do sólido é não-degenerada e a interação com a rede pode ser negligenciada. Começaremos por considerar que o movimento de elétrons numa estrutura cristalina é descrito através de funções ou estados de Bloch ³ que tem a forma

$$\Psi_{nk}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk}(\vec{r}), \quad (4.15)$$

na qual o vetor de onda \vec{k} é o momento e $u(\vec{r})$ é uma função com a mesma periodicidade do cristal. Temos então pacotes de onda compostos por autoestados que são soluções de equação de Schrödinger

$$H_0 \Psi(\vec{r}, t) = i \partial_t \Psi(\vec{r}, t), \quad (4.16)$$

onde a parte independente do tempo do hamiltoniano H_0 corresponde a

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}),$$

³ Tais funções satisfazem o teorema de Bloch, enunciado que define soluções para a equação de Schrödinger em potenciais periódicos na forma de ondas planas moduladas por funções periódicas.

com $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R}_n)$ correspondendo a um potencial periódico. Podemos escrever $\psi_n(\vec{r}, t)$ em termos dos estados de Bloch $\psi_{nk}(\vec{r})$

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \sum_k A_{n,k}(t) \psi_{nk}(\vec{r}) = \int A_{n,k}(t) \psi_{nk}(\vec{r}) d^3k. \quad (4.17)$$

O somatório se converte em uma integral em todo o espaço da zona de Brillouin ⁴, já que os valores permitidos de \vec{k} para um sólido estão espaçados por distâncias muito pequenas e portanto, podem ser tratados como um contínuo. Para um hamiltoniano H_0 independente do tempo, a função $A_{n,k}$ tem a forma

$$A_{n,k}(t) = A_{n,k} e^{-i\omega_n(\vec{k}t)}. \quad (4.18)$$

As equações acima aplicam-se para cristais perfeitos ou sistemas não-perturbados externamente. Por razões práticas, consideramos que estruturas cristalinas estão presentes em meios com perturbações (causadas por fatores como impurezas superficiais, defeitos de rede ou aplicações de campos externos) que podem ser tratadas através de aproximações de massa efetiva. Considerando agora um sistema perturbado, a relação 4.16 se torna

$$(H_0 + H') \psi_n(\vec{r}, t) = i \partial_t \psi_n(\vec{r}, t), \quad (4.19)$$

na qual H' corresponde ao hamiltoniano associado a perturbação. Colocando o pacote de onda definido em 4.17,

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \int A_{nk}(t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk}(\vec{r}) d^3k \quad (4.20)$$

na equação de Schrödinger e utilizando a solução de Bloch

$$H_0 e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk}(\vec{r}), \quad (4.21)$$

vamos obter

$$(H_0 + H') \psi_n(\vec{r}, t) = \int [E_n(k) + H'] A_{nk}(t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk}(r) d^3k = i \int \dot{A}_{nk}(t) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk}(r) d^3k. \quad (4.22)$$

Pelo teorema de Bloch, $E_n(\vec{k})$ é uma função periódica e pode ser expandida em uma série de Fourier

$$E_n(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}_l} E_{nl} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_l}, \quad (4.23)$$

⁴ A zona de Brillouin é uma região do espaço recíproco ou espaço k que representa o menor domínio repetitivo da estrutura de bandas em um sólido. A estrutura de bandas eletrônicas descreve como os níveis de energia dos elétrons em um cristal variam com o seu momento.

onde \vec{R}_l são vetores da rede cristalina. Trocando \vec{k} pelo momento $-i\vec{\nabla}$, teremos

$$E_n(-i\vec{\nabla}) = \sum_{\vec{R}_l} E_{nl} e^{\vec{R}_l \cdot \vec{\nabla}}. \quad (4.24)$$

$E_n(-i\vec{\nabla})$ pode ser considerada uma função arbitrária $f(\vec{r})$. Se fizermos uma expansão de Taylor do termo exponencial, obteremos

$$e^{\vec{R}_l \cdot \vec{\nabla}} f(\vec{r}) = [1 + \vec{R}_l \cdot \vec{\nabla} + (1/2)(\vec{R}_l \cdot \vec{\nabla})(\vec{R}_l \cdot \vec{\nabla}) + \dots] f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}_l). \quad (4.25)$$

Portanto, o efeito de $E_n(-i\vec{\nabla})$ em um estado de Bloch retornará

$$\begin{aligned} E_n(-i\vec{\nabla}) \psi_{nk}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{R}_l} E_{nl} \psi_{nk}(\vec{r} + \vec{R}_l) \\ &= \sum_{\vec{R}_l} E_{nl} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{nk}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) \psi_{nk}(\vec{r}), \end{aligned} \quad (4.26)$$

considerando que

$$\psi_{nk}(\vec{r} + \vec{R}_l) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} [e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{nk}(\vec{r})]. \quad (4.27)$$

Substituindo a relação 4.26 em 4.22:

$$\int [E_n(-i\vec{\nabla}) + H'] A_{nk}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{nk}(\vec{r}) d^3k = [E_n(-i\vec{\nabla}) + H'] \int A_{nk}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{nk}(\vec{r}) d^3k \quad (4.28)$$

ou seja,

$$[E_n(-i\vec{\nabla}) + H'] \psi_n(\vec{r}, t) = i \partial_t \psi_n(\vec{r}, t) \quad (4.29)$$

O resultado acima é chamado de teorema da massa efetiva. Aqui não temos mais o hamiltoniano H_0 mas sim um hamiltoniano efetivo proveniente da solução $E(k)$ para uma estrutura cristalina não-perturbada. Se considerarmos o caso de um elétron livre, isto é, $V(\vec{r}) = 0$,

$$E_n(-i\vec{\nabla}) \rightarrow -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m}. \quad (4.30)$$

Quando aplicamos esse teorema, assumimos que o valor de $E(-i\vec{\nabla})$ é conhecido através de cálculos teóricos ou de observações experimentais, de modo que, conhecido esse valor, podemos tratar as várias perturbações em uma estrutura cristalina ideal em termos de soluções de suas soluções de níveis de energia. Isso permite estudar sistemas sem recorrer ao hamiltoniano total, tornando a solução de massa efetiva um procedimento mais fácil do que aplicar a equação de Schrödinger original.

4.3 Massa dependente da posição em semicondutores de composição não-uniforme

Conforme as seções anteriores, o uso de aproximações de massa efetiva permite simplificar o tratamento de elétrons em sólidos, o que torna essa abordagem interessante para o estudo da estrutura de bandas de energia e transporte eletrônico em alguns tipos de semicondutores. A depender das propriedades apresentadas temos classificações distintas, como a pureza do material definindo se o semicondutor é intrínseco ou extrínseco, ou ainda a uniformidade do material ao longo de sua estrutura cristalina distinguindo semicondutores homogêneos e não-homogêneos (Yakout, 2020).

Nos tipos não-homogêneos temos a junção de materiais constituídos de partes com propriedades diferentes. Essa distinção nas características pode resultar de variações na composição química, na estrutura cristalina, na dopagem ou no processamento do próprio material. Entre os pertencentes a essa categoria estão semicondutores amorfos, gradualmente dopados e as heteroestruturas, que são compostas por camadas alternadas de materiais intrinsecamente diferentes. Neste último, especialmente relevante para este trabalho, a descrição dos portadores de carga requer o uso de Hamiltonianos com massas efetivas dependentes da posição (von Roos, 1983) que discutiremos a seguir.

Neste contexto abordaremos o teorema de Wannier-Slater, enunciado que estabelece uma relação entre as funções de onda dos elétrons em um sólido cristalino e as funções de onda em átomos individuais. Este resultado é válido para semicondutores homogêneos e de composição química uniforme, mas pode ser estendido a materiais não uniformes. O teorema demonstra que elétrons na banda de condução obedecerão à equação de Schrödinger na forma

$$[E_c(-i\vec{\nabla}) + U(\vec{r})]F_c(\vec{r}, t) = i\hbar\partial_t F_c(\vec{r}, t), \quad (4.31)$$

expressão equivalente ao teorema de massa efetiva encontrado em 4.29, na qual $E_c(\vec{k})$ é a energia da banda de condução do cristal, $U(\vec{r})$ é uma perturbação gerada externamente e $F_c(\vec{r}, t)$ corresponde a uma função envelope, que pode ser melhor compreendida retornando a expressão 4.15. Iremos modificar esta relação especificando uma região na zona de Brillouin, isto é, localizando as funções de onda do espaço recíproco em $k = k_0$ de modo que

$$\begin{aligned} \Psi_{nk}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk}(\vec{r}) \simeq e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk_0}(\vec{r}) \\ &= e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot\vec{r}} \psi_{nk_0}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Observe que $u_{nk}(\vec{r}) \simeq u_{nk_0}(\vec{r})$ depende apenas de \vec{k} . Utilizando a definição do pacote de onda $\psi_r(\vec{r}, t)$ de 4.17, temos

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \int A_{nk}(t) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot\vec{r}} \psi_{nk_0}(\vec{r}) d^3k = F(\vec{r}, t) \psi_{nk_0}(\vec{r}), \quad (4.33)$$

logo, a função $F(\vec{r}, t)$, também chamada de função amplitude, é dada por

$$F(\vec{r}, t) = \int A_{nk}(t) e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot\vec{r}} d^3k. \quad (4.34)$$

Definida a função envelope, retornaremos agora a relação 4.31. Considerando essa expressão para o caso mais simples da aproximação de massa efetiva ($\vec{k} = 0$), teremos

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m(\vec{r})} \vec{\nabla}^2 + E_c(0) + U(\vec{r}) \right] F(\vec{r}, t) = i\hbar \partial_t F(\vec{r}, t). \quad (4.35)$$

Aqui, a energia da banda de condução se torna $E(0) + U(\vec{r})$. Como estamos interessados na ideia de uma massa efetiva em função da posição $m(\vec{r})$, analisaremos apenas o termo cinético da expressão acima. Conforme (Gora *et al.*, 1967; von Roos, 1983), pode-se definir um operador energia cinética \hat{T} como:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m(\vec{r})} \vec{\nabla}^2. \quad (4.36)$$

Observe que \hat{T} não é hermitiano. Isso representa um problema, pois a hermiticidade de um operador garante que ele representa de fato um observável físico na mecânica quântica, com autovalores reais e autofunções que constituem um conjunto completo⁵. Posteriormente, a equação de Schrödinger para a função envelope foi modificada e uma nova expressão para o operador \hat{T} foi derivada (Gora *et al.*, 1969):

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{4} \left[\frac{1}{m(\vec{r})} \vec{\nabla}^2 + \vec{\nabla}^2 \frac{1}{m(\vec{r})} \right], \quad (4.37)$$

que é, de fato, hermitiana. Outra possibilidade foi encontrada por (Zhu *et al.*, 1983) considerando modelos de *Tight-Binding* (TB), ou ligação forte,⁶ nos quais a função de onda de um elétron é expressa como combinação linear das funções de orbitais atômicos. Nesse modelo, temos um operador T

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \vec{\nabla}^2 \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}}, \quad (4.38)$$

⁵ A hermiticidade é uma condição imposta ao operador Hamiltonianos para garantir que o seu espectro de energia seja real e a evolução temporal seja unitária (preservação da probabilidade). Contudo, em outra formulação da Mecânica Quântica, essas mesmas condições podem ser atingidas se a simetria paridade-tempo for satisfeita, conforme demonstrado por (Bender, 2007)

⁶ O modelo TB é uma aproximação usada para o cálculo da estrutura de banda, descrevendo elétrons fortemente ligados interagindo com os estados e os potenciais dos átomos circundantes do sólido.

derivado a partir do movimento de um elétron entre os átomos da rede cristalina. A definição acima torna a aplicação do operador T mais precisa em sistemas de massa efetiva dependente da posição. Entretanto, (von Roos, 1983) trouxe a hipótese de que o uso de MDP para esse operador é conflitante com o teorema de Bargmann, que será discutida na seção seguinte.

4.4 Teorema de Bargmann e sistemas com MDP

De acordo com as seções anteriores, vimos que aproximações de massa efetiva permitem que a dinâmica de elétrons de Bloch sujeitos a perturbações seja descrita com menos complexidade, devido ao potencial periódico da rede. A aplicação dessa aproximação foi inicialmente utilizada tanto em cristais homogêneos quanto em materiais não-homogêneos com distorções, estrutura ou composições espacialmente variáveis, até a questão ser analisada através do teorema de Bargmann. Sob a perspectiva deste teorema, para sistemas quânticos com uma determinada energia total, existe um subconjunto de estados que se comportam da mesma forma que estados clássicos. Como consequência desse princípio, o espectro da massa estaria restrito, tornando a equação de Schrödinger aplicável apenas para partículas de massa constante.

Para compreender essa restrição, começaremos por considerar que a equação de Schrödinger e a equação de massa efetiva 4.29 apresentam a mesma forma, mas possuem significados físicos distintos, conforme veremos ao longo dessa seção. Seguiremos a abordagem de (Kawamura *et al.*, 1988), tratando a equação de Schrödinger não-relativística para um estado quântico $|\psi\rangle$

$$\hat{T}|\psi\rangle = i\hbar\partial_t|\psi\rangle, \quad (4.39)$$

onde \hat{T} é o operador energia cinética definido em 4.36. A correspondência entre as descrições clássica e quântica implicam que as representações das coordenadas de \hat{T} e $|\psi\rangle$ são equivalentes em qualquer referencial inercial. Considere um referencial cartesiano F no qual uma partícula tem coordenadas $\vec{r} = (x, y, z)$ e um outro referencial F' no qual a mesma partícula tem coordenadas $\vec{r}' = (x', y', z')$. A relação entre F e F' é dada por

$$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}t + \vec{\alpha}, \quad (4.40)$$

com $\alpha = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ sendo um vetor constante. O estado $|\psi\rangle$ pode ser descrito em termos de suas projeções em ambos os referenciais

$$\psi_F(\vec{r}, t) = \langle r, F | \psi \rangle, \quad \psi_{F'}(\vec{r}, t) = \langle r, F' | \psi \rangle. \quad (4.41)$$

Essa equivalência entre as duas descrições exige que

$$\hat{T}\psi_F(\vec{r}, t) = i\hbar\partial_t\psi_F(\vec{r}, t) \quad (4.42)$$

$$\hat{T}\psi_{F'}(\vec{r}', t) = i\hbar\partial_t\psi_{F'}(\vec{r}', t), \quad (4.43)$$

e conseqüentemente, que as duas funções de onda sejam interpretadas fisicamente do mesmo modo. A densidade de probabilidade P deve ser a mesma, representada por

$$P = |\psi_F(\vec{r}, t)|^2 = |\psi_{F'}(\vec{r} - \vec{v}t + \vec{\alpha}, t)|^2, \quad (4.44)$$

de modo que, podemos relacionar ψ_F e $\psi_{F'}$ na forma

$$\psi_F(\vec{r}, t) = e^{iA(\vec{r}, t)}\psi_{F'}(\vec{r} - \vec{v}t + \vec{a}, t) \quad (4.45)$$

na qual a função A é real e deve ser independente do estado ψ . Substituindo 4.45 em 4.42, a forma da equação de Schrödinger se mantém somente se

$$A(\vec{r}, t) = \frac{m}{\hbar}(\vec{v} \cdot \vec{r} - \frac{1}{2}v^2t). \quad (4.46)$$

Tal resultado só é possível se tivermos uma massa independente da posição. Se soluções estacionárias na forma $\psi_n(\vec{r}, t) = \phi_n(\vec{r})e^{-iE_n t/\hbar}$ existirem para as relações 4.42, nas quais o parâmetro m_n assumisse valores de acordo com estado de excitação n , a superposição de tais estados exibiria efeitos de interferência a depender do sistema de coordenadas escolhido. Isso nos diz que, caso o operador hamiltoniano da equação de Schrödinger possua um termo de massa dependente da posição, o mesmo não será invariante sob as transformações de Galileu.

Sabendo que o teorema de Bargmann exige que a relação de Schrödinger seja válida independente do referencial usado para especificar as coordenadas de uma partícula, von Roos estendeu essa conclusão para a definição obtida em 4.31. Porém, (Kawamura *et al.*, 1988) analisaram as transformações de Galileu no contexto de massa efetiva, comparando a equação de massa efetiva em referenciais distintos e concluíram que a invariância de forma não ocorre e portanto, o teorema de Bargmann não pode ser aplicado nesse contexto. Diante disso, as soluções de pacote de onda para os operadores de energia cinética com MDP definidos em 4.37 e 4.38 possuem significado físico e são, de fato, justificáveis.

4.5 Ordenamento de von Roos para aproximações MDP

Solucionada a inconsistência de Bargmann, a discussão retornou ao termo de energia cinética do operador hamiltoniano efetivo

$$\hat{H}_e = \hat{T}(\vec{r}) + \hat{V}(\vec{r}). \quad (4.47)$$

De acordo com as definições (4.36, 4.37, 4.38), o operador \hat{T} é escrito em função de $1/\sqrt{m(\vec{r})}$ e do operador momento \hat{p} , dois termos que não comutam entre si. Devido a essa particularidade, \hat{T} pode ser escrito de 6 formas distintas, dadas as permutações possíveis (Li *et al.*, 1993)

$$\begin{aligned} \hat{T}_1 &= \frac{1}{2} \hat{p}^2 \frac{1}{m(\vec{r})} \quad , \quad \hat{T}_2 = \frac{1}{2} \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}}, \\ \hat{T}_3 &= \frac{1}{2} \hat{p} \frac{1}{m(\vec{r})} \hat{p} \quad , \quad \hat{T}_4 = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p}^2 \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}}, \\ \hat{T}_5 &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \quad , \quad \hat{T}_6 = \frac{1}{2} \frac{1}{m(\vec{r})} \hat{p}^2. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Dentre os operadores acima, apenas \hat{T}_3 e \hat{T}_4 são hermitianos. Avaliando as escolhas feitas para \hat{T} na literatura, temos que a definição 4.37 utilizada por (Gora *et al.*, 1969) é obtida através da média de \hat{T}_1 e \hat{T}_6 , gerando um hamiltoniano de massa efetiva na forma

$$H_{GW} = \frac{1}{4} \left[\hat{p}^2 \frac{1}{m(\vec{r})} + \frac{1}{m(\vec{r})} \hat{p}^2 \right] + V(\vec{r}). \quad (4.49)$$

Também temos que a expressão 4.38 encontrada por (Zhu *et al.*, 1983) corresponde a permutação \hat{T}_4 , retornando um hamiltoniano

$$H_{ZK} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p}^2 \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} + V(\vec{r}). \quad (4.50)$$

A permutação \hat{T}_3 é utilizada por (BenDaniel *et al.*, 1966), com o hamiltoniano efetivo

$$H_{BDD} = \frac{1}{2} \hat{p} \frac{1}{m(\vec{r})} \hat{p} + V(\vec{r}). \quad (4.51)$$

Dadas essas possibilidades, não há um consenso sobre o operador cinético na literatura. Porém, buscou-se uma generalização para essa escolha, que foi encontrada por von Roos e tem como fundamento a teoria de semicondutores,

$$\hat{T} = -\frac{1}{4} [m^\alpha(\vec{r}) \cdot \hat{p} \cdot m^\beta(\vec{r}) \cdot \hat{p} \cdot m^\gamma(\vec{r}) + m^\gamma(\vec{r}) \cdot \hat{p} \cdot m^\beta(\vec{r}) \cdot \hat{p} \cdot m^\alpha(\vec{r})], \quad (4.52)$$

na qual α , β e γ são constantes nomeadas parâmetros de ordenamento ou de ambiguidade de von Roos, utilizados para garantir a hermiticidade do operador Hamiltoniano. Tais parâmetros satisfazem

$$\alpha + \beta + \gamma = -1. \quad (4.53)$$

A proposição de von Roos nos leva a um problema no ordenamento do operador energia cinética e conseqüentemente, na definição do hamiltoniano. Aqui nos deparamos com uma ambiguidade na definição de \hat{T} , já que não há um primeiro princípio que justifique fixar um operador único (Renan *et al.*, 2000). Na literatura, a condição de hermiticidade de \hat{H} , a conservação da densidade de corrente e a comparação entre resultados teóricos e experimentais não foram capazes de indicar uma forma única para o operador \hat{T} , ou seja, determinar precisamente os valores de α , β e γ .

Foi sugerido (Cavalcante *et al.*, 1997) que todas as possíveis formas de \hat{T} seriam equivalentes caso a variação espacial da massa efetiva no semiconductor ocorresse de forma suave, porém, a indefinição do operador permanece como um problema em aberto. Feitas essas considerações, tomaremos como referência para os parâmetros de ordenamento os conjuntos mais utilizados na literatura acerca de sistemas MDP, os quais foram verificados experimentalmente e cujos valores são mostrados na Tabela 1.

Tabela 1 – Ordenamentos conhecidos para o operador energia cinética

Autores	Parâmetros
Li & Khun (1993)	$\beta = \gamma = -1/2, \alpha = 0$
Gora & Williams (1969)	$\beta = \gamma = 0, \alpha = -1$
Zhu & Kroemer (1983)	$\alpha = \gamma = -1/2, \beta = 0$
BenDaniel & Duke (1966)	$\alpha = \gamma = 0, \beta = -1$
Mustafa & Mazharimousavi (2007)	$\alpha = \gamma = -1/4, \beta = -1/2$

Fonte: Elaborada pelo autor.

Tal ambiguidade indica que a equação de Schrödinger não é rigorosamente adequada para aproximações de massa efetiva dependente da posição, o que torna válida a busca por outra relação que descreva a mesma situação física para tratar do conceito de MDP. Nesse contexto saímos da teoria quântica e partimos para a quântica-relativística, tomando o resultado de (Cavalcante *et al.*, 1997) no qual a equação de Dirac em seu limite não-relativístico é utilizada para tratar um sistema quântico com MDP, retornando o operador cinético

$$\hat{T} = \frac{1}{4} \left[\hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} + \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m(\vec{r})}} \hat{p} \right], \quad (4.54)$$

para o qual o termo de massa não é acoplado ao operador momento, resultando num operador livre do problema do ordenamento ou da ambiguidade. Esse procedimento se justifica se considerarmos que a equação de Dirac é de fato a relação mais geral para descrever elétrons e mais completa por incluir efeitos relativísticos, de modo que tomar o limite da mesma em baixas velocidades gera uma descrição equivalente à fornecida pela equação de Schrödinger (Ajaib, 2015).

Podemos perceber também que o operador obtido relativisticamente possui parâmetros que coincidem com o ordenamento obtido por (Li *et al.*, 1993), em um artigo que aborda uma heterojunção do semiconductor GaAs-(AlGa)As ⁷, ilustrando a dependência da razão de deslocamento de banda de um poço quântico deste material em um hamiltoniano hermitiano com MDP. A definição dos parâmetros encontrados no artigo é apresentada na Tabela 1.

Esse resultado indica que modelar heteroestruturas ⁸ a partir de uma equação relativística no limite não relativístico combinada a teoria de massa efetiva é um modo mais preciso de compreender as propriedades de transmissão de elétrons nestes materiais. Nessa perspectiva podemos partir da equação de Dirac e associá-la a representações alternativas como a de Majorana para analisar a dinâmica de partículas no ambiente de semicondutores, conforme faremos no capítulo seguinte.

⁷ Uma heterojunção semicondutora GaAs-(AlGa)As é uma interface entre duas camadas de materiais semicondutores diferentes: arseneto de gálio (GaAs) e uma liga de alumínio, gálio e arsênio (AlGaAs). A estrutura de banda dessa heterojunção pode ser projetada para ter uma diferença de energia entre a banda de condução e a banda de valência, o que é conhecido como deslocamento da banda.

⁸ Aqui estabelecemos uma distinção entre heteroestrutura e heterojunção: a primeira trata-se da junção de materiais semicondutores distintos, enquanto a segunda se refere a interface entre duas regiões da heteroestrutura onde ocorre a mudança nas propriedades do material.

5 A REPRESENTAÇÃO DE MAJORANA COM MDP

Para além do êxito das teorias de massa efetiva em estruturas de semicondutores apresentadas no Capítulo 4, o formalismo de MDP mostra-se promissor em mecânica quântica, sendo utilizado, por exemplo, para o estudo de osciladores harmônicos (Quesne, 2022), de efeitos quânticos gravitacionais (Lawson, 2022), na análise de entropias de informação (Lima, 2022) e especialmente na solução das equações de Schrödinger (Ruzhansky *et al.*, 2023), (de Souza Dutra *et al.*, 2000) e Dirac (Roy, 2006).

Dentre as representações fermiônicas que podem ser modeladas com MDP, as escolhas mais usuais seriam a de Dirac, de Weyl, ou de Majorana. Optamos então por escolher esta última tendo em vista não apenas as suas múltiplas possibilidades de aplicações em matéria condensada abordadas no Capítulo 3, mas também pela analogia que pode ser estabelecida entre algumas propriedades dos férmions de Majorana com as quasipartículas encontradas em meios supercondutores e semicondutores (Yazdani *et al.*, 2023; Sanches *et al.*, 2023).

Neste capítulo construiremos uma equação relativística com MDP na representação de Majorana, para a qual faremos análise do hamiltoniano no seu limite não relativístico, com o intuito de verificar se obtemos de fato um operador cinético livre de problemas de ambiguidade. Em seguida, aplicaremos condições de energia e massa vinculadas ao tratamento de excítons em semicondutores para obter a equação geral que descreve o sistema.

5.1 Equações relativísticas com MDP

Tomaremos como ponto de partida a equação de Dirac unidimensional com massa efetiva, considerando as interações eletromagnéticas no sistema

$$[\gamma^\mu (p_\mu - eA_\mu) - m(x)]\psi(x, t) = 0, \quad (5.1)$$

onde $m(x)$ é uma massa dependente da posição e $A_\mu = [V(x), \vec{A}(x)]$ é o potencial eletromagnético, com $V(x)$ correspondendo ao potencial elétrico e $\vec{A}(x)$ é o vetor potencial magnético. Aqui assumiremos que $A_\mu = [V(x), 0]$, isto é, apenas as interações elétricas são consideradas neste sistema ¹. Definindo a métrica do sistema $g_{\mu\nu} = (+, -)$, e o momento $p_\mu = (p_0, p_x)$, com $\mu = 0, 1$, podemos escrever

$$[\gamma^0 p_0 + \gamma^1 p_x - \gamma^0 V(x) - m(x)]\psi(x, t) = 0. \quad (5.2)$$

¹ A escolha de $\vec{A}(x) = 0$ é feita considerando que a interação magnética não é bem definida em apenas uma dimensão, já que o campo magnético é descrito propriamente em 3 dimensões.

Utilizando a representação de Majorana

$$\gamma^0 = \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma^1 = i\sigma^3 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

temos que $(\gamma^0)^2 = \mathbb{I}$. Logo, se a relação 5.2 for multiplicada por γ^0 , obteremos

$$i\partial_t \psi(x,t) = [-i\gamma^0\gamma^1 \partial_x + \gamma^0 m(x) + V(x)] \psi(x,t). \quad (5.4)$$

Aqui temos um operador hamiltoniano na forma

$$\hat{H} = \alpha p_x + \beta m(x) + V(x), \quad (5.5)$$

com $\alpha = \gamma^0\gamma^1$ e $\beta = \gamma^0$.

A multiplicação das matrizes retorna

$$\left[\begin{pmatrix} i\partial_t - V(x) & 0 \\ 0 & i\partial_t - V(x) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i\partial_x + im(x) \\ -i\partial_x + im(x) & 0 \end{pmatrix} \right] \psi(x,t) = 0. \quad (5.6)$$

Para a expressão 5.4 podemos assumir uma solução da função de onda na forma $\psi(x,t) = e^{-iEt} \phi(x)$. Isso nos permite utilizar a separação de variáveis

$$\psi(x,t) = \begin{pmatrix} \phi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix} e^{-iEt}, \quad (5.7)$$

e escrever a equação 5.6 na forma

$$\begin{pmatrix} i\partial_t - V(x) & -i\partial_x + im(x) \\ -i\partial_x - im(x) & i\partial_t - V(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(x)e^{-iEt} \\ \chi(x)e^{-iEt} \end{pmatrix} = 0. \quad (5.8)$$

A equação acima gera o sistema de equações acopladas

$$i\left[\frac{d\chi}{dx} - m(x)\chi(x)\right] = (E - V)\phi(x), \quad (5.9)$$

$$i\left[\frac{d\phi}{dx} + m(x)\phi(x)\right] = (E - V)\chi(x). \quad (5.10)$$

As expressões acima podem ser desacopladas isolando a variável χ da segunda equação e substituindo-a na primeira, o que retorna uma equação em função apenas de $\phi(x)$. Esse mesmo processo pode ser feito para ϕ , em um processo que retorna as equações

$$-\phi''(x) + [-m'(x) - 2EV(x) + V^2(x)] \phi(x) = [E^2 - m^2(x)] \phi(x), \quad (5.11)$$

$$\chi''(x) - [-m'(x) - 2EV(x) + V^2(x)]\chi(x) = [E^2 - m^2(x)]\chi(x). \quad (5.12)$$

Neste sistema, não há diferença entre resolver a equação para $\phi(x)$ ou $\chi(x)$, (considerando a definição do *spinor* em 5.7, a primeira componente diz respeito a solução de partícula e a segunda de antipartícula) dada a equivalência entre ambas as soluções que é própria da condição de Majorana. Para 5.11 e 5.12 adotamos a notação do índice (') para representar as derivadas em x . Escolhemos resolver a equação para $\phi(x)$ e definimos o potencial ² $V(x) = 0$, para indicar que tratamos de um sistema sem impurezas. A expressão 5.11 se torna então uma equação tipo Schrödinger:

$$-\phi''(x) + [m^2(x) - m'(x)]\phi(x) = E^2\phi(x) \quad (5.13)$$

É interessante observar que, mesmo na ausência de interações externas, o sistema experimenta um potencial efetivo que se deve apenas a distribuição de massa das partículas. Esse potencial é definido como

$$V_{ef} = m^2(x) - m'(x), \quad (5.14)$$

no qual a massa $m(x)$ deve ser uma função real e positivamente definida. Estabelecida a equação do sistema e a forma de seu potencial, retornaremos ao hamiltoniano definido em 5.5 no limite de baixas velocidades.

5.2 Limite não-relativístico

Relembrando a definição do operador cinético encontrado a partir do Hamiltoniano de Dirac apresentada em 4.54, foi demonstrado que os parâmetros de ordenamento obtidos correspondem aos valores da primeira linha da Tabela 1. Verificaremos agora se o Hamiltoniano de Majorana retorna um operador cinético com algum dos parâmetros já conhecidos da literatura. Para isso, começaremos por considerar que o hamiltoniano

$$\hat{H} = \alpha p_x + \beta m(x) + V(x), \quad (5.15)$$

no limite não-relativístico ($c \rightarrow \infty$) se torna apenas $\hat{H} \rightarrow \beta m(x)$. Analisaremos esse limite através da transformação FW, desenvolvida por (Foldy *et al.*, 1950), aplicada no *spinor* $\phi(x)$

$$\phi(x) \rightarrow e^{i\hat{S}}\phi(x), \quad (5.16)$$

² Na ausência de $V(x)$ e do potencial magnético, o termo de interação eletromagnética some, cancelando o termo de carga. Essa é uma escolha coerente com as condições de majorana, já que não temos um acoplamento com o campo eletromagnético para a manutenção da invariância de calibre.

com \hat{S} correspondendo a um operador hermitiano na forma

$$\hat{S} = -\frac{i}{2} \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \beta \alpha p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}}. \quad (5.17)$$

Na expressão acima os termos de massa e momento não comutam entre si. O hamiltoniano também será transformado de acordo com

$$\hat{H}' = e^{i\hat{S}} \hat{H} e^{-i\hat{S}}. \quad (5.18)$$

Para determinar o hamiltoniano H' utilizaremos o lema de Baker-Campbell-Hausdorff, um resultado matemático proveniente da teoria de grupos que descreve a exponenciação de elementos de uma álgebra de Lie:

Lema 5.2.1 *Sejam os elementos A e B pertencentes a uma álgebra de Lie. O produto das exponenciais destes termos pode ser escrito por uma única exponencial de C , na forma:*

$$e^A e^B = e^C,$$

onde C é dado por:

$$C = A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}([A, [A, B]] - [B, [B, A]] \dots).$$

Seguindo a definição acima, \hat{H}' pode ser escrito como

$$\hat{H}' = \hat{H} + i[S, \hat{H}] - \frac{1}{2}[S, [S, \hat{H}]] + \dots \quad (5.19)$$

O operador \hat{S} da equação 5.17, aplicado em uma função qualquer f , é encontrado substituindo as matrizes α e β na representação de Majorana

$$\hat{S}f = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} - \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \end{pmatrix} f. \quad (5.20)$$

O comutador $[\hat{S}, \hat{H}]$, por sua vez, é

$$\begin{aligned} [\hat{S}, \hat{H}]f &= (\hat{S}\hat{H} - \hat{H}\hat{S})f, \\ &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} - \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -im(x)f \\ im(x)f & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$-\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -im(x)f \\ im(x)f & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + \frac{m'(x)}{2m^2(x)} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} - \frac{m'(x)}{2m^2(x)} \end{pmatrix}.$$

A expressão acima se torna

$$[\hat{S}, \hat{H}] = -i \begin{pmatrix} 0 & p_x \\ p_x & 0 \end{pmatrix} = i\alpha p_x. \quad (5.22)$$

Do mesmo modo, obtemos o termo

$$[\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]] = \frac{1}{2} \left[-\frac{2}{m(x)} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m'(x)}{m^2(x)} \frac{d}{dx} + \frac{1}{2} \frac{m''(x)}{m^2(x)} \right] \beta, \quad (5.23)$$

que pode ser reescrito na forma

$$-\frac{1}{2} [\hat{S}, [\hat{S}, \hat{H}]] = -\frac{1}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x + p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \right) \beta, \quad (5.24)$$

com o lado direito correspondendo a definição do operador energia cinética encontrado em 4.54.

Podemos finalmente escrever \hat{H}' definido na equação 5.19

$$\hat{H}' = \alpha p_x + \beta m(x) - \alpha p_x - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x + p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \right) \beta, \quad (5.25)$$

$$\hat{H}' = \left[m(x) - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x + p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} p_x \frac{1}{\sqrt{m(x)}} \right) \beta \right]. \quad (5.26)$$

Comparando a expressão acima com 4.52, concluímos que $\alpha = 0$ e $\beta = \gamma = -1/2$, ou seja, temos um ordenamento de Li e Khun equivalente ao encontrado por (Cavalcante *et al.*, 1997) e (Lima *et al.*, 2023). A correspondência entre os resultados nos permite ver que representações fermiônicas distintas (Dirac ou Majorana) em sistemas com dimensões distintas nos conduzem a um mesmo operador energia cinética. Ressalta-se aqui a relevância do perfil do operador cinético apresentado, considerando que fenômenos de transmissão de elétrons em heteroestruturas semicondutoras são afetados diretamente pelos parâmetros de ordenamento.

5.3 O modelo *Tight-Binding*

Obtido um operador cinético bem definido para a representação de Majorana, retornamos ao potencial definido em 5.14, para o qual definiremos uma massa $m(x)$. Se relembarmos a definição de massa efetiva, retornamos ao tensor demonstrado em 4.13

$$m_{ij}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_k [\nabla_k E(k)]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}, \quad (5.27)$$

no qual a determinação dessa quantidade requer que seja especificada uma energia de dispersão $E(k)$. Adotaremos então uma energia proveniente do modelo de *Tight-Binding (TB)* ou de ligação forte, uma aproximação que consiste em escrever a função de onda de um elétron como uma combinação linear de orbitais atômicos levando em consideração os vários sítios de um determinado cristal. Nessa seção, iremos revisar alguns aspectos principais desse modelo e derivar a energia para o caso mais simples de uma estrutura cristalina na forma de uma cadeia linear. Partiremos inicialmente das seguintes premissas (Dresselhaus *et al.*, 2018):

1. Os autovalores e autofunções de energia são conhecidos para um elétron em um átomo isolado;
2. Os átomos do material permanecem espaçados o suficiente para que cada elétron seja atribuído a um sítio atômico específico;
3. O potencial periódico da rede pode ser aproximado por uma superposição de potenciais atômicos através das funções de Bloch e a teoria de perturbação pode ser usada para tratar a diferença entre os potenciais atômico e o efetivo.

5.3.1 A combinação linear dos orbitais atômicos

Assumindo que, nas proximidades de cada sítio da rede, o Hamiltoniano total H pode ser aproximado pelo Hamiltoniano dos átomos localizados H_a e que os níveis ligados do Hamiltoniano $\phi(r)$ estão bem localizados, podemos escrever

$$H_a \phi_j(r) = \varepsilon_j \phi_j(r), \quad (5.28)$$

onde ε_j corresponde aos autovalores de energia e $\phi_j(r)$ pode ser desprezado quando $|r|$ alcançar uma distância da ordem do parâmetro de rede. Essa aproximação se torna mais precisa se considerarmos um termo adicional $\Delta U(r)$ no Hamiltoniano dos átomos localizados, isto é,

$$H = H_a + \Delta U(r). \quad (5.29)$$

Assim, para um átomo localizado na origem, $\phi_j(r)$ é uma boa aproximação da função de onda estacionária para o Hamiltoniano total. Da mesma forma, as funções de onda $\phi(r - R)$ serão boas aproximações para os sítios correspondentes R da rede de Bravais³. Logo, se $\phi_j(r)$ satisfaz

³ A rede de Bravais, estrutura fundamental que descreve a disposição periódica dos átomos num cristal, é caracterizada por três vetores de base (a_1, a_2, a_3) que descrevem as direções e magnitudes dos vetores de deslocamento necessários para alcançar cada sítio da rede a partir de um ponto de referência. Esses vetores definem as células unitárias da rede que se repetem para formar toda a estrutura cristalina.

a equação de Schrödinger para os átomos localizados 5.28, ela também deve satisfazer a equação de Schrödinger para o Hamiltoniano total 5.29 sempre que $\Delta U(r) = 0$ e $\phi_j(r) \neq 0$.

Desse modo, cada nível de átomos $\phi_j(r)$ localizados dá origem a N níveis periódicos com funções de onda $\phi_j(r - R)$ ⁴. Portanto, é preciso encontrar as N combinações lineares desses estados que representam a função de Bloch $\phi_j(r, k)$ associada aos elétrons do cristal. Partindo da terceira premissa, definimos a função de Bloch em termos dos orbitais atômicos

$$\phi_j(r, k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{ik \cdot R} \phi_j(r - R), \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (5.30)$$

onde n é o número de funções de onda dos átomos na célula unitária, de modo que temos n funções de Bloch para cada vetor de onda k . A função de onda para um elétron $\psi_j(r, k)$ pode então ser escrita como

$$\psi_j(r, k) = \sum_{j'} C_{jj'} \phi_{j'}(r, k), \quad (5.31)$$

com $C_{jj'}$ sendo coeficientes complexos a serem determinados. As duas últimas equações acima demonstram que, de fato, a função de onda pode ser escrita em termos de orbitais atômicos $\phi_j(r - R)$ ⁵.

5.3.2 A equação secular

Para encontrar os autovalores de energia, consideraremos a relação

$$E_i = \frac{\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}, \quad (5.32)$$

na qual substituiremos o *spinor* 5.31 para obter

$$E_i = \frac{\sum_{j, j'} H_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'}}{\sum_{j, j'} S_{jj'} C_{ij}^* C_{ij'}}, \quad (5.33)$$

onde $H_{jj'}$ e $S_{jj'}$ são integrais sobre os orbitais de Bloch, também chamadas de matrizes de transferência e sobreposição, definidas como

$$H_{jj'} = \langle \phi_j | H | \phi_{j'} \rangle, \quad S_{jj'} = \langle \phi_j | \phi_{j'} \rangle, \quad (5.34)$$

para $j, j' = 1, 2, \dots, n$. Substituindo a função de Bloch definida em 5.30, podemos escrever

$$H_{jj'} = \frac{1}{N} \sum_{R, R'} e^{ik(R' - R)} t_{R, R'}^{jj'}, \quad (5.35)$$

⁴ Aqui, N é o número de células unitárias.

⁵ Detalhes da aplicação do teorema de Bloch podem ser encontrados na referência (Lima *et al.*, 2022).

onde definimos o parâmetro de salto t :

$$t_{R,R'}^{jj'} = \langle \phi_j(r-R) | H | \phi_{j'}(r-R') \rangle, \quad (5.36)$$

relacionado a energia que um elétron demanda para saltar de um sítio na posição R' para outro na posição R . Esse parâmetro usualmente tem valor negativo e é reduzido na medida que a distância entre os sítios aumentam (Marder, 2010). Do mesmo modo definimos

$$S_{jj'} = \frac{1}{N} \sum_{R,R'} e^{ik(R'-R)} s_{R,R'}^{jj'}, \quad (5.37)$$

com s correspondendo ao parâmetro de sobreposição

$$s_{R,R'}^{jj'} = \langle \phi_j(r-R) | \phi_{j'}(r-R') \rangle, \quad (5.38)$$

que representa a sobreposição entre os orbitais atômicos dos sítios R e R' . Usualmente na aproximação TB podemos adotar um modelo ortonormal, no qual os orbitais R e $R' = R$ possuem $s_{R,R'}^{jj'} = \delta_{R,R'} \delta_{j,j'}$ e a matriz $S_{jj'}$ corresponde a matriz identidade. As aplicações mais gerais levam em conta na determinação dos parâmetros de salto e de sobreposição apenas as contribuições dos sítios vizinhos mais próximos (Lima *et al.*, 2022).

Determinados $H_{jj'}$ e $S_{jj'}$, retornamos a equação 5.33, na qual os coeficientes C_{ij}^* podem ser obtidos através da minimização dos autovalores de energia ⁶, um processo que retorna a relação

$$\sum_{j'} H_{jj'} C_{ij'} = E_i \sum_{j'} S_{jj'} C_{ij'}, \quad C_i = \begin{pmatrix} C_{i1} \\ \vdots \\ C_{iN} \end{pmatrix}. \quad (5.39)$$

A expressão 5.39 pode ser reescrita na forma

$$[H - E_i \mathbb{1}] C_i = 0, \quad (5.40)$$

onde consideramos a matriz S correspondente a identidade. Percebe-se que, se a inversa da matriz definida pelo termo entre colchetes existir, teremos apenas solução trivial para essa equação, isto é, $C_i = 0$. Consideraremos então que essa matriz é singular, e portanto,

$$\det[H - E_i \mathbb{1}] = 0. \quad (5.41)$$

A expressão acima é denominada equação secular, um importante resultado no modelo TB que permite determinar as auto-energias do sistema.

⁶ Isto é, considerando $\frac{\partial E_i}{\partial C_{ij}^*} = 0$.

5.3.3 Exemplo de uma cadeia linear

Um dos exemplos mais simples que pode ser modelado por *TB* é a estrutura cristalina em uma dimensão, na forma de uma cadeia linear contendo apenas um sítio por célula unitária, conforme a figura 6. Nesse caso, podemos definir o vetor primitivo da rede de Bravais como $\vec{a}_1 = (a, 0, 0)$. Definiremos também o vetor primitivo \vec{b}_1 que define a estrutura do espaço recíproco e se relaciona com o vetor de base \vec{a}_1 pela relação

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}. \quad (5.42)$$

Logo, podemos definir o vetor $\vec{b}_1 = (2\pi/a, 0, 0)$. Os autovalores da energia do Hamiltoniano total são funções periódicas no espaço recíproco que podem ser bem descritas dentro da primeira zona de Brillouin ⁷, especificada no intervalo $-\pi/a < k < \pi/a$. Nesse caso, a função de Bloch tem a forma

$$\phi_j(r, k) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{ik \cdot R} \phi_j(r - R), \quad (5.43)$$

e a matriz de transferência, dada as definições 5.35 e 5.36, é

$$H = \frac{1}{N} \left(N\varepsilon_0 + Nt \sum_{n=1}^2 e^{ik \cdot d_n} \right), \quad (5.44)$$

com d_n correspondendo aos sítios mais próximos $d_1 = (a, 0)$ e $d_2 = (-a, 0)$. Logo, H também pode ser escrito como

$$H = \varepsilon_0 + 2t \cos(ka). \quad (5.45)$$

Partindo do pressuposto que não há sobreposição entre orbitais distintos, podemos considerar que a matriz de sobreposição é equivalente a matriz identidade e usar a relação 5.41 para encontrar uma energia na forma

$$E(k) = \varepsilon_0 + 2t \cos(ka). \quad (5.46)$$

Relações de dispersão como essa descrevem a energia de portadores de carga em função do vetor de onda k , com a função cosseno representando a periodicidade da estrutura cristalina em a . As mesmas são aplicadas em vários modelos de semicondutores em baixas dimensões, como as heteroestruturas em materiais da família de dicalcogenetos de metais de transição (Bieniek *et al.*, 2022), nas quais os éxcitons em estados ligados podem ser modelados através dos conceitos de *TB*, permitindo compreender melhor a estrutura eletrônica e respostas ópticas desses materiais.

⁷ A primeira zona de Brillouin é a célula de Wigner-Seitz para um ponto especial da rede recíproca, ou seja, é a menor célula que abrange todo o espaço recíproco em torno do ponto, sem sobreposições com outras células.

Figura 6 – Representação de uma cadeia linear com um sítio por célula unitária.



Fonte: (Lima *et al.*, 2022) - adaptada

5.4 Formalismo de excítons unidimensionais

A abordagem de *TB* apresentado na seção anterior é apenas um dos meios utilizados para descrever portadores de carga e excitações e pode ser combinado a outros métodos como a teoria de massa efetiva para descrever quasipartículas tipo excíton. É válido ressaltar, entretanto, que para tratar de excítons propriamente é necessário levar em consideração um termo de interação coulombiana no Hamiltoniano. Diante disso, discutiremos ao longo seção algumas características importantes vinculadas a essas excitações e em seguida aplicaremos suas propriedades na equação 5.13.

Dada a presença de dois férmions (elétron e buraco) em sua constituição, excítons possuem *spin* total inteiro, o que os caracteriza como um bósons. O comportamento bosônico pode ser verificado nas previsões de que, em certas condições, essas estruturas formam condensados em um semicondutor (Byrnes *et al.*, 2014; Jiang *et al.*, 2022). Na ausência de fatores externos como vibrações da rede ou impurezas os excítons são encontrados em seu estado livre, podendo interagir com fônons e passar pelo processo de recombinação⁸. Nessa configuração a baixa energia de ligação desse arranjo torna a vida útil dessas excitações muito curta, o que dificulta o tratamento dessas estruturas (Xiao *et al.*, 2017). Por outro lado, a presença de estados ligados pode criar níveis de energia que aprisionariam os excítons, diminuindo o processo de recombinação e tornando os mesmos mais estáveis.

Nesse sentido, apesar da natureza bosônica do excíton, podemos aplicar propriedades vinculadas a ele, em específico a sua massa efetiva e energia de dispersão no estudo de sistemas fermiônicos, nos quais obtém-se usualmente a presença de estados ligados. Com isso, queremos investigar se férmions de Majorana unidimensionais com MDP, para um acoplamento tipo excíton podem, de fato, apresentar estados ligados. Para isso, começaremos por derivar a energia de dispersão em uma dimensão, utilizando o formalismo discutido na seção 5.3. Consi-

⁸ Em cristais semicondutores típicos como o silício a grande blindagem dielétrica e a massa efetiva pequena das quasipartículas resultam em energias de ligação entre 1 e 10meV, de modo que o comportamento ligado do excíton é insignificante comparado as flutuações térmicas, a menos que seja resfriado a baixas temperaturas.

deraremos aqui que o termo de interação coulombiana do Hamiltoniano que caracteriza excítons propriamente é nulo, já que os férmions de Majorana não possuem carga. Tomando o exemplo da cadeia linear, assumiremos um elemento com um átomo por célula unitária e que cada átomo possui apenas um orbital $\phi(r)$. Temos então uma função de onda

$$\Psi_k(r) = N^{-1/2} \sum_m e^{ik \cdot R_m} \phi(r - R_m), \quad (5.47)$$

e podemos encontrar o valor esperado do Hamiltoniano pela expressão

$$\langle k | H | k \rangle = N^{-1} \sum_m \sum_n e^{ik \cdot (R_n - R_m)} \langle \phi_m | H | \phi_n \rangle, \quad (5.48)$$

com $\phi_m = \phi(r - R_m)$. Faremos considerações para o valor de $\langle \phi_m | H | \phi_n \rangle$ assumindo que n, m estão no mesmo sítio atômico ou em sítios vizinhos mais próximos, de modo que

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | H | \phi_n \rangle &= -\alpha, \\ \langle \phi_m | H | \phi_n \rangle &= -\gamma, \end{aligned} \quad (5.49)$$

se n e m são vizinhos mais próximos. Aqui, α , γ correspondem aos termos ϵ_0 e t definidos em 5.46. α representa a energia de um elétron sem a interação com sítios vizinhos, e γ é o parâmetro de salto, associado a probabilidade do elétron mover-se para um sítio vizinho.

Ambas essas quantidades podem ser negativas, caso haja uma diminuição líquida na energia associada ao movimento dos elétrons entre os sítios na rede cristalina. Essa diminuição é característica da formação de estados ligados, que possuem energias menores que as de elétrons em estado livre no vácuo. Fora dos casos da equação 5.49, teremos $\langle \phi_m | H | \phi_n \rangle = 0$. Portanto, a relação 5.48 se torna apenas

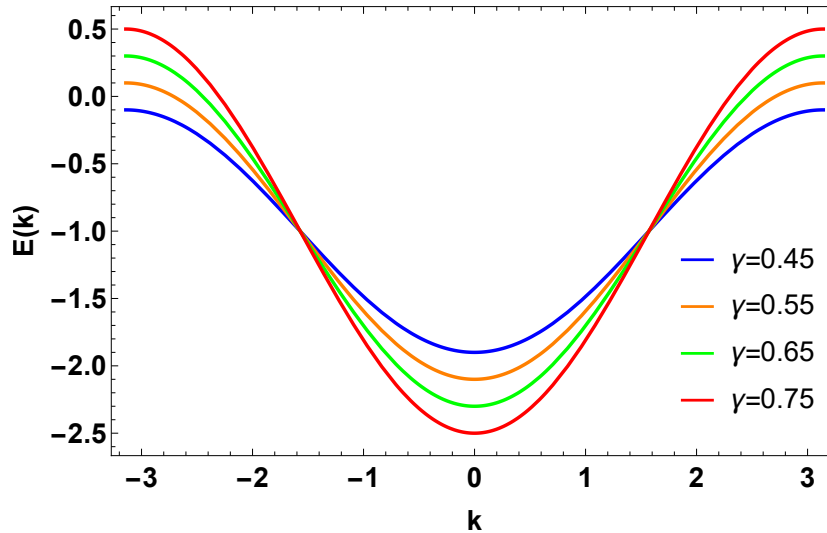
$$E_k = \langle k | H | k \rangle = -\alpha - \gamma \sum_n e^{ik \cdot R_n}, \quad (5.50)$$

que, em uma dimensão, pode ser escrita como

$$E_k = -\alpha - 2\gamma \cdot \cos(ka). \quad (5.51)$$

A relação acima é energia de dispersão que será adotada para o sistema fermiônico deste trabalho, que pode ser visualizada na Figura 7. Aqui adotamos para o parâmetro de salto os valores possíveis $\gamma = 0.45$, $\gamma = 0.55$, $\gamma = 0.65$ e $\gamma = 0.75$, uma escolha que se justifica pela natureza de probabilidade vinculada a esse parâmetro que nos permite adotar valores no intervalo $0 < \gamma < 1$. Partindo de 5.51 derivaremos a massa efetiva, usando a definição 5.27 para encontrar

Figura 7 – Comportamento parabólico da dispersão de energia em função do vetor de onda k do espaço recíproco para diferentes valores do parâmetro γ .



Fonte: Elaborado pela autora.

$$m^*(k) = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2} \sec(ka). \quad (5.52)$$

Observe que tanto a energia como a massa encontradas estão no espaço recíproco k , o que é uma escolha usual já que a periodicidade da rede e as simetrias de estruturas de banda tornam as análises teóricas mais fáceis neste espaço. Queremos, entretanto, obter uma massa efetiva associada a posição, o que pode ser feito através da transformada de Fourier. Para isso, integramos a massa efetiva obtida no intervalo correspondente a primeira zona de Brillouin⁹ ($-\pi/a \leq k \leq \pi/a$), isto é,

$$m(x) = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{1}{2\gamma} \frac{\sec(ka)}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} dk. \quad (5.53)$$

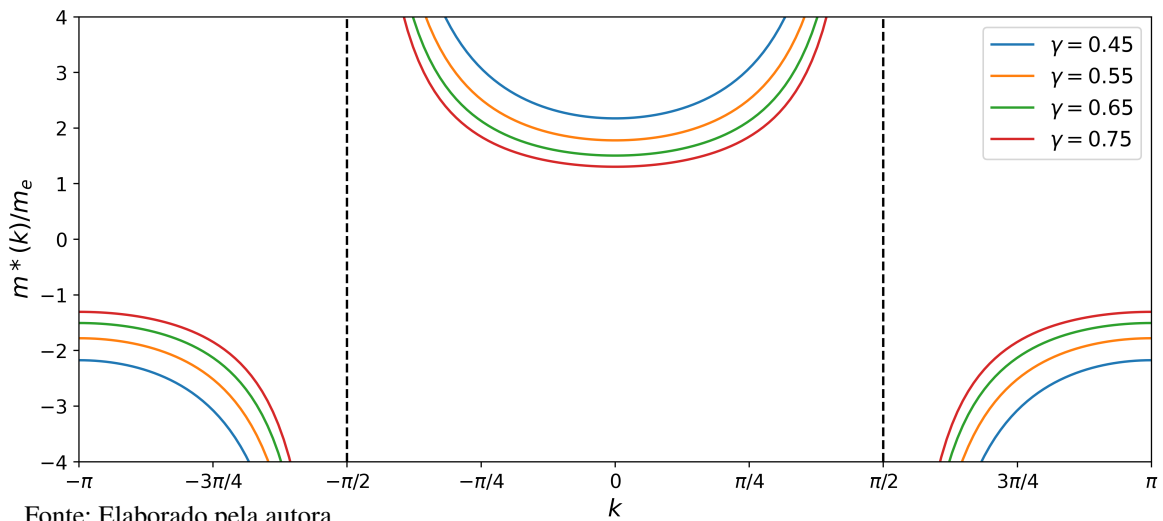
A integral 5.53 pode ser resolvida com auxílio do teorema dos resíduos¹⁰, gerando a massa efetiva

$$m(x) = -\frac{\sqrt{2\pi}}{\gamma} \sin\left(\frac{\pi x}{2}\right), \quad (5.54)$$

onde o espaçamento entre os átomos da rede foi escolhido $a = 1\text{Å}$. Para termos uma $m(x)$ bem definida e positiva referente a primeira zona de Brillouin, $x \in [-1, 0]$. Podemos analisar o comportamento da massa efetiva em relação ao vetor de onda do espaço k e também a posição por meio dos gráficos da Figura 8 e Figura 9.

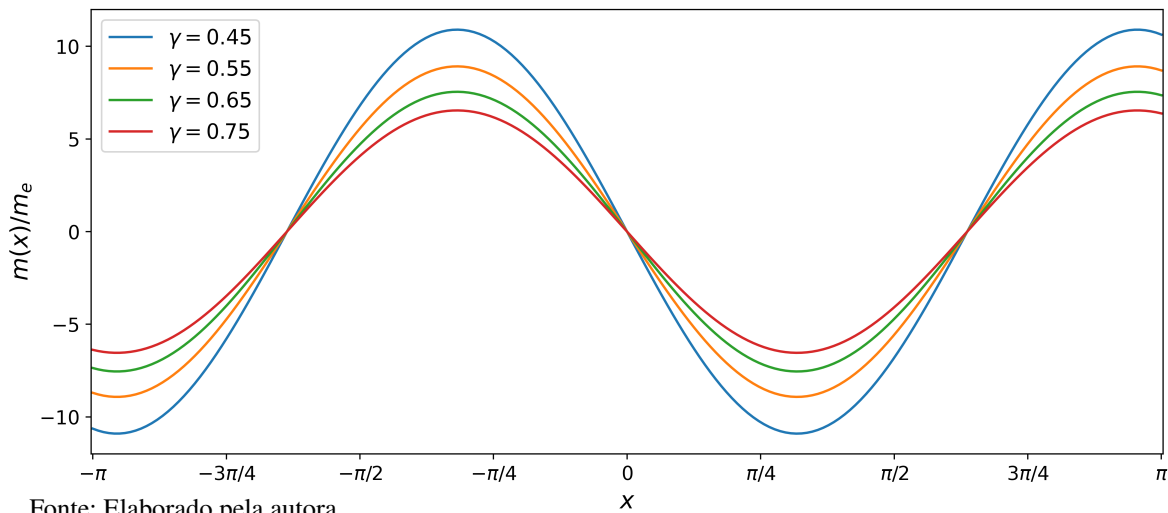
⁹ O fato de integrarmos na primeira zona de Brillouin se deve ao fato de que nesse intervalo estão contidas as

Figura 8 – Comportamento da razão entre a massa efetiva m^* e a massa do elétron em repouso m_e no espaço recíproco para valores distintos do parâmetro de salto γ e um espaçamento $a = 1\text{Å}$.



Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 9 – Comportamento da razão entre a massa efetiva m^* e a massa do elétron em repouso m_e no espaço das posições para valores distintos do parâmetro de salto γ e um espaçamento $a = 1\text{Å}$.



Fonte: Elaborado pela autora.

Definida a massa dependente da posição no espaço real, obtemos o perfil do potencial efetivo em 5.14, que tem a forma

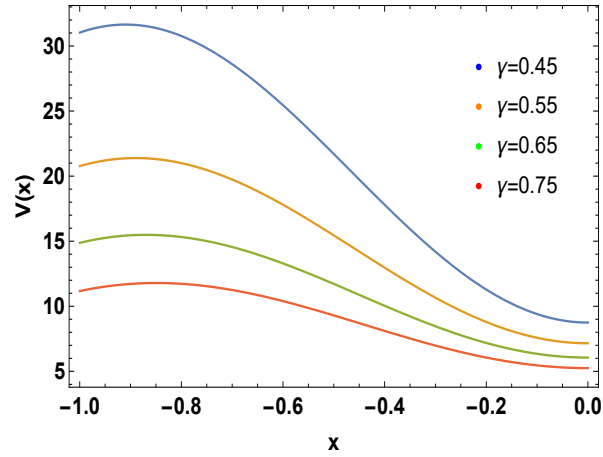
$$V_{ef} = m^2(x) - m'(x) = \frac{2\pi}{\gamma^2} \left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{2}\right) + \frac{\gamma}{4} \sqrt{2\pi} \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) \right]. \quad (5.55)$$

O comportamento do potencial acima em relação à posição é apresentado na Figura 10. Pode-se observar nos gráficos mostrados uma tendência decrescente na massa e no potencial conforme o parâmetro γ aumenta.

informações sobre a energia e o momento de um cristal.

¹⁰ O teorema dos resíduos é um método de cálculo de integrais usado em funções analíticas ao longo de caminhos fechados que generaliza a fórmula de Cauchy.

Figura 10 – Potencial efetivo da equação 5.55 em termos da posição para valores distintos de γ .



Fonte: Elaborado pela autora.

Definimos então a relação central do trabalho, a equação que descreve partículas de majorana em uma dimensão com uma distribuição de massa tipo excíton

$$-\phi''(x) + \left[\frac{2\pi}{\gamma^2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{2}\right) + \frac{\sqrt{2\pi^3}}{2\gamma} \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right) \right] \phi(x) = E^2 \phi(x). \quad (5.56)$$

O Capítulo 6 será dedicado a resolução dessa equação, isto é, a obtenção das soluções para o *spinor* de Majorana $\phi(x)$ e a análise do espectro da energia e seus autovalores. Determinado o comportamento da energia, será construído um *ensemble* destas partículas que por sua vez permite o estudo de potenciais e outras grandezas termodinâmicas.

6 RESULTADOS OBTIDOS

A análise da Equação 5.56 indica que, para dentro do intervalo da zona de Brillouin adotado $x \in [-1, 0]$, não é admitida uma solução analítica ¹. Podemos, contudo, empregar um método alternativo e buscar uma solução numérica para o problema. Para isso escolhemos a abordagem denominada Método de Elementos Finitos (MEF), uma técnica utilizada na resolução de equações diferenciais cuja combinação com as condições de contorno de Dirichlet ² fornece as soluções da função de onda e energia do sistema que estamos tratando.

6.1 Soluções numéricas e energia

A técnica do MEF consiste em dividir o domínio em que a equação se encontra em partes menores e mais simples que se denominam elementos finitos. Para cada segmento, a equação diferencial é aproximada por uma equação algébrica, utilizando funções de interpolação que podem ser de vários tipos e são escolhidas de modo a satisfazerem as condições de contorno do problema (Logan, 2011). Obtidas as equações aproximadas para cada elemento, é montado um sistema de equações lineares globais, que é resolvido numericamente para obter uma solução geral dentro do intervalo dado e de suas condições de contorno.

Aplicamos então o método citado através da subdivisão ou discretização do intervalo $x \in [-1, 0]$ em 100 partes que serão individualmente aproximadas por funções de interpolação polinomiais. Obtidas as equações de cada elemento, obtém-se uma solução geral na qual aplica-se as condições de Dirichlet, considerando o comportamento da função de onda nos limites do intervalo, ou seja, nos pontos equivalentes a $x = -1$ e $x = 0$. Esse procedimento retorna as soluções para a função de onda apresentadas na Figura 11(a), Figura 11(b), Figura 11(c) e Figura 11(d). Nelas temos o comportamento de $\phi(x)$ para os primeiros autoestados de energia de acordo com a variação do parâmetro de salto γ para o qual assumimos os mesmos valores apresentados no fim da seção 5.4.

O comportamento das funções de onda demonstra que estamos tratando de partículas cujo movimento é confinado a uma região limitada do espaço, de modo que temos estados ligados devido ao potencial efetivo do sistema. As energias são discretas ou quantizáveis e

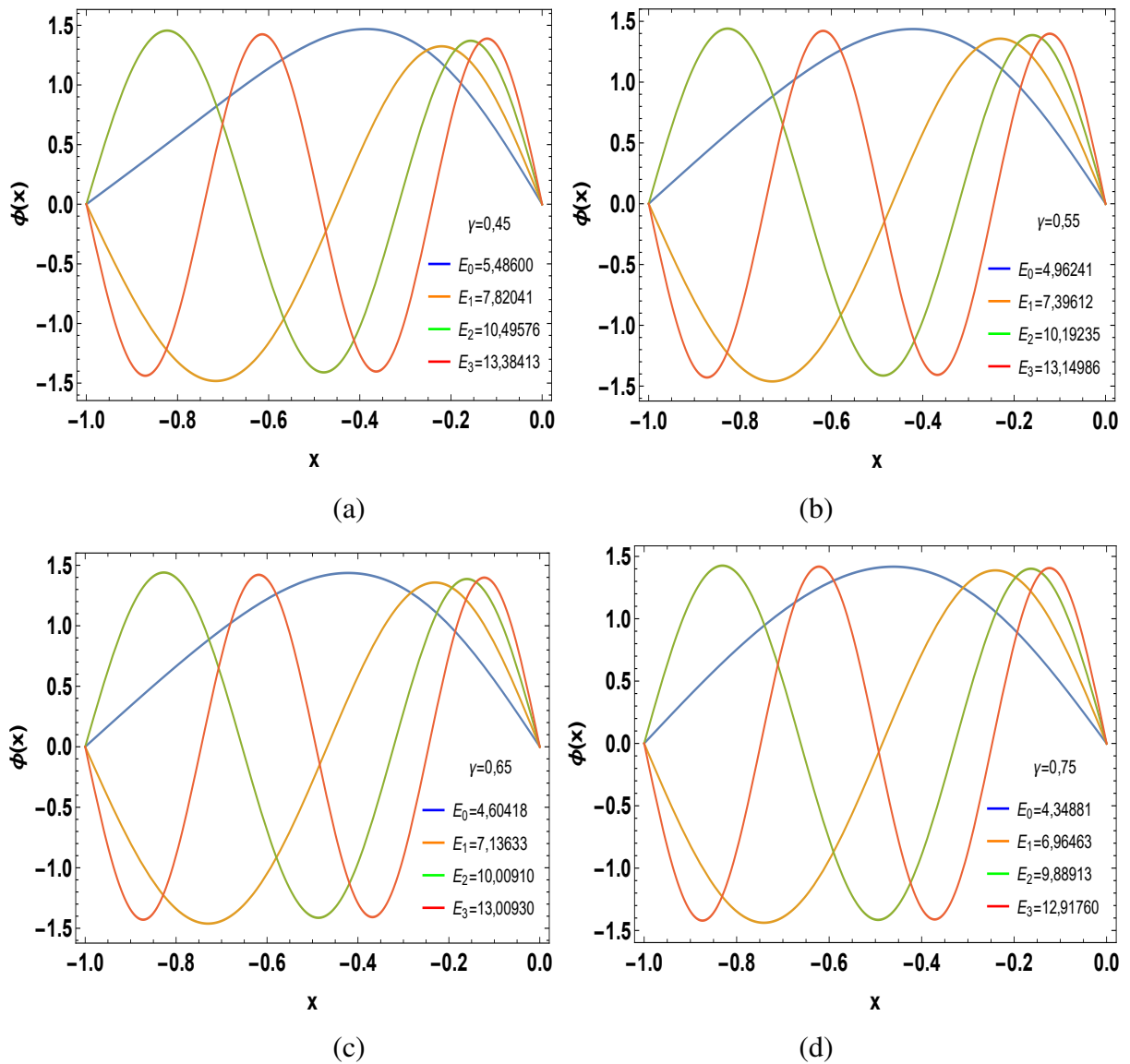
¹ É importante mencionar que fora deste intervalo, a relação obtida possui solução analítica, podendo ser transformada numa equação de Heun.

² A condição de Dirichlet especifica os valores que uma função deve assumir em uma parte específica da fronteira no domínio em que a equação diferencial está sendo resolvida. Em outras palavras, ela descreverá a condição da função na fronteira.

esse comportamento pode ser percebido nos gráficos da Figura 12a), Figura 12b), Figura 12c) e Figura 12d) que mostram a quantização dos 100 primeiros autovalores de E_n .

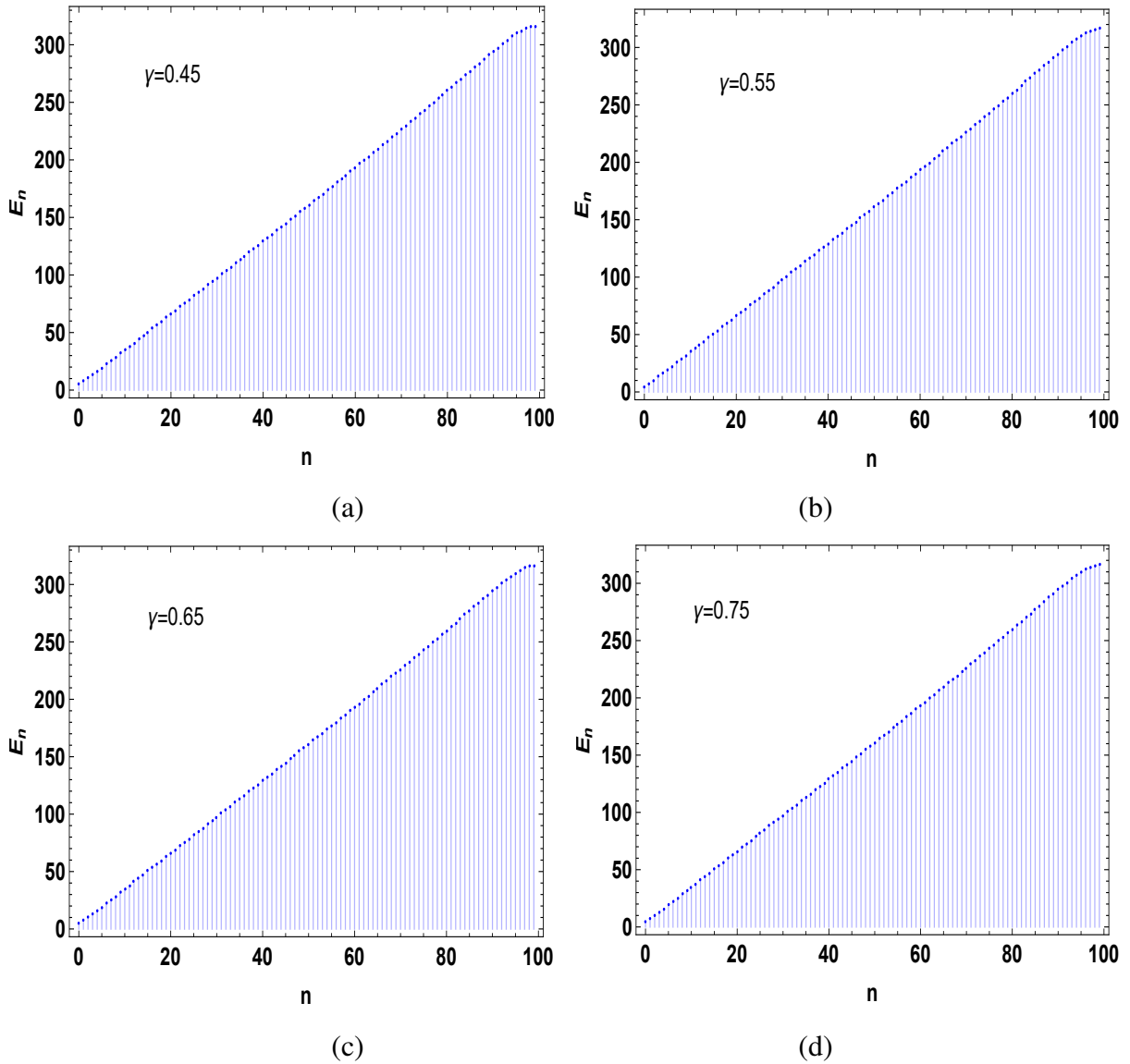
A presença de estados ligados é um resultado interessante sob a perspectiva de que toda a interação produzida na teoria relativística deve-se a distribuição de massa própria do sistema. Assim, pode-se concluir que partículas de Majorana com MDP tipo excíton produzem uma auto-interação que, por sua vez, gera auto-estados quantizáveis.

Figura 11 – Solução numéricas das autofunções de onda dos três primeiros auto-estados obtidas pelo método dos elementos finitos. (a) Solução quando $\gamma = 0,45$. (b) Solução quando $\gamma = 0,55$. (c) Solução quando $\gamma = 0,65$. (d) Solução quando $\gamma = 0,75$.



Fonte: Elaborado pela autora.

Figura 12 – Soluções numéricas da energia em termos do número quântico n para os 100 primeiros autoestados . (a) Solução quando $\gamma = 0,45$. (b) Soluções para $\gamma = 0,55$. (c) Soluções para $\gamma = 0,65$. (d) Soluções para $\gamma = 0,75$.



Fonte: Elaborado pela autora.

6.2 Propriedades Termodinâmicas

Classicamente, a termodinâmica é incomparável em termos de aplicações e relevância na vida cotidiana, possibilitando a descrição de sistemas complexos compostos por muitas partículas em termos de poucas quantidades macroscópicas, como trabalho, energia, e entropia. A medida em que os sistemas descritos por ela tornam-se menores, as flutuações nessas quantidades passam a ser cada vez mais significativas, o que nos leva ao desenvolvimento de uma termodinâmica estocástica. Em regimes quânticos, essas flutuações são causadas por

características como a quantização, a superposição de estados e emaranhamento vinculadas a estes tipos de sistemas. (Vinjanampathy *et al.*, 2016)

O estudo da termodinâmica em regimes quânticos nos leva a possibilidades interessantes, como o desenvolvimento de teorias de entropia e informação quântica (Millen *et al.*, 2016), a otimização de circuitos eletrônicos (Pekola, 2015) e o estudo dos fenômenos de transporte em semicondutores (Donfack *et al.*, 2022; Estreicher *et al.*, 2004). Especificamente em sistemas fermiônicos tipo Majorana, a assinatura termodinâmica é apontada como a chave para a detecção dos estados ligados de Majorana ³ em supercondutores (Smirnov, 2021) e nas fases líquidas de spin quântico ⁴ (Tanaka *et al.*, 2022). Além disso, uma análise termodinâmica e da entropia de Shannon atrelada a férmions de majorana lineares pode ser encontrada na referência (Lima *et al.*, 2021).

Diante disso, analisaremos algumas quantidades termodinâmicas e estatísticas do modelo apresentado neste trabalho. Obtido o comportamento da energia numericamente, podemos prever como um conjunto ou *ensemble* de partículas de majorana com MDP tipo excíton se comportará, construindo primeiramente a sua função de partição total Z para N férmions indistinguíveis

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}, \quad (6.1)$$

com $\beta = 1/K_B T$, em que K_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do banho térmico. Aqui assumimos um *ensemble* canônico, para o qual é permitido a troca de energia com o ambiente. A partir da função de partição podemos definir as quantidades

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z_N, \quad U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N, \quad S = k_B \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta}, \quad \text{and} \quad C_v = -k_B \beta^2 \frac{\partial U}{\partial \beta}. \quad (6.2)$$

Com F correspondendo a energia livre de Helmholtz, U a energia interna média, S a entropia e C_v o calor específico a volume constante. Ressaltamos que a função de partição e as grandezas associadas a ela serão obtidas via abordagem numérica, tomando os autovalores de E_n e aplicando o mesmo método descrito de interpolação em 100 subdivisões descrito na seção anterior. Esse processo retorna os resultados mostrados na Figura 13.

³ Os estados ligados de Majorana são estados quânticos especiais que surgem em sistemas como cadeias de spins ou interfaces de supercondutores topológicos. Estes propiciam a formação de excitações de baixa energia análogas aos férmions de majorana.

⁴ Fases da matéria formada por interações não usuais de spins em certos tipos de materiais magnéticos. Em 1987 foi proposto que tais fases de spin desordenados poderiam descrever a supercondutividade em altas temperaturas (Anderson, 1987).

A análise das curvas das funções termodinâmicas apresentadas, a começar pela energia livre de Helmholtz, nos diz que o sistema possui capacidade máxima de realizar trabalho útil em $T = 0$ e o valor de F tende a ser minimizado na medida em que o sistema atinge o equilíbrio, o que é um comportamento esperado para um sistema fechado e mantido a temperatura constante. Em contrapartida, a energia interna média U aumenta continuamente com a temperatura até alcançar o estado de equilíbrio. Já a entropia tem um comportamento monotonicamente crescente com a temperatura, aumentando até atingir um valor máximo no equilíbrio. Por fim, o calor específico a volume constante aumenta rapidamente com a temperatura, assumindo um comportamento assintótico para um valor constante no equilíbrio. Esse resultado é coerente com a lei de Dulong-Petit, uma vez que, para o aumento de T temos $C_v/N \simeq K_B$.

Os resultados obtidos estão vinculados ao parâmetro de salto, cuja variação tem implicações na amplitude e na forma da função de onda, na energia e na termodinâmica do sistema. Conforme visto anteriormente, valores mais altos para essa quantidade indicam maior probabilidade de transição de elétrons entre os sítios, e conseqüentemente, maior a sobreposição entre os orbitais. Uma sobreposição mais significativa resulta em uma facilitação no trânsito de elétrons entre as bandas, isto é, ocorre uma diminuição do *gap* de energia que, por sua vez, otimiza a propriedade de condutância elétrica.

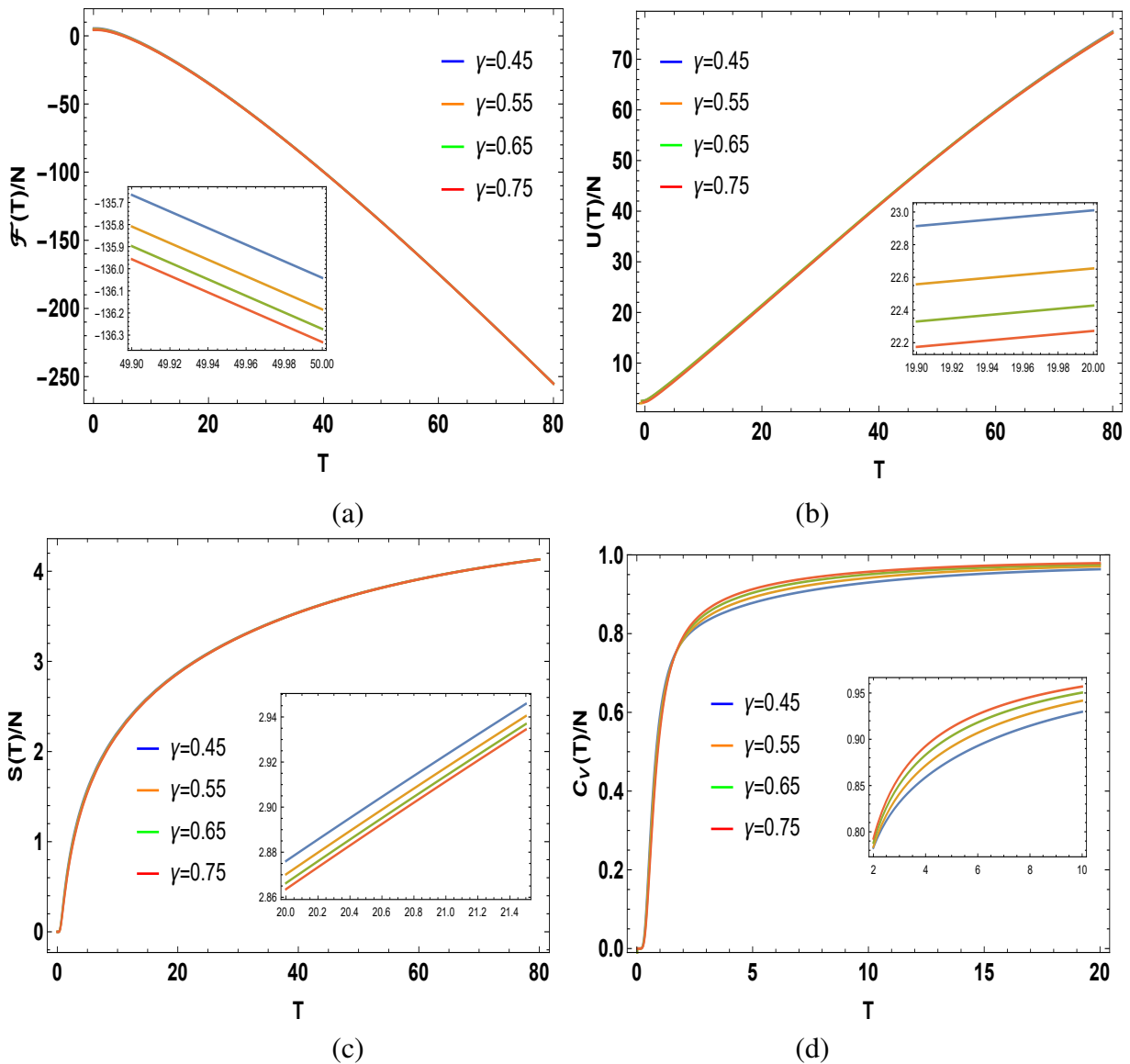
Para as funções de ondas da Figura 11, os menores valores de γ indicam que as regiões de maior probabilidade de encontrar as partículas estão próximas aos limites da primeira zona de Brillouin. Contudo, na medida em que γ cresce nota-se que as funções de onda tornam-se mais simétricas em relação ao centro do intervalo. Para a energia, a influência do parâmetro na estrutura de bandas é percebida pelo fato de que tanto a relação de dispersão $E(k)$ como os autovalores E_n são ligeiramente deslocados para valores menores com o aumento de γ .

Em relação as funções termodinâmicas, a queda nos valores de E_n conforme o parâmetro de salto cresce tende a aumentar os valores da função de partição Z associada às grandezas definidas em 6.2. Pode-se observar que o aumento de γ (e conseqüentemente do acoplamento entre as partículas) está ligado à diminuição da energia livre de Helmholtz, à energia interna, à entropia e ao aumento do calor específico. Fisicamente, podemos atribuir a diminuição da energia interna média do sistema a tendência dos elétrons em ocupar estados menos energéticos⁵, assim como a entropia decairia em virtude da diminuição do número de microestados acessíveis para os elétrons do sistema na medida em que os mesmos tornam-se

⁵ Essa ocupação decorre do princípio de Aufbau.

localizados nos sítios mais próximos. A queda na energia livre de Helmholtz é coerente com a diminuição dos valores de U e S , indicando a diminuição da energia disponível para realizar trabalho no sistema. O aumento no calor específico, por sua vez, pode ser explicado considerando que uma maior delocalização ou uma maior mobilidade de partículas se relaciona a uma maior capacidade de absorver e distribuir energia.

Figura 13 – Propriedades termodinâmicas dos férmions de Majorana com massa efetiva do tipo excíton para valores distintos de γ . (a) Comportamento da energia livre Helmholtz sobre o número de partículas \mathcal{F}/N em função da temperatura T . (b) Energia interna U/N em função de T . (c) Entropia S/N em função de T . (d) Calor específico C_V/N em função de T .



Fonte: Elaborado pela autora.

7 CONCLUSÃO

Esta dissertação dedicou-se ao estudo de um sistema quântico-relativístico unidimensional de partículas de Majorana com uma distribuição de massa tipo excíton, cuja obtenção se deu a partir da junção dos formalismos da equação de Dirac, da teoria de massa efetiva dependente da posição usualmente aplicada a heteroestruturas semicondutoras, e do modelo TB linear. Assumindo a ausência de impurezas, isto é, $V(x) = 0$, foi possível estudar as soluções e os autoestados de energia do sistema.

A aplicação de MDP em uma equação de Dirac $(1 + 1)$ -dimensional com a representação de Majorana retorna um potencial efetivo na forma $V_{\text{ef}} = m^2(x) - m'(x)$, gerado unicamente pela distribuição de massa adotada para as partículas, uma vez que as interações eletromagnéticas são desconsideradas. A definição do perfil da massa $m(x)$ surge da energia de dispersão derivada a partir da abordagem TB da estrutura eletrônica. A forma do potencial final, aplicado no intervalo da primeira zona de Brillouin, produziu uma auto-interação que confinou as partículas, tornando suas energias quantizadas. Em outras palavras, os férmions de Majorana possuem estados ligados para uma massa tipo excíton, mesmo para o caso em que os mesmos estão livres. Mais uma vez reiteramos que a presença de estados ligados para partículas/arranjos de carga neutra é o que denominamos de comportamento excitônico do sistema.

A relevância desse resultado está no fato de que o confinamento torna o arranjo elétron-buraco mais estável, evitando a separação do par. A análise da função de onda e da energia vinculadas a 5.56 mostrou estados ligados característicos de excítons, o que indica que as propriedades desse tipo de quasipartícula também podem ser modeladas através da descrição de férmions. As soluções obtidas numericamente também estão relacionadas ao parâmetro de salto γ , uma quantidade relacionada a ocupação dos elétrons nos sítios de uma estrutura cristalina. De fato, o aumento de γ desloca as regiões de maior probabilidade de encontrar as partículas ao longo do intervalo e causa uma ligeira diminuição nos autovalores de energia E_n .

Determinada a energia, foi construído um ensemble canônico para as partículas que permitiu analisar suas características termodinâmicas. O comportamento das funções como a energia livre de Helmholtz, energia interna e entropia é coerente com as leis da termodinâmica, seguindo as tendências esperadas para um sistema fechado com temperatura constante. Na medida em que evolui até o equilíbrio, a entropia é sempre crescente até atingir um valor máximo, a energia interna aumenta, enquanto a energia livre de Helmholtz é minimizada e o calor específico obedece a conhecida relação de Dulong-Petit.

O parâmetro da estrutura γ apresenta uma tendência de diminuir as quantidades termodinâmicas F , U , S , e de aumentar C_V na medida em que seu valor aumenta, de modo que, para uma maior probabilidade de trânsito dos elétrons nos sítios mais próximos foi observado um declínio na energia disponível. De modo geral, as grandezas macroscópicas observadas fornecem uma indicação de que o sistema proposto neste trabalho pode ser realmente interpretado como uma teoria física termodinamicamente válida.

7.1 Perspectivas futuras

Diante dos resultados obtidos pode-se discutir diversas possibilidades de expansão deste projeto, o que pode ser feito através da análise de algumas propriedades específicas. Entre elas está o estudo de um tipo de entropia distinta vinculada a teoria de informação, conhecida como entropia de Shannon, um conceito que tem sido aplicado em sistemas quânticos diversos (Dehesa *et al.*, 2011; Perinotti *et al.*, 2023; Moreira *et al.*, 2024), permitindo a interpretação de incertezas associadas a propriedades como posição e momento de partículas. Trabalhos envolvendo medições dessa entropia já foram conduzidos em férmions de Majorana lineares (Lima *et al.*, 2021), em sistemas descritos pela equação de Schrödinger com MDP (Guo-Hua *et al.*, 2015) e na investigação do fenômeno de decoerência de excítons em materiais tipo TMDs ¹ (Kenfack-Sadem *et al.*, 2021).

Poderíamos, portanto, utilizar a entropia de informação no ensemble fermiônico de Majorana tipo excíton para entender como o potencial efetivo gerado pela distribuição de massa afeta as incertezas ligadas as probabilidades, o que nos permitiria compreender melhor a transmissão de informação entre as partículas e a interação das mesmas com o meio. Outra perspectiva é continuar o estudo de excítons confinados em heteroestruturas utilizando MDP, uma ideia que tem sido explorada em poços quânticos de materiais como GaAs e AlGaAs (Miranda *et al.*, 2012; Lopes *et al.*, 2013).

De fato, a modelagem de excitons com a condição de MDP causa alterações significativas em suas propriedades. No artigo de (Rojas-Briseño *et al.*, 2017) foi verificado um crescimento na energia de ligação dos excítons em comparação com o mesmo sistema sem o tratamento de massa efetiva. Além disso, observou-se que nos condensados de excíton-polaríton ² presentes em microcavidades ópticas semicondutoras a inclusão de MDP age modificando o

¹ TMD correspondem aos dicalcogenetos de metais de transição.

² Esse tipo de quasipartícula é formada pela interação entre os excítons e os fônons de polarização da estrutura de um material semiconductor.

potencial de confinamento efetivo das partículas (Voronova *et al.*, 2018). Ambas as alterações mencionadas motivam o uso de MDP, tendo em vista que variações na energia e no potencial estão vinculadas a estabilidade das excitações do sistema. Os artigos também destacam a importância de compreender excítons com esse tipo de massa efetiva e manipulá-los para aplicações ópticas dos materiais.

Diante disso, as etapas seguintes seriam focadas no estudo de excítons seguindo o modelo TB apresentado nessa dissertação, com a distinção de que iremos partir da equação de Schrödinger em vez da equação de Dirac, isto é, tomaremos o regime não-relativístico. Apesar da relação de Dirac ter um caráter mais geral, utiliza-se geralmente a equação de Schrödinger pela maior facilidade na manipulação matemática e numérica dos resultados, o que justifica essa escolha. Para isso, definiríamos o operador Hamiltoniano considerando um ordenamento já conhecido na literatura (Li-Kuhn ou Zhu-Kroemer, por exemplo), o qual será aplicado na equação de Schrödinger para análise das soluções e autoenergias.

REFERÊNCIAS

- AGOSTINI, M. *et al.* Probing Majorana neutrinos with double- β decay. **Science**, Washington, DC, v. 365, n. 6460, p. 1445–1448, 2019.
- AGUADO, R. Majorana quasiparticles in condensed matter. **La Rivista del Nuovo Cimento**, [s. l.], v. 40, n. 11, p. 523–593, 2017.
- AJAIB, M A. Non-relativistic limit of the dirac equation. **International Journal of Quantum Foundations**, [s. l.], v. 2, p. 109-120, 2016.
- AL-HASHIMI, M. *et al.* Majorana fermions in a box. **Physical Review D**, [s. l.], v. 95, n. 6, p. 065007, 2017.
- ALICEA, J. Majorana fermions in a tunable semiconductor device. **Physical Review B**, [s. l.], v. 81, n. 12, p. 125318, 2010.
- ANDERSON, C. The positive electron. **Physical Review**, [s. l.], v. 43, n. 6, p. 491, 1933.
- ANDERSON, P. The resonating valence bond state in La₂CuO₄ and superconductivity. science. **American Association for the Advancement of Science**, [s. l.], v. 235, n. 4793, p. 1196–1198, 1987.
- ANTIPOV, A. *et al.* Effects of gate-induced electric fields on semiconductor Majorana nanowires. **Physical Review X**, [s. l.], v. 8, n. 3, p. 031041, 2018.
- ARODZ, H. Relativistic quantum mechanics of the majorana particle. **Acta Physica Polonica B**, Warszawa, Poland, v. 50, p. 2165-2187, 2019.
- Ashcroft, N. W.; MERMIN, D. **Solid state physics**. Boston: Cengage Learning, 2022.
- ATKINS, P. **Quanta: a handbook of concepts**. Oxônia: Oxford University Press, 1991.
- BAHCALL, J. *et al.* Where do we stand with solar neutrino oscillations? **Physical Review D**, [s. l.], v. 58, n. 9, p. 096016, 1998.
- BARCELOS NETO, J. **Matemática para físicos com aplicações: vetores, tensores e spinores**. v. 1. São Paulo: Livraria da Física, 2010

BARCELOS NETO, J. **Teoria de campos e a natureza: parte quântica**. São Paulo: Livraria da Física, 2017.

BENDANIEL, D. *et al.* Space-charge effects on electron tunneling. **Physical review**, [*s. l.*], v. 152, n. 2, p. 683, 1966.

BENDER, C. Making sense of non-Hermitian Hamiltonians. **Reports on Progress in Physics**, [*s. l.*], v. 70, n. 6, p. 947, 2007.

BETHE, H. Possible explanation of the solar-neutrino puzzle. **Physical Review Letters**, [*s. l.*], v. 56, n. 12, p. 1305, 1986.

BIENIEK, M. *et al.* Theory of excitons in atomically thin semiconductors: tight-binding approach. **Nanomaterials**, [*s. l.*], v. 12, n. 9, p. 1582, 2022.

BROFFERIO, C. *et al.* Neutrinoless double beta decay experiments with TeO₂ low-temperature detectors. **Frontiers in Physics**, Lausanne, v. 7, p. 86, 2019.

BURT, M. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. **Journal of Physics: condensed matter**, [*s. l.*], v. 4, n. 32, p. 6651, 1992.

BYRNES, T. *et al.* Exciton–polariton condensates. **Nature Physics**, London, v. 10, n. 11, p. 803–813, 2014.

CAVALCANTE, F. *et al.* Form of the quantum kinetic-energy operator with spatially varying effective mass. **Physical Review B**, [*s. l.*], v. 55, n. 3, p. 1326, 1997.

COWAN, C. *et al.* Detection of the free: a confirmation. **Science**, Washington, DC, v. 124, p. 103–104, 1956.

MOTTA, H. da. Chirality and neutrinos, a student first approach. **Journal of Physics: conference series**, Lima, Peru, v. 1558, n. 1, 2020.

DUTRA, A. de S.; ALMEIDA, C. A. S. Exact solvability of potentials with spatially dependent effective masses. **Physics Letters A**, [*s. l.*], v. 275, n. 1-2, p. 25–30, 2000.

DEHESA, J. S.; ROSA, S. L.; MANZANO, D. Entropy and complexity analyses of D-dimensional quantum systems. **Statistical Complexity: applications in electronic Structure**, [*s. l.*], p. 129–166, 2011.

DIRAC, P. A theory of electrons and protons. **Proceedings of the Royal Society of London**, London, v. 126, n. 801, p. 360–365, 1930.

DIRAC, P. A. M. Quantised singularities in the electromagnetic field. **Proceedings of the Royal Society of London**, London, v. 133, n. 821, p. 60–72, 1931. Disponível em: <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1931.0130>. Acesso em: 10 out. 2024

DONFACK, B.; FOTUEA, A. J. Thermodynamic properties of asymmetric semiconductor quantum wire under the magnetic field. **Research Square**, [s. l.], sep. 2022.

DRESSELHAUS, M. *et al.* **Solid state properties**. Alemanha: Springer-Verlag, Springer, 2018.

ESTREICHER, S. *et al.* Thermodynamics of impurities in semiconductors. **Physical Review B**, [s. l.], v. 70, n. 12, p. 125209, 2004.

ASHRAFI, B. The strangest man: the hidden life of paul dirac, mystic of the atom. **Physics Today**, Melville, NY, v. 62, n. 12, p. 52, 2009.

FAZZINI, T. *et al.* Electron decay of the pion. **Physical Review Letters**, [s. l.], v. 1, n. 7, p. 247, 1958.

FENG, J. L. Dark matter candidates from particle physics and methods of detection. **Annual Review of Astronomy and Astrophysics**, [s. l.], v. 48, p. 495–545, 2010.

FLORES, J.; SOLOVEY, G.; GIL, S. Variable mass oscillator. **American Journal of Physics**, [s. l.], v. 71, n. 7, p. 721–725, 2003.

FOLDY, L. F.; WONTHUYSEN, S. A. On the Dirac theory of spin 1/2 particles and its non-relativistic limit. **Physical Review Journals Archive**, [s. l.], v. 78, n. 1, p. 29, 1950.

FU, L.; KANE, C. L. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator. **Physical review letters**, [s. l.], v. 100, n. 9, p. 096407, 2008.

GANDOLFI, A. **Ettore Majorana**. Disponível em: <https://www.aif.it/fisico/biografia-ettore-majorana/>. Acesso em: 23 out. 2024

ALVAREZ-GAUME, L.; VAZQUEZ-MOZO, M. A. Introductory lectures on quantum field theory. *In*: CERN - LATIN-AMERICAN SCHOOL OF HIGH-ENERGY PHYSICS, 7, 2013, Arequipa, Peru. **Proceedings [...]** Salamanca: Universidad de Salamanca, 2013.

GORA, T. *et al.* **II-VI Semiconducting Compounds**. Benjamin New York: W. A. Benjamin, 1967.

GORA, T.; WILLIAMS, F. Theory of electronic states and transport in graded mixed semiconductors. **Physical Review Journals Archive**, [s. l.], v. 177, n. 3, p. 1179, 1969.

GORDON, W. Der comptoneffekt nach der schrödingerschen theorie. **Zeitschrift für Physik**, [s. l.], v. 40, n. 1-2, p. 117–133, 1926.

GREINER, W.; BROMLEY, D. A. **Relativistic quantum mechanics: wave equations**. 3th. ed. New York: Springer, 2000.

GROSS, F. **Relativistic quantum mechanics and field theory**. Germany: Wiley-VCH, 2004.

GRUNDMANN, M. **The physics of semiconductors: an introduction including nanophysics and applications**. 2nd. ed. Germany: Springer, 2010.

GUO-HUA, S. *et al.* Shannon information entropies for position-dependent mass Schrödinger problem with a hyperbolic well. **Chinese Physics B**, [s. l.], v. 24, n. 10, p. 100303, sep. 2015.

HADJIDEMETRIOU J. Secular variation of mass and the evolution of binary systems. *In*: BLACKWELL, D. E. *et al.* **Advances in Astronomy and Astrophysics**. v. 5. England: ZDENEK KOPAL, 1967. p. 131–188.

HARLE, N.; SHTANKO, O.; MOVASSAGH, R. Observing and braiding topological Majorana modes on programmable quantum simulators. **Nature Communications**, London, v. 14, n. 2286, p. 1- 8, 2023.

HOJMAN, S.; ASENJO, F. A. Supersymmetric Majorana quantum cosmologies. **Physical Review D**, [s. l.], v. 92, n. 8, p. 083518, 2015.

JACKIW, R. Fractional and Majorana Fermions: the physics of zero energy modes. **Physica Scripta**, [s. l.], v. 2012, n. T146, p. 10-05, jan. 2012.

JIANG, Z. *et al.* Exciton-Polaritons and Their Bose–Einstein Condensates in Organic Semiconductor Microcavities. **Advanced Materials**, [s. l.], v. 34, n. 4, p. 2106095, jan. 2022.

KADIN, A. M. Spatial structure of the cooper pair. **Journal of superconductivity and novel magnetism**, [s. l.], v. 20, n. 4, p. 285–292, 2007.

KAWAMURA, K.; BROWN, R. A. Bargmann's theorem and position-dependent effective mass. **Physical Review B**, [s. l.], v. 37, n. 8, p. 3932, mar. 1988.

KENFACK-SADEM, C. *et al.* Magnetic effect on dynamic and decoherence of exciton polaron in transition metal dichalcogenides. **Physica Scripta**, [s. l.], v. 96, n. 12, p. 125824, 2021.

KITAEV, A. Y. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. **Physics-uspekhi**, [s. l.], v. 44, n. 131, p. 131-136, 2001.

KITTEL, C. **Introduction to solid state physics**. United States of America: John Wiley & sons, 2005.

KLEIN, O. Quantentheorie und fünfdimensionale relativitätstheorie. **Zeitschrift für Physik**, [s. l.], v. 37, n. 12, p. 895–906, 1926.

KUTZELNIGG, W. Perturbation theory of relativistic corrections: 1. the non-relativistic limit of the dirac equation and a direct perturbation expansion. **Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters**, [s. l.], v. 11, p. 15–28, 1989.

LAWSON, L. Position-dependent mass in strong quantum gravitational background fields. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, [s. l.], v. 55, n. 10, p. 105303, 2022.

Li, T. L.; KUHN, K. J. Band-offset ratio dependence on the effective-mass Hamiltonian based on a modified profile of the GaAs-Al_xGa_{1-x}As quantum well. **Physical Review B**, [s. l.], v. 47, n. 19, p. 12760, 1993.

LIMA, F. Quantum information entropies for a soliton at hyperbolic well. **Annals of Physics**, [s. l.], v. 442, p. 168906, 2022.

LIMA, F. *et al.* Statistical properties of linear Majorana fermions. **International Journal of Quantum Chemistry**, [s. l.], v. 121, n. 18, p. e26749, 2021.

LIMA, F. C. E.; MONTEIRO, L. N.; ALMEIDA, C. A. S. Non-Hermitian fermions with effective mass. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, [s. l.], v. 150, p. 115682, 2023.

LIMA, W. P. *et al.* Tight-binding model in first and second quantization for band structure calculations. **Brazilian Journal of Physics**, [s. l.], v. 52, n. 2, p. 42, 2022.

LOGAN, D. L. **A first course in the finite element method**. 5th. ed. Chon Buri, Thailand: CL Engineering, 2011.

LOPES, E. M. *et al.* Theoretical and experimental study of the excitonic binding energy in GaAs/AlGaAs single and coupled double quantum wells. **Journal of luminescence**, [s. l.], v. 144, p. 98–104, dec. 2013.

LUTCHYN, R. M.; SAN, J. D.; SARMA, S. D. Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures. **Physical review letters**, [s. l.], v. 105, n. 7, p. 077001, aug. 2010.

LUTCHYN, R. M.; STANESCU, T. D.; SARMA, S. D. Search for Majorana fermions in multiband semiconducting nanowires. **Physical review letters**, [s. l.], v. 106, n. 12, p. 127001, mar. 2011.

LUTCHYN, R. M. *et al.* Majorana zero modes in superconductor–semiconductor heterostructures. **Nature Reviews Materials**, London, v. 3, n. 5, p. 52–68, may 2018.

MAJORANA, E. Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone. **Il Nuovo Cimento (1924-1942)**, [s. l.], v. 14, n. 4, p. 171–184, 1937.

MANFREDI, G. Non-relativistic limits of Maxwell's equations. **European Journal of Physics**, [s. l.], v. 34, n. 4, p. 859-871, 2013.

MARDER, M. P. **Condensed matter physics**. 2nd. ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2010.

MARTIN, S. P. A supersymmetry primer. *In*: KANE, G. L. (ed.) **Perspectives on supersymmetry II**. v. 21. New Jersey: World Scientific, 2010. p. 1–153.

MESSIAH, A. **Quantum mechanics**. Mineola, NY: Dover Publications, 2014.

MILEN, J.; XUEREBA, A. Perspective on quantum thermodynamics. **New Journal of Physics**, [s. l.], v. 18, n. 1, p. 011002, 2016.

- MIRANDA, G. L.; MORA-RAMOS, M. E.; DUQUE, C. A. Exciton-related energies of the 1s-like states of excitons in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs double quantum wells. **Journal of luminescence**, [s. l.], v. 132, n. 10, p. 2525–2530, 2012.
- MOREIRA, A. R. P. *et al.* The influence of a magnetic field on shannon entropy and thermal properties in graphene. **Chinese Journal of Physics**, [s. l.], v. 89, p. 366-377, jun. 2024.
- OBERTELLI, A.; SAGAWA, H. **Modern nuclear physics: from fundamentals to frontiers**. Singapore: Springer, 2021.
- O'RAIFEARTAIGHIL, L.; STRAUMANN, N. Gauge theory: historical origins and some modern developments. **Reviews of Modern Physics**, [s. l.], v. 72, n. 1, p. 1-23, jan.-mar. 2000.
- PAXTON, A. An introduction to the tight binding approximation–implementation by diagonalisation. *In*: GROTENDORST, J. *et al.* **Multiscale simulation methods in molecular sciences lecture notes**. v. 42. Germany: Jülich Supercomputing Centre, 2009. p. 145-176.
- PEKOLA, J. Towards quantum thermodynamics in electronic circuits. **Nature physics**, London, v. 11, n. 2, p. 118–123, 2015.
- PERINOTTI, P.; TOSINI, A.; VAGLINI, L. Shannon theory for quantum systems and beyond: information compression for fermions. *In*: PLOTNITSKY, A.; HAVEN, E. **The Quantum-Like Revolution: a festschrift for Andrei Khrennikov**. Switzerland: Springer, 2023. p. 135–156.
- PERKINS, D. H. **Introduction to high energy physics**. 4th. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- QUESNE, C. Generalized semiconfined harmonic oscillator model with a position-dependent effective mass. *The European Physical Journal Plus*, [s. l.], v. 137, n. 225, p. 1– 6, feb. 2022.
- RENAN, R.; PACHECO, M. H.; ALMEIDA, C. A. S. Treating some solid state problems with the Dirac equation. **Journal of Physics A: mathematical and general**, [s. l.], v. 33, n. 50, p. L509 - L514, 2000.
- REZENDE, S. M. **Materiais e dispositivos eletrônicos**. 2 ed. São Paulo: Livraria da Física, 2004.

RICHSTONE, D. O.; POTTER, M. D. Galactic mass loss—a mild evolutionary correction to the angular size test. **Astrophysical Journal**, [s. l.], part 1, v. 254, p. 451–455, mar. 1982.

ROJAS-BRISEÑO, J. G.; MIRANDA-PEDROZA, G. L.; MARTÍNEZ-OROZCO, J. C. Exciton binding energy in coupled double zinc blende GaN/InGaN quantum well. **Basic Solid State Physics**, v. 254, n. 4, p. 1600461, apr. 2017.

ROY, B. On the effective mass Dirac equation. **Modern Physics Letters B**, [s. l.], v. 20, n. 17, p. 1033 – 1039, 2006.

RUZHANSKY, M.; SEBIH, M. E.; TOKMAGAMBETOU, N. Schrödinger equation with singular position dependent mass. **Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen**, [s. l.], v. 42, n. 1-2, p. 131–144, 2023.

RYDER, L. H. **Quantum field theory**. 2nd. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.

SANCHES, J. E. *et al.* Fractionalization of Majorana-Ising-type quasiparticle excitations. **Physical Review B**, [s. l.], v. 107, n. 15, p. 155144, 2023.

SARMA, S. D.; FREEDMAN, M.; NAYAK, C. Majorana zero modes and topological quantum computation. **Quantum Information**, [s. l.], v. 1, n. 15001, p. 1–13, oct. 2015.

SCHOLES, G. D.; RUMBLES, G. Excitons in nanoscale systems. **Nature materials**, London, v. 5, n. 9, p. 683–696, 2006.

SMIRNOV, S. Majorana ensembles with fractional entropy and conductance in nanoscopic systems. **Physical Review B**, [s. l.], v. 104, n. 20, p. 205406, nov. 2021.

STANESCU, T. D.; LUTCHYN, R. M.; SARMA, S. D. Majorana fermions in semiconductor nanowires: fundamentals, modeling, and experiment. **Journal of Physics: condensed matter**, [s. l.], v. 25, n. 23, p. 233201, 2013.

TANAKA, O. *et al.* Thermodynamic evidence for a field-angle-dependent Majorana gap in a Kitaev spin liquid. **Nature Physics**, London, v. 18, n. 4, p. 429–435, 2022.

TUTSCHKU, C. *et al.* Majorana-based quantum computing in nanowire devices. **Physical Review B**, [s. l.], v. 102, n. 12, p. 125407, sep. 2020.

ULLAL, C. K.; SHI, J.; SUNDARARAMAN, R. Electron mobility in graphene without invoking the Dirac equation. **American Journal of Physics**, [s. l.], v. 87, n. 4, p. 291–295, apr. 2019.

VINJANAMPATHY, S.; ANDERS, J. Quantum thermodynamics. **Contemporary Physics**, [s. l.], v. 57, n. 4, p. 545–579, 2016.

VON ROSS, O. Position-dependent effective masses in semiconductor theory. **Physical Review B**, [s. l.], v. 27, n. 12, p. 7547, 1983.

VORONOVA, N. S.; LOZOVIK, Y. E. On the position-dependent effective mass in Bose condensates of photons and polaritons in an optical microcavity trap. **JETP Letters**, [s. l.], v. 108, n. 12, p. 791–795, dec. 2018.

WEINBERG, S. **The quantum theory of fields: modern applications**. v. 2. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.

WILCZEK, F. Majorana returns. **Nature Physics**, London, v. 5, n. 9, p. 614–618, 2009.

WU, H.; SAULS, J. A. Majorana excitations, spin and mass currents on the surface of topological superfluid $^3\text{He-B}$. **Physical Review B**, [s. l.], v. 88, n. 18, p. 184506, nov. 2013.

XIAO, J. *et al.* Excitons in atomically thin 2D semiconductors and their applications. **Nanophotonics**, [s. l.] v. 6, n. 6, p. 1309–1328, 2017.

YAKOUT, S. M. Spintronics: future technology for new data storage and communication devices. **Journal of superconductivity and novel magnetism**, [s. l.], v. 33, n. 9, p. 2557–2580, 2020.

YAZDANI, A. *et al.* Hunting for Majoranas. **Science**, [s. l.], v. 380, n. 6651, p. eade0850, 2023.

YOUNG, K. Position-dependent effective mass for inhomogeneous semiconductors. **Physical Review B**, [s. l.], v. 39, n. 18, p. 13434, 1989.

ZHANG, Q.; WU, B. Majorana modes in solid state systems and its dynamics. **Frontiers of Physics**, [s. l.], v. 13, n. 2, p. 1–7, 2018.

ZHU, Q-G.; KROEMER, H. Interface connection rules for effective-mass wave functions at an abrupt heterojunction between two different semiconductors. **Physical Review B**, [s. l.] v. 27, n. 6, p. 3519, 1983.