

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Programa de Pós - Graduação - INFIS
Joelson Fernandes Silva

Estados ligados de Andreev e Majorana em pontos quânticos

Uberlândia

2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Programa de Pós - Graduação - INFIS
Joelson Fernandes Silva

Estados ligados de Andreev e Majorana em pontos quânticos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Física Teórica.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Orientador:
Prof. Dr. Edson Vernek

Uberlândia

2017

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

S586e Silva, Joelson Fernandes, 1992-
2017 Estados ligados de Andreev e Majorana em pontos quânticos /
Joelson Fernandes Silva. - 2017.
142 f. : il.

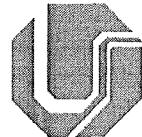
Orientador: Edson Vernek.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Programa de Pós-Graduação em Física.
Inclui bibliografia.

1. Física - Teses. 2. Supercondutividade - Teses. 3. Fermions - Teses. 4. Supercondutores - Teses. I. Vernek, Edson. II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDU: 53



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



JOELSON FERNANDES SILVA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, do Instituto de Física, da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Uberlândia, 15 de Fevereiro de 2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Edson Vernek
Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Prof. Dr. Gerson Ferreira Junior
Universidade Federal de Uberlândia - UFU

Prof. Dr. Vivaldo Leiria Campô Junior
Universidade Federal de São Carlos - UFSCAR

Resumo

Apresentamos um estudo numérico da emergência de estados ligados de Andreev e Majorana em um sistema composto por dois pontos quânticos, um acoplado a um supercondutor usual, SC1, e outro conectado a um supercondutor topológico, SC2. Através do controle do entre os pontos quânticos estudamos o sistema desde o regime em que os pontos quânticos estão desacoplados ente si até o regime de forte acoplamento mútuo. Aplicando o método das funções de Green recursivas extraímos o resultado numericamente exato da densidade de estados local do sistema. Primeiramente, mostramos que na configuração de pontos quânticos desacoplados, estados ligados de Majorana e Andreev não coexistem em um único ponto quântico. Num segundo momento, estudamos sua coexistência no sistema de pontos quânticos acoplados. Nesta configuração, na fase trivial de SC2, mostramos que os estados ligados de Andreev encontram-se ligados a um único ponto quântico no regime atômico (fraco acoplamento entre os pontos) ou estendidos em toda molécula no regime molecular (forte acoplamento entre os pontos). Fenômenos ainda mais interessantes surgem na fase topológica de SC2. Neste caso, no limite atômico, o estado ligado de Andreev aparece ligado à um dos pontos quânticos, enquanto o Majorana aparece no outro. No regime molecular, os estados ligados de Andreev se encontram estendidos em toda a molécula, mas o estado de Majorana continua ligado a apenas um dos pontos quânticos.

Palavras Chaves: Estados ligados de Andreev, Estados ligados de Majorana, Supercondutores topológicos, Efeitos de proximidade, Densidade de estados.

Abstract

We present a numerical study of the emergence of Majorana and Andreev bound states in a system composed of two quantum dots, one of which is coupled to a conventional superconductor, SC1, and the other connects to a topological superconductor, SC2. By controlling the interdot coupling we can drive the system from two single (uncoupled) quantum dots to double (coupled) dot system configurations. We employ a recursive Green's function technique that provides us with numerically exact results for the local density of states of the system. We first show that in the uncoupled dot configuration (single dot behavior) the Majorana and the Andreev bound states appear in an individual dot in two completely distinct regimes. Therefore, they cannot coexist in the single quantum dot system. We then study the coexistence of these states in the coupled double dot configuration. In this situation we show that in the trivial phase of SC2, the Andreev states are bound to an individual quantum dot in the atomic regime (weak interdot coupling) or extended over the entire molecule in the molecular regime (strong interdot coupling). More interesting features are actually seen in the topological phase of SC2. In this case, in the atomic limit, the Andreev states appear bound to one of the quantum dots while a Majorana zero mode appears in the other one. In the molecular regime, on the other hand, the Andreev bound states take over the entire molecule while the Majorana state remains always bound to one of the quantum dots.

Keywords: Andreev bound states, Majorana bound states, Topological superconductors, Proximity effects, Density of states.

**“Under the calm mask of matter
The divine fire burns.”**

Vladimir Solovyev

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 8
1.1	Objetivos e Metologia	p. 10
2	Supercondutividade	p. 11
2.0.1	Teoria de Campo Médio	p. 12
2.0.2	Teoria BCS da supercondutividade	p. 15
2.0.3	Formalismo de Nambu	p. 16
2.1	Supercondutividade induzida e estados ligados de Andreev	p. 24
3	Supercondutividade tipo p em fios quânticos com forte acoplamento spin-órbita	p. 33
3.1	Formalismo de Nambu: Simetria partícula-buraco no Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes	p. 34
3.2	Modelo de Kitaev	p. 37
3.2.1	Topologia e matéria condensada	p. 41
3.2.2	Invariante Topológico do modelo de Kitaev	p. 44
3.3	Supercondutividade efetiva do tipo p	p. 50
4	Estados ligados de Andreev e Majorana em pontos quânticos	p. 70
4.1	Motivação	p. 70
4.2	Cálculo iterativo da função de Green para a cadeia supercondutora	p. 73
4.3	Funções de Green dos Pontos Quânticos	p. 78

4.4	Densidade de estados	p. 80
4.5	Resultados	p. 81
4.5.1	Configuração de pontos quânticos desacoplados ($V_{12} = 0$)	p. 82
4.5.2	Configuração de dois pontos quânticos acoplados ($V_{12} \neq 0$)	p. 84
5	Conclusão	p. 93
APÊNDICES		p. 94
Apêndice A – Representações na Mecânica Quântica		p. 95
A.1	Representação de Schrodinger	p. 95
A.2	Representação de Heisenberg	p. 96
A.3	Representação de Interação	p. 97
Apêndice B – Funções de Green		p. 103
B.1	Equação de Movimento para a função de Green	p. 111
B.2	Equação de Dyson	p. 116
B.3	Líquido de Landau-Fermi	p. 119
Apêndice C – Sistemas fora do equilíbrio- Resposta linear		p. 122
C.1	Formula de Kubo	p. 122
C.2	Corrente de Tunelamento	p. 126
Referências Bibliográficas		p. 136

Lista de Figuras

- 1 Figura esquemática dos pares de Cooper. A linha tracejada denota o estado ligado dos elétrons que formam os pares de Cooper no estado $|\mathbf{k}, \uparrow, -\mathbf{k}, \downarrow\rangle$, note que o comprimento de correlação dos pares de Cooper é muito maior do que a distância entre os elétrons. Fonte: Henrik Bruus, Karsten Flensberg. Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An introduction. Oxford Graduate Texts, 2003. p. 12
- 2 Densidade de Estados de um supercondutor usual extraída da teoria BCS. No interior do gap supercondutor apenas pares de Cooper são permitidos. p. 24
- 3 Reflexão de Andreev na junção X/supercondutor, onde X representa um material usual, seja metálico ou semicondutor. Vemos que um elétron incidente na interface com um supercondutor produz a reflexão de um buraco, perceba que com momento e spin invertidos. Fonte: Jean-Damien Pillet, Tunneling spectroscopy of the Andreev Bound States in a Carbon Nanotube, PhD thesis, 2011. p. 25
- 4 Ponto Quântico acoplado a um reservatório supercondutor. Fonte: Elaborada pelo autor. p. 27
- 5 Densidade de Estados do PQ acoplado a um reservatório normal ($\Delta = 0$), como a presença do reservatório apenas alarga o nível, como esperado da aproximação de banda larga. p. 31
- 6 Densidade de Estados do PQ acoplado a um reservatório supercondutor ($\Delta \neq 0$), note que agora o espectro apresenta características supercondutoras, além de ABS no interior do gap. p. 31
- 7 (a) Transição de fase segundo a teoria de Landau. (b) Transição de fase topológica. Figura adaptada de L. Tsui, F. Wang, and D. H. Lee, arxiv: 1511.07460v1. p. 42
- 8 Quantização da condutância no efeito Hall quântico. Essa quantização tem origem nas distintas fases topológicas que o sistema apresenta que se diferem em números inteiros associados com o invariante topológico da fase em questão. p. 43

- 9 (a) Energia cinética para o modelo de Kitaev.(b) Regime topológico trivial, observe que o gap se fecha em determinado ponto.(c) Regime topológico não-trivial, perceba que o gap continua aberto neste caso, distinguindo-se do caso trivial(b). Fonte: Reports on Progress in Physics, 75(7):076501. p. 46
- 10 (a) Limite em que $\mu \neq 0$ e $t = \Delta = 0$ e (b) $\mu = 0$, $t = \Delta \neq 0$, perceba que neste limite temos na ponta da cadeia $\gamma_{A,1}$ e $\gamma_{B,N}$ formam um modo de Majorana de energia zero. Fonte: Reports on Progress in Physics, 75(7):076501. p. 49
- 11 Campo magnético aplicado em um fio quântico próximo a um supercondutor. Fonte: Reports on Progress in Physics, 75(7):076501. p. 50
- 12 Relação de dispersão para $V_z = 0$ ($\vec{B} = 0$). Perceba que temos uma degenerescência exatamente em $k = 0$, impedindo assim a existência de estados "spinless". p. 58
- 13 Relação de dispersão para $V_z \neq 0$ ($\vec{B} \neq 0$). Note que a degenerescência em $k = 0$ desaparece devido a polarização dos spins induzida pelo campo magnético aplicado. Permitindo acoplamento p-wave. p. 58
- 14 Estrutura de banda do fio supercondutor para campo magnético nulo. A linha tracejada corresponde à posição do potencial químico com relação ao fundo da banda, definida por $\tilde{\mu} = \mu + 2t$. A escolha do alto valor da interação spin-órbita (α) é apenas para a melhor vizualização das bandas. p. 68
- 15 Estrutura de banda do fio supercondutor para pequeno campo magnético. A linha tracejada corresponde à posição do potencial químico com relação ao fundo da banda, definida por $\tilde{\mu} = \mu + 2t$. Perceba que a região de acesso a emparelhamento supercondutor do tipo p é bastante limitada. p. 68
- 16 Estrutura de banda do fio supercondutor. A linha tracejada corresponde à posição do potencial químico com relação ao fundo da banda, definida por $\tilde{\mu} = \mu + 2t$. O gap se fecha em $k = 0$, caracterizado pela energia de Zeeman crítica $V_Z^c = \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\mu}^2}$, no presente caso $V_Z^c \approx 2.01t$ p. 69
- 17 Estrutura de banda do fio supercondutor, com $V_Z > V_Z^c$. A linha tracejada corresponde à posição do potencial químico com relação ao fundo da banda, definida por $\tilde{\mu} = \mu + 2t$. Neste caso o supercondutor é topológico e sua interface com o vácuo (trivial) irá suportar modos de Majorana. p. 69

- 18 Esquematização do contato entre um nível ressonante e um supercondutor usual (figura superior) e topológico (figura inferior). No caso usual vemos a formação do estado ligado de Andreev, enquanto na inferior a presença do modo de Majorana. Fonte: Figura elaborada por Edson Vernek e adaptada pelo autor. p. 70
- 19 Esquematização de um sistema que suporte tanto estados ligados de Andreev quanto de Majorana e que possibilite a interação entre ambos. Fonte: Figura elaborada por Edson Vernek e adaptada pelo autor. p. 71
- 20 Sistema de estudo. Dois pontos quânticos acoplados entre si e os mesmos a acoplados a reservatórios metálicos e fios supercondutores, sendo que o supercondutor SC2 apresenta uma fase topológica. p. 71
- 21 Densidade de estados local (LDOS) do PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para ambas componentes de spin, variando a energia, o potencial μ (esquerda) e energia de Zeeman V_Z (direita). Na esquerda mantemos $V_Z = 0.05t$ fixo e variamos μ , e no lado direito variamos a energia de Zeeman V_Z mantendo fixo o potencial químico em $\mu = -1.01t$. As linhas tracejadas denotam a transição de fase topológica corroborando com o critério $V_Z > \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\mu}^2}$, com $\tilde{\mu} = \mu + t$ p. 82
- 22 Densidade de estados local(LDOS) em energia zero do PQ2 para ambas componentes de spin, variando o potencial μ (esquerda) e energia de Zeeman V_Z (direita) usando os mesmos parâmetros da figura 21. p. 84
- 23 Densidade de estados local(LDOS) do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin down, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . São mostrados os resultados para a fase trivial (painéis superiores) e para a fase topológica (painéis inferiores), perceba na fase topológica a passagem do modo de Majorana do PQ2 para o PQ1 para grandes valores de V_{12} p. 85
- 24 Densidade de estados local(LDOS) do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin up, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . São mostrados os resultados para a fase trivial (painéis superiores) e para a fase topológica (painéis inferiores), perceba que para grandes valores de V_{12} o PQ2 apresenta modos de Majorana mediados pelos estados ligados de Andreev. p. 86
- 25 Função espectral de Majorana (MSF) no regime trivial do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin up, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} p. 87

26	Função espectral de Majorana (MSF) no regime trivial do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin down, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12}	p. 88
27	Função espectral de Majorana (MSF) no regime topológico do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin up, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . Note a presença de um modo de Majorana em energia zero no PQ2 apenas para valos grandes de V_{12}	p. 88
28	Função espectral de Majorana (MSF) no regime topológico do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin down, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . Perceba a separação energética entre os modos de Majorana A e B em PQ2.	p. 89
29	Densidade de estados local molecular (MLDOS) no regime topológico em unidades de $1/\pi\Gamma$ para ambas componentes de spin, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . Perceba que neste caso não temos PQ1 e PQ2, mas os orbitais moleculares \pm	p. 89
30	Densidade de estados local (LDOS) em energia zero dos PQ's em função do acoplamento V_{12} . No regime trivial (painéis superiores) e no regime topológico (painéis inferiores).	p. 91
31	Densidade de estados local (LDOS) em energia zero dos PQ's em função da energia de Zeeman V_Z . No regime atômico (painéis superiores) e no regime molecular (painéis inferiores).	p. 92
32	Representação esquemática do funcionamento do método de STM. O movimento da ponta de prova é controlado por um tubo piezoeletrico que vare a superfície da amostra. Uma diferença de potencial aplicada na amostra produz uma corrente de tunelamento mostrada em detalhes no círculo em destaque. Fonte: Michael Schmid, TU Wien. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Scanning_tunneling_microscope . p. 127	

1 *Introdução*

A supercondutividade consiste em um dos fenômenos mais interessantes da natureza. Supercondutores possuem essencialmente duas propriedades fundamentais: sua resistividade vai a zero abaixo de uma temperatura crítica T_c , e eles expelem todo campo magnético em seu interior, comportando-se como diamagnéticos perfeitos, esse fenômeno é conhecido como efeito Meissner (2, 3).

A teoria da supercondutividade a baixas temperaturas foi desenvolvida com sucesso por Bardeen, Schrieffer e Cooper, a qual hoje é conhecida como teoria BCS (4, 5). O mecanismo principal pela supercondutividade a baixas temperaturas é a interação atrativa entre elétrons mediada por fôons, formando os chamados pares de Cooper. No entanto, nos anos 80 foram descobertos supercondutores a temperaturas críticas muito mais altas do que a teoria BCS era capaz de explicar. Esses supercondutores a altas temperaturas continuam um mistério até os dias atuais (6).

Junções entre materiais normais e supercondutores apresentam propriedades interessantes e que podem ser exploradas de diversas maneiras. O fenômeno mais interessante nestas junções é a chamada reflexão de Andreev (7). A reflexão de Andreev consiste na reflexão de um elétron do sistema normal em um buraco no mesmo, com spin e momento oposto ao elétron incidente. Diversas reflexões deste tipo dão origem aos chamados estados ligados de Andreev, que residem energeticamente no interior do gap supercondutor.

Recentemente, um novo aspecto dos supercondutores ganhou bastante destaque e vem sendo assunto de diversas pesquisas atuais. Isso decorre do fato que, em 2001, o físico russo Alexei Kitaev mostrar que supercondutores topológicos podem suportar excitações que se comportam como férmons de Majorana (8). Desde então, a procura por tais excitações exóticas, no âmbito da matéria condensada, se tornou um dos tópicos principais de pesquisa nesta área (9, 10).

Férmons de Majorana são férmons que possuem a peculiar propriedade de serem suas próprias anti-partículas. Foram propostos originalmente por Ettore Majorana, na busca de soluções puramente reais da equação relativística de Dirac (11). Como consequência, os férmons que obedecessem essa

condição, deveriam ser eletricamente neutros e serem suas próprias anti-partículas, o que reflete no fato de possuírem funções de onda puramente reais. Na linguagem de segunda quantização, isso significa que o operador que aniquila este férnion em certo estado, é idêntico ao operador que cria o mesmo. Acredita-se que os neutrinos possam vir a ser férnions de Majorana. No entanto, até os dias atuais não houve ainda evidência de alguma partícula elementar que se comporta-se de tal forma (12, 13).

Em supercondutores topológicos, não temos tais partículas elementares, mas excitações que se comportam como férnions de Majorana, muitas vezes também denominados modos de Majorana (8). Nestes sistemas, temos que a fase topológica em questão garante a existência de estados protegidos que podem suportar tais excitações exóticas. Aqui, assim como nos aclamados isolantes topológicos, a noção de topologia surge para explicar as diferentes fases da matéria, mesmo que não haja nenhuma quebra espontânea de simetria no sistema, a qual determina as transições de fase no sentido usual (teoria de teoria de Landau-Ginzburg-Wilson) (14, 15).

Supercondutores topológicos são sistemas que naturalmente podem exibir férnions de Majorana sob condições específicas. Isso porque, as excitações em supercondutores são superposições de elétrons e buracos, que na condição de simetria partícula-buraco, tornam-se eletricamente neutras. O papel da topologia surge para garantir estados de energia zero, onde o operador que cria a excitação é exatamente o mesmo que a aniquila, fornecendo, então, a propriedade mais exótica dos férnions de Majorana. Infelizmente os supercondutores topológicos são escassos na natureza (16). Isso decorre do fato de que o emparelhamento dos pares de Cooper na maioria dos supercondutores não fornecer fases topologicamente não triviais. Por esta razão foram propostas realizações experimentais usando supercondutores usuais, acoplamento spin-órbita e campo magnético (10, 17, 18). Iremos explorar em detalhes uma dessas propostas adiante.

Apesar dos estados ligados de Andreev, e mais recentemente, os estados ligados de Majorana serem amplamente estudados, pouca atenção tem se dado para a influência que um possa exercer no outro (19, 20). Esta é uma questão que surge naturalmente uma vez que, ambos estão intimamente relacionados com efeitos de proximidade de sistemas normais e supercondutores.

Para abordar esse problema, propomos um sistema de pontos quânticos acoplados a supercondutores normais e topológicos, cada um suportando um desses tipos de estado ligado. Pontos quânticos são estruturas artificiais que possuem confinamento nas três dimensões espaciais. Por apresentarem um espectro discreto, consequência quântica do confinamento, muitas vezes os pontos quânticos são chamados de átomos artificiais (21–23). A grande facilidade de se controlar o tamanho e consequentemente, o espectro dos pontos quânticos, os fazem plataforma perfeita para diversas realizações

experimentais.

1.1 Objetivos e Metologia

Uma vez que pouca atenção se tem dado para a influência que estados ligados de Andreev e Majorana exercem um ao outro temos como objetivo estudar um sistema que seja capaz de prover alguma informação sobre tal. Para isso, propomos um sistema composto de pontos quânticos devido a facilidade de controle deste tipo de sistema, o que faz com que sejam interessantes para propósitos experimentais futuros.

Utilizaremos o método das funções de Green para calcularmos a densidade de estados local de cada ponto quântico, assim como dos supercondutores acoplados aos pontos. Calculamos também a função espectral de Majorana, uma vez que ela se faz útil por motivos teóricos, os quais serão abordados em detalhes adiante. Resolvendo o sistema de equações de movimento para as funções de Green do sistema encontramos resultados numericamente exatos, nos fornecendo propriedades espectrais que podem ser acessadas experimentalmente via condutância diferencial.

Esta dissertação está organizada da seguinte maneira: No capítulo 2 iremos fazer uma breve revisão dos aspectos básicos da supercondutividade, assim como a origem dos estados ligados de Andreev. Já no capítulo 3 iremos discutir em detalhes o surgimento dos estados ligados de Majorana, no contexto do modelo artificial de Kitaev. E também iremos abordar em detalhes a já proposta realização deste modelo em fios quânticos com forte acoplamento spin-órbita. Por último, no capítulo 4 iremos analisar um sistema por nós proposto, capaz de suportar tanto estados ligados de Andreev, quanto de Majorana e como se correlacionam. Algumas ferramentas matemáticas, assim como alguns cálculos importantes para a compreensão do texto são apresentados em detalhes nos apêndices.

2 *Supercondutividade*

Muitas características fundamentais dos sistemas de estado sólido podem ser estudadas simplesmente desprezando as interações entre os elétrons ou então as expressando em um sistema não interagente com parâmetros renormalizados, por exemplo, renormalização da massa.

Isso é uma das características do chamado líquido de Fermi (veja Apêndice B.3), e explica porque considerações tão drásticas nos fornecem resultados com ótima concordância com o experimento.

Contudo, certos fenômenos não podem ser explicados através dessa aproximação. Um dos fenômenos mais importantes que não podem ser explicado desprezando a interação entre os elétrons é a chamada supercondutividade (2). Um supercondutor apresenta duas características fundamentais: Abaixo de uma temperatura crítica (T_c) supercondutores apresentam condutividade perfeita, e expelem totalmente o campo magnético do seus interiores agindo como diamagnéticos perfeitos (efeito Meissner).

Durante aproximadamente 50 anos a origem microscópica da supercondutividade foi desconhecida, até que Bardeen, Cooper e Schrieffer propuseram que a origem do fenômeno está associada com a interação atrativa entre os elétrons mediada pelas vibrações da rede do sistema (fônons) (4). Tal teoria é conhecida como Teoria BCS, que consiste de uma teoria de campo médio, como abordaremos mais adiante.

Para entendermos como se dá a interação efetiva entre os elétrons mediada por fônons basta lembrarmos que em um sólido os elétrons viajam aproximadamente à velocidade de Fermi (v_F) de tal forma que a escala de tempo associado ao movimento dos elétrons, usando o princípio de incerteza energia tempo, é $O(E_F^{-1})$, onde E_F é a energia de Fermi. Ao passar por determinada região a interação eletrostática do elétron com os íons da rede provoca uma distorção da mesma, gerando vibrações. Por outro lado, as vibrações da rede (fônons) sobrevivem durante tempos $O(\omega_D^{-1})$, onde ω_D é a chamada frequência de Debye. Em sólidos temos que $\hbar\omega_D \ll E_F$, logo as distorções da rede sobrevivem por muito mais tempo do que a permanência do elétron em sua vizinhança. Com isso, um segundo elétron

pode passar na vizinhança distorcida pela passagem do primeiro e então interagir atrativamente com o primeiro elétron através da vibração dos íons da rede. A interação Coulombiana entre os dois elétrons é desprezível em relação a interação com a rede, pelo fato dos dois já estarem consideravelmente afastados. Portanto, existem uma interação efetiva atrativa entre os dois elétrons mediada pelos fônonos da rede.

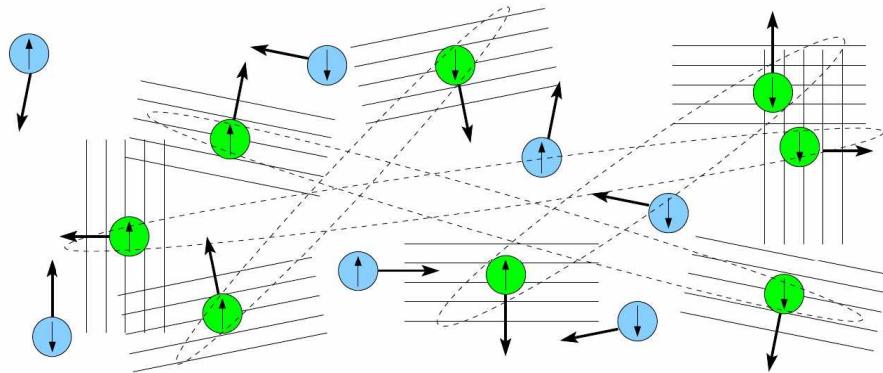


Figura 1: Figura esquemática dos pares de Cooper. A linha tracejada denota o estado ligado dos elétrons que formam os pares de Cooper no estado $|\mathbf{k}, \uparrow, -\mathbf{k}, \downarrow\rangle$, note que o comprimento de correlação dos pares de Cooper é muito maior do que a distância entre os elétrons. Fonte: Henrik Bruus, Karsten Flensberg. Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An introduction. Oxford Graduate Texts, 2003.

O estado ligado descrito acima é chamado par de Cooper (5). Note que como a interação é mediada por fônonos, é de se esperar que seja extremamente sensível a temperatura. Isso explica porque altas temperaturas destroem o estado supercondutor. Existem os chamados supercondutores a altas temperaturas que não podem ser descritos pela teoria BCS. O mecanismo que os governa permanece um mistério até os dias de hoje (6).

O estado em que todos os elétrons formam os pares de Cooper, muitas vezes chamado condensado supercondutor, é protegido contra espalhamentos, uma vez que eles são energeticamente desfavoráveis, pelo fato de entre o condensado supercondutor e os estados normais existir um gap de energia, denominado Δ . Logo, neste estado os pares de Cooper se comportam como um condutor ideal. Essa é uma das mais importantes previsões da teoria BCS.

2.0.1 Teoria de Campo Médio

Em sistemas de muitas partículas, sua interação mútua torna-se fundamental para a descrição da dinâmica de cada uma, tornando a dinâmica de cada uma delas extremamente complexa. Para um sis-

tema com um número de partículas da ordem do número de Avogadro, esse problema é insolúvel tanto analiticamente, quanto computacionalmente. Uma maneira de descrevermos um sistema de muitas partículas, é transformarmos todo o problema em um problema de uma partícula só. Isto pode ser feito se incluirmos todas as correlações de uma partícula com as outras em uma densidade média (ou campo médio), então o problema inicialmente de muitas partículas torna-se em um problema de uma partícula só sobre a influência de um campo médio efetivo, no qual está contido todas as complexas correlações do sistema. Este problema a princípio é completamente solúvel. Este método é conhecido como teoria de campo médio. O campo médio é escolhido de tal forma que minimize a energia livre do sistema, uma vez que estamos mapeando um sistema interagente em um não interagente.

Como exemplo, vamos considerar um sistema com dois tipos de partículas que interagem entre si, cujo hamiltoniano é dado por:

$$H = H_0 + V_{int},$$

onde

$$H_0 = \sum_{\nu} \varepsilon_{\nu}^a a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + \sum_{\mu} \varepsilon_{\mu}^b b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu}$$

e

$$V_{int} = \sum_{\nu\nu',\mu\mu'} V_{\nu\mu,\nu'\mu'} a_{\nu}^{\dagger} b_{\mu}^{\dagger} a_{\nu'} b_{\mu'},$$

onde H_0 descreve a energia cinética das partículas e V_{int} descreve a interação aos pares dos dois tipos de partículas. Vamos supor que os operadores densidade $a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu}$ e $b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu}$ se diferem muito pouco de seus valores médios $\langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} \rangle$ e $\langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu} \rangle$. Definimos então os dois operadores

$$d_{\nu\nu'} = a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} - \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle$$

$$e_{\mu\mu'} = b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} - \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle,$$

de tal forma que

$$d_{\nu\nu'} e_{\mu\mu'} = a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} - a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle - b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle + \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu'} \rangle \langle b_{\mu}^{\dagger} b_{\mu'} \rangle,$$

que ainda podemos escrever como

$$a_\nu^\dagger b_\mu^\dagger a_{\nu'} b_{\mu'} = d_{\nu\nu'} e_{\mu\mu'} + (a_\nu^\dagger a_{\nu'} \langle b_\mu^\dagger b_{\mu'} \rangle + b_\mu^\dagger b_{\mu'} \langle a_\nu^\dagger a_{\nu'} \rangle) - \langle a_\nu^\dagger a_{\nu'} \rangle \langle b_\mu^\dagger b_{\mu'} \rangle.$$

Substituindo no Hamiltoniano do sistema temos

$$H = H_0 + V_{CM} + \sum_{\nu\nu',\mu\mu'} V_{\nu\mu,\nu'\mu'} d_{\nu\nu'} e_{\mu\mu'},$$

com

$$V_{CM} = \sum_{\nu\nu',\mu\mu'} V_{\nu\mu,\nu'\mu'} (a_\nu^\dagger a_{\nu'} \langle b_\mu^\dagger b_{\mu'} \rangle + b_\mu^\dagger b_{\mu'} \langle a_\nu^\dagger a_{\nu'} \rangle) - \sum_{\nu\nu',\mu\mu'} V_{\nu\mu,\nu'\mu'} \langle a_\nu^\dagger a_{\nu'} \rangle \langle b_\mu^\dagger b_{\mu'} \rangle. \quad (2.1)$$

V_{CM} é chamada interação de campo médio. Perceba que o terceiro termo do Hamiltoniano é ínfimo, uma vez que $d_{\nu\nu'}$ e $e_{\mu\mu'}$ são pequenos, então seu produto $d_{\nu\nu'} e_{\mu\mu'}$ é ainda menor e então pode ser desprezado. Isso nos leva ao chamado Hamiltoniano de campo médio

$$H_{CM} = H_0 + V_{CM}. \quad (2.2)$$

Podemos escrever de forma mais compacta o termo de campo médio se considerarmos dois operadores A e B cuja a interação entre os dois é dada simplesmente por seu produto

$$H_{AB} = AB.$$

Fazendo o mesmo procedimento anterior, podemos descrever H_{AB}^{CM} como

$$H_{AB}^{CM} = A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle. \quad (2.3)$$

A pergunta agora é: como podemos calcular a média desses operadores? Existem essencialmente duas maneiras, a primeira é de forma auto-consistente, e a segunda é escolher a média que satisfaz a condição de minimização da energia livre. Apesar de parecer drástica essa aproximação, onde deixamos de lado toda a complexidade da correlação entre as partículas, a teoria de campo médio é extremamente bem sucedida em vários sistemas interagentes, talvez os exemplos mais famosos sejam os sistemas ferromagnéticos e a teoria BCS que também se utiliza da teoria de campo médio como veremos a seguir.

2.0.2 Teoria BCS da supercondutividade

Vamos agora analisar os aspectos fundamentais da supercondutividade. Como já discutimos anteriormente, um supercondutor comporta-se de forma análoga a um condutor ideal. A maioria dos supercondutores possuem pares de Cooper formados por elétrons com momentos e spins opostos: $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$, como dissemos anteriormente a origem da supercondutividade é devido a interação entre elétrons mediada por fônonos. O Hamiltoniano genérico resultante da interação elétron-fônon neste caso é dado por

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (2.4)$$

onde $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (c_{\mathbf{k}\sigma})$ cria (aniquila) um elétron com momento \mathbf{k} e spin σ , $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ é a magnitude da interação elétron-elétron (mediada por fônonos), que por sua vez consideramos independente do spin, essa característica acompanha a maioria dos supercondutores usuais, levando a um emparelhamento supercondutor do tipo *s*-wave. Esse tipo de emparelhamento também é chamado de singuleto devido as projeções opostas dos spins dos elétrons que formam o par de Cooper. Temos também que $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^* - \mu$, onde μ é o potencial químico e m^* a massa efetiva do elétron. Vamos aplicar a aproximação de campo médio, usando a relação da equação (2.3). Fazendo $A = c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ e $B = c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}$, podemos escrever

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle - \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \right).$$

Definimos agora as quantidades

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (2.5)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^* \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (2.6)$$

Com isso podemos escrever

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + constante.$$

O termo constante que vem de $\langle A \rangle \langle B \rangle$ representa um deslocamento energético e pode ser desprezado. Com isso chegamos ao chamado Hamiltoniano da teoria BCS:

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (2.7)$$

Onde $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (c_{\mathbf{k}\sigma})$ cria (aniquila) um elétron com momento \mathbf{k} e spin σ com energia $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$. $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ é a magnitude da interação elétron-elétron e aqui $\Delta_{\mathbf{k}}$ é o chamado parâmetro de ordem supercondutor, com $\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$, $\langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle$ correspondendo a média termodinâmica da aniquilação e criação de um par de Cooper respectivamente.

2.0.3 Formalismo de Nambu

Em supercondutores, devido a estrutura do Hamiltoniano BCS, é interessante representarmos nossos campos (operadores) de forma que elétrons e buracos sejam tratados em pé de igualdade, isso é feito usando o chamado spinor de Nambu.

O formalismo de Nambu foi proposto por Yochiro Nambu no contexto da física de partículas (24). No chamado espaço de Nambu, os operadores são compostos tanto por operadores de partículas quanto de anti-partículas (no presente caso, no contexto da matéria condensada, teremos a elétrons e buracos). O primeiro a notar a familiaridade de tal formalismo com a supercondutividade foi P.W. Anderson (25). Aqui o spinor de nambu será definido como

$$\Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}; \quad \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

onde a primeira componente está relacionada com o elétron e a segunda com o buraco. É interessante argumentar também que os spinors de Nambu obedecem a relação canônica de anti-comutação dos férmons

$$[\Psi_{\mathbf{k}\alpha}, \Psi_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger]_+ = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (2.9)$$

Um Hamiltoniano genético H nessa representação pode ser descrito como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (2.10)$$

com

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} & b_{\mathbf{k}} \\ d_{\mathbf{k}} & e_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

Explicitamente temos então

$$\sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} & b_{\mathbf{k}} \\ d_{\mathbf{k}} & e_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix},$$

nos resultando

$$\sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} + b_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + d_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + e_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}),$$

usando agora que $[c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}'\sigma'}]_+ = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'}$ podemos escrever

$$\sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} [a_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} + b_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + d_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} - e_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}] + \sum_{\mathbf{k}} e_{\mathbf{k}}.$$

Comparando o resultado acima com o Hamiltoniano (2.7), notamos que o Hamiltoniano da teoria BCS pode ser escrito no espaço de Nambu na forma compacta

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}},$$

com

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

O termo $\sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}$ representa uma constante energética, que pode ser negligenciada, uma vez que a energia pode ser medida a menos de uma constante. Com isso podemos escrever

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (2.12)$$

O Hamiltoniano acima é referenciado na literatura como **Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes** (26).

Quase-Partículas de Bogoliubov

Afim de diagonalizar o Hamiltoniano (2.12) precisamos exercer uma rotação na base, em outras palavras, uma transformação unitária da forma

$$H_{BCS}^{dig} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger U_{\mathbf{k}}^\dagger (U_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}^\dagger) U_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}},$$

onde $U_{\mathbf{k}}$ é uma matriz unitária e tem a forma genérica

$$U_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix}, \quad \text{usando} \quad |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (2.13)$$

Definindo agora os spinor na base rotacionada como

$$\chi_{\mathbf{k}} \equiv U_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

e usando o fato que o Hamiltoniano é diagonal na base $\chi_{\mathbf{k}}$ podemos escrever

$$\mathcal{H}_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}. \quad (2.15)$$

O que nos leva a equação secular

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} \end{vmatrix} = 0,$$

então

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}. \quad (2.16)$$

Essa energia corresponde a energia das excitações, ou quase-partículas, do sistema. Temos então a forma diagonal

$$H_{BCS}^{dig} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \chi_{\mathbf{k}}^\dagger \tau_3 \chi_{\mathbf{k}}, \quad (2.17)$$

onde τ_i , com $i = 0, 1, 2, 3$, são as chamadas matrizes de isospin definidas como

$$\tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Ao diagonalizarmos o Hamiltoniano BCS percebemos que existe uma energia mínima $\Delta_{\mathbf{k}}$ entre o estado fundamental, formado por um condensado de pares de Cooper e os estados excitados correspondendo quase-partículas de Bogoliubov. Por causa desse gap de energia, no regime de baixas temperaturas, excitações elementares se tornam inviáveis, fazendo que o estado fundamental (condensado de pares de Cooper) se torne robusto, prevalecendo assim o estado supercondutor. Vamos agora escrever de forma explícita os operadores das quase-partículas $\alpha_{\mathbf{k}i}$ na base de Nambu. Temos que

$$\chi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = U_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix},$$

o que nos leva as importantes relações

$$\alpha_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad (2.19)$$

$$\alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = u_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (2.20)$$

As relações acima são chamadas **transformações de Bogoliubov**, por esta razão as quase-partículas acima são chamadas de quase-partículas de Bogoliubov. É importante notar que as mesmas são compostas por superposições de elétrons e buracos e, sob condições especiais, apresenta uma física interessante relacionada com os chamados fermions de Majorana, o qual abordaremos mais adiante.

A transformação inversa é dada por

$$\Psi = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = U_{\mathbf{k}}^\dagger \chi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix},$$

o que nos leva a

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad (2.21)$$

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = u_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (2.22)$$

Para determinar os coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ e $v_{\mathbf{k}}$ basta resolver para um dos valores de $E_{\mathbf{k}}$ a equação secular correspondente. Após alguns cálculos encontramos

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}} \right], \quad (2.23)$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2}} \right]. \quad (2.24)$$

Funções de Green de Nambu-Gor'kov

A fim de determinarmos a densidade de estados do sistema supercondutor, vamos utilizar o formalismo das funções de Green (para uma breve introdução à funções de Green recomendamos a leitura do Apêndice B). Sabemos que a função de Green retardada no espaço das frequências, usando a notação de Zubarev (27) é dada por

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) \equiv \langle\langle A_{\mathbf{k}}; B_{\mathbf{k}} \rangle\rangle_{\omega}, \quad (2.25)$$

onde $A_{\mathbf{k}}(B_{\mathbf{k}})$ são operadores genéricos escritos na representação de Heisenberg (veja o Apêndice A.2). Como vimos na seção 2.0.3, para sistemas supercondutores faz-se interessante trabalharmos com o spinor de Nambu, vamos então definir uma função de Green que seja o produto direto de ambos spinors como

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) \equiv \langle\langle \Psi_{\mathbf{k}} \otimes \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_{\omega}, \quad (2.26)$$

note que neste caso, a função de Green se torna uma matriz e é dada explicitamente por

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \left\langle \left\langle \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \right\rangle \right\rangle_{\omega},$$

que nos leva então a

$$G_{\mathbf{k}}(\omega) = \begin{pmatrix} \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\omega & \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle_\omega \\ \langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle\rangle_\omega & \langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle_\omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(\omega) & \mathcal{F}_{\mathbf{k}}(\omega) \\ \mathcal{F}_{\bar{\mathbf{k}}}^\dagger(\omega) & \mathcal{G}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

As funções de Green da diagonal de (2.27) são as funções de Green usuais para elétron e buraco. Contudo, as funções de Green fora da diagonal

$$\mathcal{F}_{\mathbf{k}}(\omega) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\uparrow}; c_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle\rangle_\omega, \quad (2.28)$$

e

$$\mathcal{F}_{\bar{\mathbf{k}}}^\dagger(\omega) = \langle\langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle\rangle_\omega \quad (2.29)$$

representam as chamadas funções de Green anômalas ou funções de Green de Gor'kov, e estão associadas com propagadores de pares de Cooper. Para calcularmos essa função de Green, vamos utilizar o método da equação de movimento (veja Apêndice B.1), de sorte que podemos escrever

$$\omega \langle\langle \Psi_{\mathbf{k}} \otimes \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_\omega = \langle[\Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger]_+ \rangle + \langle\langle [\Psi_{\mathbf{k}}, H_{BCS}]_- \otimes \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_\omega. \quad (2.30)$$

Usando que $[a, bc]_- = [a, b]_+ c - b[a, c]_+$, juntamente com $[\Psi_{\mathbf{k}'}, \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger]_+ = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ e a expressão de H_{BCS} de (2.12) temos

$$[\Psi_{\mathbf{k}}, H_{BCS}]_- = \sum_{\mathbf{k}'} \{ \mathcal{H}_{\mathbf{k}'} [\Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger]_- \Psi_{\mathbf{k}'} - \mathcal{H}_{\mathbf{k}'} \Psi_{\mathbf{k}'} [\Psi_{\mathbf{k}'}, \Psi_{\mathbf{k}}]_- \} = \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}.$$

Assim a equação de movimento fica sob a forma

$$\omega \langle\langle \Psi_{\mathbf{k}} \otimes \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_\omega = 1 + \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \langle\langle \Psi_{\mathbf{k}} \otimes \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_\omega$$

que nos conduz então à expressão

$$\langle\langle \Psi_{\mathbf{k}} \otimes \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle\rangle_\omega = [\omega - \mathcal{H}_{\mathbf{k}}]^{-1}.$$

De forma explícita, temos que calcular a matriz inversa

$$[\omega - \mathcal{H}_{\mathbf{k}}]^{-1} = \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & \omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}^{-1}.$$

Neste caso, por se tratar de uma matriz de baixa ordem, a inversa pode ser calculada facilmente usando

o método dos cofatores, que nos diz que a matriz inversa de uma matriz genérica A é dada por

$$A^{-1} = \frac{1}{|det(A)|} adj(A), \quad C_{ij} = (-1)^{i+j} det(A_{-i,-j}), \quad (2.31)$$

onde $adj(A) = (cof(A))^T$. Com isso obtemos

$$[\omega - \mathcal{H}_k]^{-1} = \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon_k^2 - |\Delta_k|^2} \begin{pmatrix} \omega + \varepsilon_k & -\Delta_k \\ -\Delta_k^* & \omega - \varepsilon_k \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

resultando finalmente na função de Green

$$G_k(\omega) \equiv \langle \langle \Psi_k \otimes \Psi_k^\dagger \rangle \rangle_\omega = \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon_k^2 - |\Delta_k|^2} \begin{pmatrix} \omega + \varepsilon_k & -\Delta_k \\ -\Delta_k^* & \omega - \varepsilon_k \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Comparando com (2.27) temos, as funções de Green do elétron, buraco e anômalas dadas respectivamente por

$$\mathcal{G}_{k\uparrow}(\omega) = \frac{\omega + \varepsilon_k}{\omega^2 - \varepsilon_k^2 - |\Delta_k|^2}, \quad (2.34)$$

$$\mathcal{G}_{-k\downarrow}(\omega) = \frac{\omega - \varepsilon_k}{\omega^2 - \varepsilon_k^2 - |\Delta_k|^2}, \quad (2.35)$$

$$\mathcal{F}_k(\omega) = \frac{-\Delta_k}{\omega^2 - \varepsilon_k^2 - |\Delta_k|^2} \quad (2.36)$$

e

$$\mathcal{F}_k^\dagger(\omega) = \frac{-\Delta_k^*}{\omega^2 - \varepsilon_k^2 - |\Delta_k|^2}. \quad (2.37)$$

Perceba que para $\Delta_k = 0$, temos $\mathcal{F}_k(\omega) = \mathcal{F}_k^\dagger(\omega) = 0$ como esperado. Note que os polos das funções de Green são $\omega = \pm \sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta_k|^2} = \pm E_k$, que correspondem exatamente à energia das quase-partículas de Bogoliubov que encontramos via diagonalização do Hamiltoniano BCS. Podemos escrever ainda de uma forma mais interessante a função de Green (2.34) usando os coeficientes (2.23) e (2.24), de sorte que

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{k\uparrow}(\omega) &= \frac{\omega + \varepsilon_k}{\omega^2 - \varepsilon_k^2 - |\Delta_k|^2} = \frac{\omega + \varepsilon_k}{\omega^2 - E_k^2} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{E_k} \right) \frac{1}{\omega - E_k} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k}{E_k} \right) \frac{1}{\omega + E_k}. \end{aligned}$$

Ou simplesmente,

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(\omega) = \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{\omega - E_{\mathbf{k}}} + \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{\omega + E_{\mathbf{k}}}. \quad (2.38)$$

Para fins de continuação analítica temos que tomar $\omega \rightarrow \omega + i\eta$, com η sendo um número real infinitesimal. Usando agora a relação

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\omega + i\eta - \epsilon} = \frac{P}{\omega - \epsilon} - i\pi\delta(\omega - \epsilon)$$

e que a densidade de estados é dada por

$$\rho_{\mathbf{k}}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{\mathbf{k}}(\omega)] \quad (2.39)$$

temos

$$\rho_{\mathbf{k}\uparrow}(\omega) = u_{\mathbf{k}}^2\delta(\omega - E_{\mathbf{k}}) + v_{\mathbf{k}}^2\delta(\omega + E_{\mathbf{k}}). \quad (2.40)$$

O primeiro termo corresponde à criação de uma quase-partícula adicionando um elétron e o segundo a criação de uma quase-partícula adicionando um buraco ao sistema. Como o operador que forma a quase-partículas tem a forma $\alpha_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}$ podemos ver que a quase-partícula pode ser formada removendo ou adicionando elétrons, ficando claro que $u_{\mathbf{k}}^2$ é a amplitude de probabilidade de se criar uma quase-partícula adicionando um elétron e $v_{\mathbf{k}}^2$ a amplitude de o fazer adicionando um buraco.

Descrevemos acima a densidade de estados para uma única quase-partícula. Agora, se queremos calcular a densidade de estados para todo sistema precisamos somar sobre todos os momentos, da forma

$$\rho_{\uparrow}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im}[\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(\omega)]. \quad (2.41)$$

Transformando a somatória acima em uma integral na energia, usando uma densidade de estados $\rho = \rho_0\theta(\omega - D)\theta(\omega + D)$, onde $2D$ é a largura da banda e por questões de normalização $\rho_0 = 1/2D$, obtemos

$$\rho_{\uparrow}(\omega) = -\frac{\rho_0}{\pi} \text{Im} \left[\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\omega + \varepsilon}{\omega^2 - \varepsilon^2 - |\Delta|^2} \right],$$

onde por simplicidade consideramos ε e Δ independentes de \mathbf{k} . Usando que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\omega + \varepsilon}{\omega^2 - \varepsilon^2 - |\Delta|^2} = -\frac{\pi\omega}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}},$$

temos

$$\rho_{\uparrow}(\omega) = \text{Im} \left[\frac{\rho_0 \pi \omega}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \right],$$

nos levando então ao resultado

$$\rho_{\uparrow}(\omega) = \frac{\rho_0 \pi |\omega|}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \theta(|\omega| - \Delta). \quad (2.42)$$

A mesma expressão vale para elétrons com spin down. A densidade de estados acima é apresentada na figura (2). Sabemos que em resposta linear a condutância é diretamente proporcional a densidade de estados¹, logo experimentos de STM foram usados para comprovar a teoria BCS nos anos 60 (28, 29).

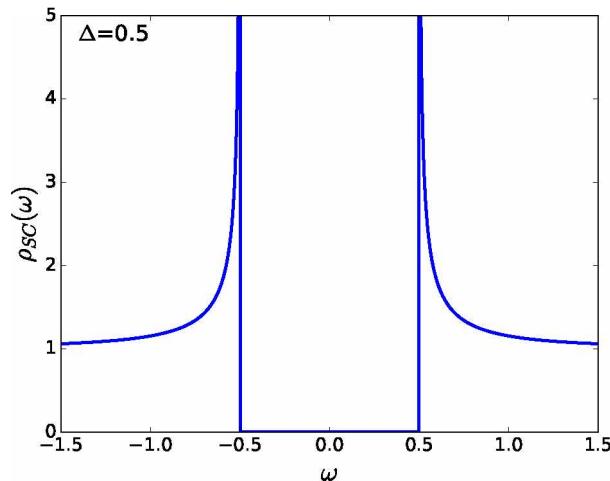


Figura 2: Densidade de Estados de um supercondutor usual extraída da teoria BCS. No interior do gap supercondutor apenas pares de Cooper são permitidos.

2.1 Supercondutividade induzida e estados ligados de Andreev

A junção entre sistemas normais (metálicos ou semicondutores) e sistemas supercondutores apresenta uma série de fenômenos fascinantes, um deles é a chamada reflexão de Andreev (7, 30). Se o potencial químico do sistema normal se encontra em uma região situada energeticamente no gap supercondutor, um elétron de condução do sistema normal só pode se transferir para o supercondutor se consequentemente juntar-se com um outro elétron de momento e spin oposto, formando então um par de Cooper no supercondutor.

¹Veja o Apêndice C.2

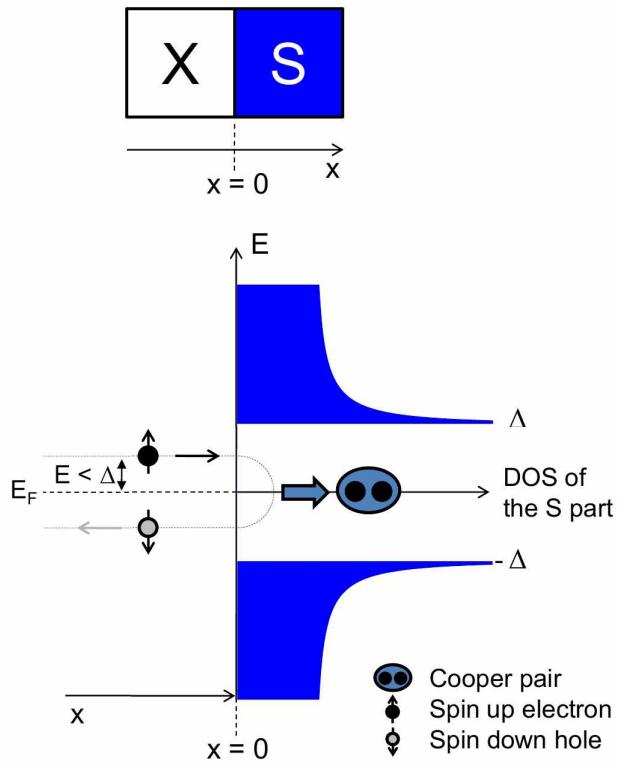


Figura 3: Reflexão de Andreev na junção X/supercondutor, onde X representa um material usual, seja metálico ou semicondutor. Vemos que um elétron incidente na interface com um supercondutor produz a reflexão de um buraco, perceba que com momento e spin invertidos. Fonte: Jean-Damien Pillet, Tunneling spectroscopy of the Andreev Bound States in a Carbon Nanotube, PhD thesis, 2011.

Note que no processo acima, a formação do par Cooper no supercondutor resultou na reflexão de um buraco no sistema normal, essa reflexão é chamada reflexão de Andreev (RA). Sucessivas RA coerentes resultam em estados ligados conhecidos como estados ligados de Andreev (Andreev Bound States-ABS) que, como podemos ver, energeticamente residem no interior do gap supercondutor (veja Fig. 3).

A junção de sistemas normais e supercondutores também apresenta o que chamamos de supercondutividade induzida. Correlações supercondutoras podem ser induzidas no sistema normal (renormalizadas pelo acoplamento entre o supercondutor e o sistema normal), fazendo com que as propriedades espectrais do sistema normal apresentem também um caráter supercondutor.

O processo fundamental na reflexão de Andreev já aparece no Hamiltoniano BCS. Para vermos isso vamos nos concentrar no termo responsável pela dinâmica dos pares de Cooper

$$H_{pair} = - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right). \quad (2.43)$$

O termo $\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ está associado com aniquilação de um par de Cooper e a criação de uma quase-partícula no sistema supercondutor, voltaremos a ele mais adiante. Vamos analisar o segundo termo de (2.43) $\Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}$. Para isso, perceba que o operador que aniquila um elétron $c_{\mathbf{k}\sigma}$ corresponde a criação de um buraco com momento oposto com o operador $h_{-\mathbf{k}\sigma}^\dagger$, escrevendo matematicamente esta relação temos $c_{\mathbf{k}\sigma} = h_{-\mathbf{k}\sigma}^\dagger$.

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} = h_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow},$$

este termo representa a aniquilação de um elétron e a criação de um par de Cooper (descrito por $\Delta_{\mathbf{k}}^*$) e um buraco de momento e spin oposto ao elétron aniquilado. Este fenômeno representa exatamente a reflexão de Andreev. De forma resumida podemos descrever o processo acima como

$$e^- \rightleftharpoons \text{Par}^{2-} + h^+. \quad (2.44)$$

Note na equação acima que o processo de reflexão de Andreev mistura de forma coerente elétrons e buracos. Além disso, podemos ver que o processo conserva carga, $e^- \rightleftharpoons 2e^- - e^-$, energia, uma vez que $E^- \rightleftharpoons 2E^- - E^-$, e como já dissemos, corresponde a reflexão de um elétron em um buraco, $\mathbf{k}^- \rightleftharpoons (\mathbf{k}^- - \mathbf{k}^-) - \mathbf{k}^-$, levando $\mathbf{k}^- \rightleftharpoons -\mathbf{k}^-$. Onde usamos que o buraco possui a carga, momento e energias iguais em modulo as do elétron, porém com o sinal negativo.

A fim de ilustrar os dois fenômenos citados acima, vamos considerar um sistema simples formado por um ponto quântico (PQ) de um único nível ligado a um supercondutor (Fig.4). O Hamiltoniano desse sistema é dado por

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_{d\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} [V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\sigma} + V_{\mathbf{k}}^* d_{\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}] + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} [\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}], \quad (2.45)$$

o primeiro termo representa a energia cinética do PQ, onde $d_{\sigma}^\dagger (d_{\sigma})$ cria (aniquila) um elétron do PQ com energia $\varepsilon_{d\sigma}$ e spin σ , o segundo termo representa o acoplamento entre o PQ e o reservatório supercondutor com $V_{\mathbf{k}}$ ($V_{\mathbf{k}}^*$) descrevendo o tunelamento de elétrons entre o PQ e o supercondutor e os dois últimos termos representam o Hamiltoniano BCS já discutido anteriormente.

Podemos escrever o Hamiltoniano (2.45) no formalismo de Nambu definindo o spinor para PQ na forma

$$\Psi_d = \begin{pmatrix} d_{\uparrow} \\ d_{\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \Psi^\dagger = \begin{pmatrix} d_{\uparrow}^\dagger & d_{\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

resultando no Hamiltoniano da forma

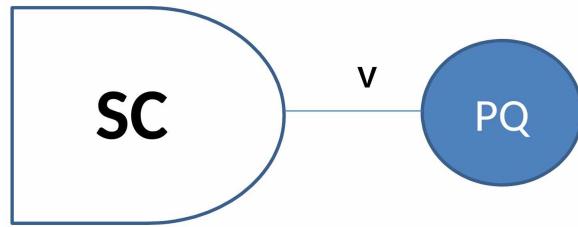


Figura 4: Ponto Quântico acoplado a um reservatório supercondutor. Fonte: Elaborada pelo autor.

$$H = \Psi_d^\dagger \mathcal{H}_d \Psi_d + \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} [\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}_{d\mathbf{k}} \Psi_d + \Psi_d^\dagger \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}}], \quad (2.47)$$

com

$$\mathcal{H}_d = \begin{pmatrix} \varepsilon_{d\uparrow} & 0 \\ 0 & -\varepsilon_{d\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H}_{d\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} V_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & V_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix}. \quad (2.48)$$

Para calcularmos as propriedades espectrais do PQ precisamos calcular a função de Green retardada do mesmo, que definiremos da forma

$$G_d(\omega) \equiv \langle\langle \Psi_d \otimes \Psi_d^\dagger \rangle\rangle_\omega, \quad (2.49)$$

ou de forma explícita

$$G_d(\omega) = \begin{pmatrix} \langle\langle d_\uparrow; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle_\omega & \langle\langle d_\uparrow; d_\downarrow \rangle\rangle_\omega \\ \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\uparrow^\dagger \rangle\rangle_\omega & \langle\langle d_\downarrow^\dagger; d_\downarrow \rangle\rangle_\omega \end{pmatrix}, \quad (2.50)$$

usando novamente a equação de movimento temos

$$\omega \langle\langle \Psi_d \otimes \Psi_d^\dagger \rangle\rangle_\omega = \langle [\Psi_d, \Psi_d^\dagger]_+ \rangle + \langle\langle [\Psi_d, H]_- \otimes \Psi_d^\dagger \rangle\rangle_\omega,$$

usando (2.47) na equação de movimento acima obtemos o sistema de equações

$$\begin{aligned}\omega\langle\langle\Psi_d\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega &= 1 + \mathcal{H}_d\langle\langle\Psi_d\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega + \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}^\dagger\langle\langle\Psi_{\mathbf{k}}\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega \\ \omega\langle\langle\Psi_{\mathbf{k}}\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega &= \mathcal{H}_{\mathbf{k}}\langle\langle\Psi_{\mathbf{k}}\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega + \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}\langle\langle\Psi_d\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega.\end{aligned}$$

Combinando as duas equações, ficamos com

$$\omega\langle\langle\Psi_d\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega = 1 + \mathcal{H}_d\langle\langle\Psi_d\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega + \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}^\dagger[\omega - \mathcal{H}_{\mathbf{k}}]^{-1}\mathcal{H}_{\mathbf{k}}\langle\langle\Psi_d\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega.$$

Portanto,

$$\langle\langle\Psi_d\otimes\Psi_d^\dagger\rangle\rangle_\omega = [\omega - \mathcal{H}_s]^{-1}, \quad (2.51)$$

onde definimos

$$\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_d + \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}^\dagger[\omega - \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}]^{-1}\mathcal{H}_{d\mathbf{k}}, \quad (2.52)$$

note que o termo da somatória nada mais é do que a auto-energia $\Sigma(\omega)$. Usando (2.32) temos que

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}^\dagger[\omega - \mathcal{H}_{\mathbf{k}}]^{-1}\mathcal{H}_{d\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{\omega^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} \begin{pmatrix} \omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

Vamos considerar por simplicidade que V , ε e Δ são independentes de \mathbf{k} . Transformando a somatória nos momentos em uma integral usando uma densidade de estados constante ρ_0 e considerando o limite em que a banda de condução (D) muito larga (Wide Band Limit) (veja o Apêndice B.2), obtemos

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}^\dagger[\omega - \mathcal{H}_{\mathbf{k}}]^{-1}\mathcal{H}_{d\mathbf{k}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_0|V|^2}{\omega^2 - \varepsilon^2 - |\Delta|^2} \begin{pmatrix} \omega + \varepsilon & -\Delta \\ -\Delta^* & \omega - \varepsilon \end{pmatrix} d\varepsilon,$$

usando que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega \pm \varepsilon}{\omega^2 - \varepsilon^2 - |\Delta|^2} d\varepsilon = -\frac{\omega\pi}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta}{\omega^2 - \varepsilon^2 - |\Delta|^2} d\varepsilon = -\frac{\Delta\pi}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}},$$

obtemos

$$\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{d\mathbf{k}}^\dagger [\omega - \mathcal{H}_{\mathbf{k}}]^{-1} \mathcal{H}_{d\mathbf{k}} = -\frac{\rho_0|V|^2\pi}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \begin{pmatrix} \omega & -\Delta \\ -\Delta^* & \omega \end{pmatrix},$$

com isso temos que

$$\omega - \mathcal{H}_s = \begin{pmatrix} \omega - \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} & -\frac{\Delta\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \\ -\frac{\Delta^*\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} & \omega + \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \end{pmatrix},$$

com $\Gamma = \pi\rho_0|V|^2$. Muitas vezes o resultado acima é escrito de forma compacta usando as matrizes de isospin (2.18). Note dos resultados acima que podemos escrever a auto-energia em WBL como

$$\Sigma(\omega) = \frac{\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} (\tilde{\Delta}\tau_2 - \omega\tau_0), \quad (2.53)$$

onde definimos $\tilde{\Delta} = -i\Delta$. Com os resultados acima podemos escrever

$$G_d(\omega) = \left[\omega\tau_0 - \varepsilon_d\tau_3 - \frac{\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} (\tilde{\Delta}\tau_2 - \omega\tau_0) \right]^{-1}. \quad (2.54)$$

Usando o método dos cofatores(2.31) para calcular a inversa obtemos

$$G_d(\omega) = \frac{1}{\left[\omega - \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \right] \left[\omega + \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \right] - \left[\frac{\Delta\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \right]^2} \times \\ \begin{pmatrix} \omega + \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} & -\frac{\Delta\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \\ -\frac{\Delta^*\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} & \omega - \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \end{pmatrix},$$

Com esse resultado podemos identificar a função de Green do elétron

$$\langle\langle d_{\uparrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\omega + \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}}{\left[\omega - \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right]\left[\omega + \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right] - \left[\frac{\Delta\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right]^2}, \quad (2.55)$$

do buraco

$$\langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\omega - \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}}{\left[\omega - \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right]\left[\omega + \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right] - \left[\frac{\Delta\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right]^2}, \quad (2.56)$$

e as funções de Green de Gor'kov

$$\langle\langle d_{\uparrow}; d_{\downarrow} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\frac{\Delta\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}}{\left[\omega - \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right]\left[\omega + \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right] - \left[\frac{\Delta\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right]^2}, \quad (2.57)$$

$$\langle\langle d_{\downarrow}^{\dagger}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\frac{\Delta^*\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}}{\left[\omega - \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right]\left[\omega + \varepsilon_d + \frac{\omega\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right] - \left[\frac{\Delta\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}}\right]^2}. \quad (2.58)$$

Note que para $\Delta = 0$ os resultados acima são exatamente iguais as funções de Green de um PQ acoplado a um reservatório normal na aproximação de WBL como o esperado.

Uma vez que conhecemos as funções de Green do PQ podemos calcular sua densidade de estados

$$\rho_d(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\langle\langle d_{\uparrow}; d_{\uparrow}^{\dagger} \rangle\rangle_{\omega}]. \quad (2.59)$$

Os resultados para o caso normal e supercondutor são mostrados nas figuras 5 e 6. Perceba que o espectro do PQ apresenta agora características supercondutoras, mostrando a supercondutividade induzida por efeitos de proximidade à um supercondutor. Contudo, note que no interior do gap supercondutor temos a presença de dois estados ligados, que representam Andreev-Bound-States, devido a sucessivas reflexões de Andreev como esquematizado na figura 3. Perceba que quando o PQ é conectado a um reservatório normal ($\Delta = 0$) sua densidade de estados apresenta um alargamento provocado pelo acoplamento com os elétrons do reservatório metálico, figura 5. Contudo, quando o mesmo é acoplado a um supercondutor, o PQ apresenta uma densidade de estados característica dos supercondutores, além da presença de estados ligados de Andreev que residem no interior do gap supercondutor, mostrados na figura 6.

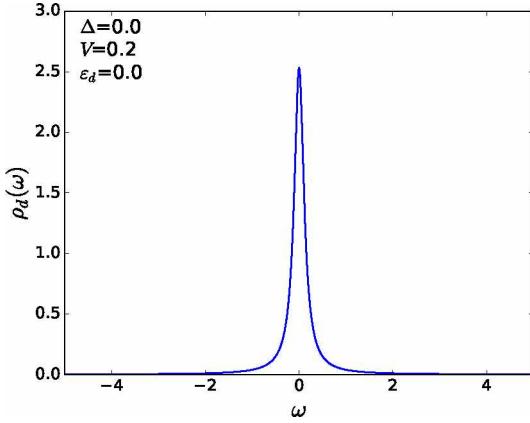


Figura 5: Densidade de Estados do PQ acoplado a um reservatório normal ($\Delta = 0$), como a presença do reservatório apenas alarga o nível, como esperado da aproximação de banda larga.

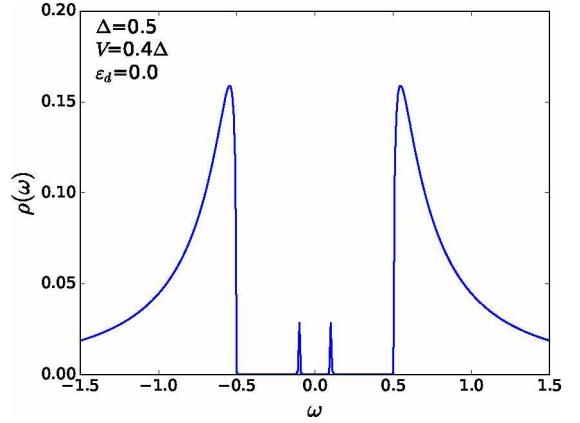


Figura 6: Densidade de Estados do PQ acoplado a um reservatório supercondutor ($\Delta \neq 0$), note que agora o espectro apresenta características supercondutoras, além de ABS no interior do gap.

É interessante notar também que podemos descrever um Hamiltoniano efetivo para o PQ na presença do reservatório supercondutor. Para isso basta notarmos que conseguimos descrever a função de Green do PQ na forma

$$G_d(\omega) = [\omega - \mathcal{H}_s]^{-1}, \quad (2.60)$$

com \mathcal{H}_s dado por

$$\mathcal{H}_s = \begin{pmatrix} \varepsilon_{d\uparrow} & 0 \\ 0 & -\varepsilon_{d\downarrow} \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}}|^2}{\omega^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} \begin{pmatrix} \omega + \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & \omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

Se considerarmos WBL como nos cálculos anteriores, temos que

$$\mathcal{H}_s = \begin{pmatrix} \varepsilon_{d\uparrow} & 0 \\ 0 & -\varepsilon_{d\downarrow} \end{pmatrix} - \frac{\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \begin{pmatrix} \omega & -\Delta \\ -\Delta^* & \omega \end{pmatrix},$$

e considerarmos agora $\Delta \gg \omega$ ficamos com

$$\mathcal{H}_s = \begin{pmatrix} \varepsilon_{d\uparrow} & \Gamma \\ \Gamma & -\varepsilon_{d\downarrow} \end{pmatrix}.$$

Assim, escrevendo em termos de d_{σ} e d_{σ}^{\dagger} o hamiltoniano efetivo para PQ, agora supercondutor é

$$H_{ds} = \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \Gamma (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow}^{\dagger} + d_{\downarrow} d_{\uparrow}). \quad (2.62)$$

Esse é do que o Hamiltoniano efetivo para um PQ na presença de um supercondutor no limite $(D, \Delta) \gg \omega$. Perceba que, como esperávamos, a supercondutividade induzida no PQ é mediada pelo acoplamento com o supercondutor. Perceba que a equação (2.62) possui todos os ingredientes mínimos necessários para a existência de estados ligados de Andreev no PQ.

3 *Supercondutividade tipo p em fios quânticos com forte acoplamento spin-órbita*

No capítulo anterior discutimos os aspectos fundamentais do fenômeno da supercondutividade. Nesse momento é importante relembrar que os elétrons nos pares de Cooper possuem spin com projeções opostas. Dizemos que este estado corresponde ao estado de singuleto. Supercondutores desse tipo são geralmente chamados de supercondutores s -wave, em analogia à simetria do orbital atômico s . Os supercondutores do tipo s -wave são os mais abundantes da natureza. Chamamos a atenção do leitor para o fato de que quando falamos da simetria do supercondutor estamos nos referindo a simetria de spin dos elétrons que formam o par de Cooper, por isso certas vezes tal simetria é referida como simetria de emparelhamento.

Embora bastante raros e instáveis, existem também supercondutores cujos spins dos elétrons nos pares de Cooper são paralelos, caracterizando um estado conhecido como triploto (31–33). Uma vez que o spinor neste caso é uma função simétrica, necessariamente a função de onda espacial deve ser anti-simétrica, para manter a anti-simetria da função de onda total dos pares de Cooper, uma vez que são compostos por férmiões. Por essa razão, em analogia com as funções de onda espaciais de orbitais do tipo p , que são assimétricas. Supercondutores que possuem esse tipo de emparelhamento são chamados de supercondutores do tipo p .

Os chamados férmiões de Majorana ou modos de Majorana aparecem apenas em supercondutores do tipo p . Como tais supercondutores são bastante raros e instáveis, precisamos contornar este problema de alguma forma. A maneira de fazermos isso é usarmos um supercondutor usual do tipo s -wave e então induzir um estado onde ele seja efetivamente do tipo p , como proposto em (9, 17).

No presente capítulo iremos abordar como a simetria da supercondutividade corrobora para o aparecimento dos modos de Majorana. Feito isso, vamos construir um sistema com supercondutivi-

dade do tipo p induzida em um fio quântico por um supercondutor usual do tipo s .

3.1 Formalismo de Nambu: Simetria partícula-buraco no Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes

Como dissemos acima, estamos interessados em supercondutores cuja projeção de spin dos elétrons que formam o par de Cooper seja a mesma, logo o índice de spin se faz dispensável e temos neste caso que $\Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}} & c_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}^T$ e temos que o Hamiltoniano será novamente dado por

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}, \quad \mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & -\Delta_{\mathbf{k}} \\ -\Delta_{\mathbf{k}}^* & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Com o intuito de abordar a simetria partícula-buraco, precisamos saber qual é o operador que transforma $\Psi_{\mathbf{k}}$ em $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger$. Para isso, note que

$$\tau_1 \Psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}} \\ c_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ c_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = (\Psi_{-\mathbf{k}}^\dagger)^T.$$

Note que a operação acima levou \mathbf{k} para $-\mathbf{k}$. Correspondendo a transformação de operadores que criam uma quase-partícula de Bogoliubov em um buraco. Portanto, essa transformação nos sugere uma simetria partícula-buraco. O operador responsável por essa simetria é dado por

$$P = \tau_1 K, \quad (3.2)$$

onde K é o operador de conjugação. Note que esse operador possui importantes propriedades:

$$P^2 = \begin{pmatrix} 0 & K \\ K & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & K \\ K & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

onde usamos que $K^2 = 1$, isso então nos dá

$$P^2 = \mathbf{1}. \quad (3.3)$$

Vejamos quais são as consequências da aplicação do mesmo no Hamiltoniano. Para analisarmos isso,

primeiramente vamos considerar o caso sem supercondutividade $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$. Neste caso temos

$$P\mathcal{H}_{\mathbf{k}}P^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & K \\ K & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & -\varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & K \\ K & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\varepsilon_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

Vemos, portanto, que

$$P\mathcal{H}_{\mathbf{k}}P^{\dagger} = -\mathcal{H}_{\mathbf{k}}. \quad (3.4)$$

Perceba que $\varepsilon_{-\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}$, uma vez que $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^* - \mu$. Com isso podemos escrever

$$\begin{aligned} P\mathcal{H}_{\mathbf{k}}P^{\dagger} &= -\mathcal{H}_{-\mathbf{k}}, \\ P\mathcal{H}_{\mathbf{k}}P^{\dagger}P &= -\mathcal{H}_{-\mathbf{k}}P, \\ P\mathcal{H}_{\mathbf{k}} &= -\mathcal{H}_{-\mathbf{k}}P. \end{aligned}$$

Isso nos mostra que na ausência de supercondutividade existe uma simetria partícula-buraco intrínseca do sistema no formalismo de Nambu. Podemos perceber isso quando escrevemos o Hamiltoniano para um ponto quântico de um nível acoplado a um supercondutor. Como dobramos a dimensão do Hamiltoniano do PQ artificialmente, era de se esperar que as soluções em dimensão maior estivessem associadas de alguma forma, e essa relação é dada exatamente pela simetria partícula-buraco descrita acima.

Se considerarmos agora o caso supercondutor $\Delta_{\mathbf{k}} \neq 0$ e impusermos a simetria partícula-buraco

$$P\mathcal{H}_{\mathbf{k}}P^{\dagger} = -\mathcal{H}_{-\mathbf{k}},$$

temos como consequência que

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{-\mathbf{k}}, \quad (3.5)$$

ou seja, que o parâmetro de ordem supercondutor seja uma função ímpar do momento \mathbf{k} , essa é a propriedade fundamental dos supercondutores *p*-wave. Outra consequência interessante é que para cada estado com energia $E_{\mathbf{k}}$ teremos um estado parceiro com energia $-E_{\mathbf{k}}$. Para vermos isso basta

voltarmos a equação de auto valores

$$\mathcal{H}_k \chi_k = E_k \chi_k,$$

que podemos também escrever

$$\begin{aligned} P\mathcal{H}_k P^\dagger (P\chi_k) &= PE_k P^\dagger (P\chi_k), \\ \mathcal{H}_{-k} (P\chi_k) &= -E_{-k} (P\chi_k), \\ \mathcal{H}_k (P\chi_k) &= -E_k (P\chi_k). \end{aligned}$$

Onde usamos que $H_{-k} = H_k$ e $E_{-k} = E_k$. Com isso temos que

$$\mathcal{H}_k \chi_k = E_k \chi_k, \quad (3.6)$$

$$\mathcal{H}_k (P\chi_k) = -E_k (P\chi_k). \quad (3.7)$$

Podemos compactar as duas expressões acima em uma só definindo $\tilde{\chi}_k = P\chi_k$, onde das equações acima podemos ver que $\tilde{E}_k = -E_k$. Para analisarmos melhor os conceitos acima vamos lembrar que $\chi_k = \begin{pmatrix} \alpha_k & \alpha_{-k}^\dagger \end{pmatrix}^T$, com isso temos

$$P\chi_k = \begin{pmatrix} 0 & K \\ K & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_k \\ \alpha_{-k}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_k^\dagger \\ \alpha_{-k} \end{pmatrix},$$

como $\tilde{\chi}_k = P\chi_k$

$$\begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_k \\ \tilde{\alpha}_{-k}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_k^\dagger \\ \alpha_{-k} \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

concluímos então que $\tilde{\alpha}_k = \alpha_k^\dagger$, ou seja, criar uma quase-partícula de Bogoliobov com energia E_k é equivalente a aniquilar (criar um buraco) com energia $-E_k$, onde usamos que $\tilde{E}_k = -E_k$. Mas algo curioso acontece caso tenhamos exatamente $\tilde{E}_k = E_k$, neste caso temos $E_k = -E_k$ implicando $E_k = 0$.

Consequentemente,

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (E_{\mathbf{k}} = 0). \quad (3.9)$$

Isto corresponde à propriedade fundamental dos férmiões de Majorana, que é uma partícula igual a sua anti-partícula. Aqui isto se traduz no fato de que o operador que cria uma quase-partícula de Bogoliobov é igual a seu operador de aniquilação. Como nosso operador é composto por operadores de criação de aniquilação de elétrons, nesse contexto de matéria condensada não estamos diante de uma partícula elementar que corresponde a um férnion de Majorana, mas sim excitações que se comportam desta maneira, por isso muitas vezes é usada a expressão modos de Majorana.

Perceba que para que o sistema suporte férniões de Majorana precisamos que exista um estado de energia zero. A existência desse estado em supercondutores do tipo p pode ser garantida em uma das fases topológicas que o mesmo apresenta, como abordaremos mais adiante.

3.2 Modelo de Kitaev

Os primeiros estudos relacionando férniões de Majorana no âmbito da matéria condensada foram propostos por Kitaev através de um modelo artificial, que descreve um sistema com emparelhamento dos pares de Cooper do tipo p , ou seja, um sistema efetivamente sem spin (8). Discutiremos em detalhes como isso pode ser feito de forma prática na seção seguinte.

O Hamiltoniano de Kitaev é dado por

$$H = -\mu \sum_j c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \sum_j (t c_j^\dagger c_{j+1} + \Delta e^{i\phi} c_j c_{j+1} + H.c.) \quad (3.10)$$

onde μ é o potencial químico, t é o elemento de matriz que acopla um sítio ao outro adjacente, $c_j^\dagger (c_j)$ cria(aniquila) um elétron no sítio j , Δ e ϕ estão relacionados ao emparelhamento do par de Cooper. Muitas vezes ϕ é igualado a zero por questões de simplicidade, como fizemos no capítulo de supercondutividade. Perceba que o grau de liberdade do spin foi omitido, pois assume-se que todos os elétrons possuem mesma projeção de spin.

A fim de estudar os aspectos topológicos do sistema vamos passar para o espaço reciproco. Para isso definimos as seguintes transformadas de Fourier

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikx_j} c_k, \quad c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikx_j} c_k^\dagger.$$

Aplicando agora a transformada de Fourier na Eq. (3.10) obtemos

$$\begin{aligned} H = & -\frac{\mu}{N} \sum_j \sum_{kk'} e^{-ix_j(k-k')} c_k^\dagger c_{k'} - \frac{t}{2N} \sum_j \sum_{kk'} e^{-ix_j(k-k')} e^{ik'a} c_k^\dagger c_{k'} \\ & - \frac{t}{2N} \sum_j \sum_{kk'} e^{-ix_j(k'-k)} e^{-ik'a} c_{k'}^\dagger c_k - \frac{\Delta e^{i\phi}}{2N} \sum_j \sum_{kk'} e^{ix_j(k+k')} e^{ik'a} c_k c_{k'} \\ & - \frac{\Delta e^{-i\phi}}{2N} \sum_j \sum_{kk'} e^{-ix_j(k'+k)} e^{-ik'a} c_{k'}^\dagger c_k^\dagger. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Usando novamente a Eq. (3.57) podemos ainda escrever

$$\begin{aligned} H = & -\mu \sum_{kk'} c_k^\dagger c_{k'} \delta_{k,k'} - \frac{t}{2} \sum_{kk'} e^{ik'a} c_k^\dagger c_{k'} \delta_{k,k'} - \frac{t}{2} \sum_{kk'} e^{-ik'a} c_{k'}^\dagger c_k \delta_{k,k'} \\ & - \frac{\Delta e^{i\phi}}{2} \sum_{kk'} e^{ik'a} c_k c_{k'} \Delta_{k',-k} - \frac{\Delta e^{-i\phi}}{2} \sum_{kk'} e^{ik'a} c_{k'}^\dagger c_k^\dagger \delta_{k,-k'} \\ = & \sum_k \left[-\mu - t \left(\frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2} \right) \right] c_k^\dagger c_k - \frac{\Delta e^{i\phi}}{2} \sum_k e^{ika} c_k c_{-k} - \frac{\Delta e^{-i\phi}}{2} \sum_k e^{-ika} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger, \end{aligned}$$

que nos resulta em

$$H = - \sum_k [\mu + t \cos(ka)] c_k^\dagger c_k - \frac{\Delta e^{i\phi}}{2} \sum_k e^{ika} c_k c_{-k} - \frac{\Delta e^{-i\phi}}{2} \sum_k e^{-ika} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger. \quad (3.12)$$

Agora note que

$$\begin{aligned} \sum_k e^{ika} c_k c_{-k} &= \sum_{k<0} e^{ika} c_k c_{-k} + \sum_{k>0} e^{ika} c_k c_{-k} = \sum_{k<0} e^{ika} c_k c_{-k} + \sum_{k<0} e^{-ika} c_{-k} c_k \\ &= \sum_{k<0} (e^{ika} - e^{-ika}) c_k c_{-k} = \sum_{k<0} 2i \sin(ka) c_k c_{-k} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\sum_k e^{ika} c_k c_{-k} &= \sum_{k<0} e^{ika} c_k c_{-k} + \sum_{k>0} e^{ika} c_k c_{-k} = \sum_{k>0} e^{ika} c_{-k} c_k + \sum_{k>0} e^{-ika} c_k c_{-k} \\
&= \sum_{k>0} (e^{ika} - e^{-ika}) c_k c_{-k} = \sum_{k>0} 2i \operatorname{sen}(ka) c_k c_{-k}.
\end{aligned}$$

Somando as duas expressões acima temos

$$2 \sum_k e^{ika} c_k c_{-k} = \sum_{k<0} 2i \operatorname{sen}(ka) c_k c_{-k} + \sum_{k>0} 2i \operatorname{sen}(ka) c_k c_{-k}$$

ou seja

$$\sum_k e^{ika} c_k c_{-k} = \sum_k i \operatorname{sen}(ka) c_k c_{-k}. \quad (3.13)$$

De forma análoga

$$\begin{aligned}
\sum_k e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger &= \sum_{k<0} e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \sum_{k>0} e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = \sum_{k<0} e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \sum_{k<0} e^{ika} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger \\
&= \sum_{k<0} (e^{ika} - e^{-ika}) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = \sum_{k<0} 2i \operatorname{sen}(ka) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\sum_k e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger &= \sum_{k<0} e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + \sum_{k>0} e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = \sum_{k>0} e^{ika} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger + \sum_{k>0} e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \\
&= \sum_{k>0} (e^{ika} - e^{-ika}) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = \sum_{k>0} 2i \operatorname{sen}(ka) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger.
\end{aligned}$$

O que nos leva em

$$\sum_k e^{-ika} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger = \sum_k i \operatorname{sen}(ka) c_{-k}^\dagger c_k^\dagger; \quad (3.14)$$

e resulta

$$\sum_k e^{-ika} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger = - \sum_k i \operatorname{sen}(ka) c_{-k}^\dagger c_k^\dagger. \quad (3.15)$$

Substituindo as Eqs. (3.13), (3.14) e (3.15) na Eq. (3.12) ficamos com

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \{-2[\mu + t \cos(ka)]c_k^\dagger c_k + i\Delta e^{i\phi} \sin(ka)c_k c_{-k} - i\Delta e^{-i\phi} \sin(ka)c_{-k}^\dagger c_k^\dagger\}. \quad (3.16)$$

Escrevendo o hamiltoniano acima na forma de Bogoliubov-de Gennes, definindo $\Psi_k^\dagger = [c_k^\dagger, c_{-k}]$ encontramos que

$$\mathcal{H}_k(k) = \begin{bmatrix} -[\mu + t \cos(ka)] & i\Delta e^{i\phi} \sin(ka) \\ -i\Delta e^{-i\phi} \sin(ka) & \mu + t \cos(ka) \end{bmatrix}. \quad (3.17)$$

Vimos que a forma geral dos auto-valores do Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes é dado por

$$E_k = \pm \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\tilde{\Delta}_k|^2}.$$

Da Eq. (3.17) é fácil ver que para o Hamiltoniano de Kitaev temos

$$\varepsilon_k = -[\mu + t \cos(ka)] \quad (3.18)$$

$$\tilde{\Delta}_k = i\Delta e^{i\phi} \sin(ka). \quad (3.19)$$

Então temos que

$$\begin{aligned} E_k &= \pm \sqrt{[\mu + t \cos(ka)]^2 + \Delta^2 \sin^2(ka)} \\ &= \pm \sqrt{(t - \Delta^2) \cos^2(ka) + 2\mu t \cos(ka) + \mu^2 + \Delta^2}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Queremos agora encontrar pontos onde a energia seja nula, pois o mesmo está associado com os modos de Majorana, para isso temos que

$$(t - \Delta^2) \cos^2(ka) + 2\mu t \cos(ka) + \mu^2 + \Delta^2 = 0.$$

A equação acima deve ser satisfeita para qualquer Δ , logo precisamos exigir que os termos $-\Delta^2 \cos^2(ka)$ e Δ^2 se cancelam mutuamente, isso ocorre para $\cos(ka) = \pm 1$. Com base nisso podemos escrever as relações

$$\begin{cases} (t+\mu)^2 = 0, & \text{se } \cos(ka) = 1 \\ (t-\mu)^2 = 0, & \text{se } \cos(ka) = -1. \end{cases} \quad (3.21)$$

Das equações acima vemos que só podemos ter soluções com energia zero se $\mu = \pm t$. Veja que estes pontos correspondem exatamente a extremidade da banda do fio quântico. Olhando para a zona de Brillouin vemos que os pontos $k = \pm\pi/a$ (limites da primeira zona de Brillouin) corresponderão a $\mu = t$ e que $k = 0$ corresponde a $\mu = -t$. A diferença entre estes dois regimes ficará mais clara quando abordamos o problema do ponto de vista topológico, que é o assunto da próxima seção.

3.2.1 Topologia e matéria condensada

Tradicionalmente na matéria condensada as transições de fase são classificadas e entendidas de acordo com as ideias de Landau, estão associadas à quebra de alguma simetria do sistema, ou seja, alguma simetria é quebrada espontaneamente (14, 15, 34).

Contudo, nos últimos anos surgiu uma nova classificação das transições de fase baseadas na noção de ordem topológica¹ (14, 34). Em geral dizemos que dois objetos são topologicamente equivalentes, ou seja, pertencem a mesma classe topológica se podem ser conectados através de variações contínuas (suaves). Caso isso não seja possível, os objetos em questão pertencem a classes topológicas diferentes. Uma das grandezas que caracterizam a classe topológica é o chamado invariante topológico. Objetos que possuem mesmo invariante topológico são topologicamente equivalentes (veja a figura 7).

Nos anos 80 as transições de fase topológicas foram estudadas de forma pioneira por Thouless, Kosterlitz e Haldane (35–38). Contudo, uma das mais surpreendentes aplicações da topologia em matéria condensada se deu no entendimento da quantização da condutância do efeito Hall quântico (39) e posteriormente no estudo do efeito Hall quântico fracionário (40).

Para entendermos melhor o conceito de topologia aqui usado, imagine uma esfera no espaço euclidiano tridimensional. Agora comece a distorce-la suavemente, de forma que a superfície dela seja sempre contínua, perceba que é possível transformá-la em um cilindro maciço ou em uma bola de

¹Topologia é o ramo da matemática que estuda como elementos matemáticos se comportam sob mudanças infinitesimais, está dividida em topologia geral, topologia algébrica e topologia geométrica. Os conceitos aqui abordados se referem a topologia geométrica.

(a) Transição de fase do tipo Landau



(b) Transição de fase topológica



Figura 7: (a) Transição de fase segundo a teoria de Landau. (b) Transição de fase topológica. Figura adaptada de L. Tsui, F. Wang, and D. H. Lee, arxiv: 1511.07460v1.

futebol americano. Isso quer dizer que estes objetos pertencem à mesma classe topológica. Contudo, perceba que não podemos transformar a esfera em uma rosquinha sem que façamos um buraco na sua superfície, o que caracterizaria uma deformação descontínua. Logo, a esfera e a rosquinha não pertencem à mesma classe topológica. Considere agora uma caneca (com alça), podemos deformá-la continuamente de tal forma que a mesma se transforme na rosquinha, então, esses dois objetos pertencem à mesma classe topológica. Note que, neste caso a diferença entre a esfera e a caneca é essencialmente o número de buracos que a superfície possui.

Como dito anteriormente, o invariante topológico será a quantidade que caracterizará a classe topológica em questão. No caso das superfícies, classes distintas estão associadas com o número de buracos, e estes com o invariante topológico chamado "genus" (g) (41). No exemplo acima, a esfera possui $g = 0$ (nenhum buraco), já a caneca possui $g = 1$ (um buraco), como possuem invariante topológicos diferentes, pertencem a classes topológicas distintas. A distinção entre as classes topológicas nem sempre é tão evidente como no caso acima, mas uma vez encontrado o invariante topológico, podemos classificar as diferentes classes topológicas.

Em matéria condensada, a ideia de topologia também pode ser usada para estudar a teoria de bandas, dando origem a chamada teoria topológica de bandas. Para isso, precisamos estudar a topologia no espaço recíproco. Como já dissemos, fases topológicas diferentes não podem ser conectadas de forma suave, isso faz com que ao analisarmos a estrutura de banda, transições de fase topológicas sejam caracterizadas pelo fechamento do gap em pontos protegidos por alguma simetria do sistema.

O vácuo é um isolante trivial do ponto de vista topológico, de maneira que exista uma equivalência entre o vácuo e qualquer outro isolante topologicamente trivial, logo na superfície de um

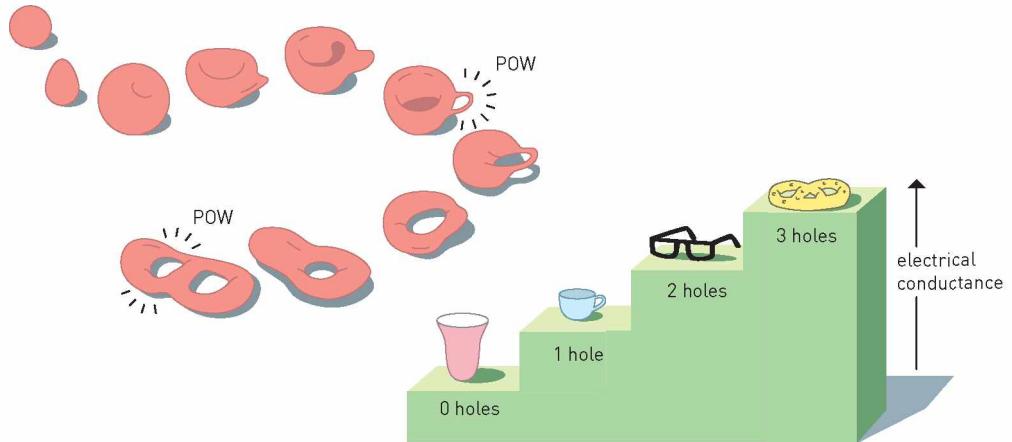


Illustration: ©Johan Jarnestad/The Royal Swedish Academy of Sciences

Figura 8: Quantização da condutância no efeito Hall quântico. Essa quantização tem origem nas distintas fases topológicas que o sistema apresenta que se diferem em números inteiros associados com o invariante topológico da fase em questão.

isolante trivial, onde há contato com o vácuo, não teremos nenhuma consequência física interessante, uma vez que os estados de superfície podem ser conectados adiabaticamente com os estados de vácuo. Porém, caso o isolante seja topologicamente não-trivial, seus estados diferem dos estados de vácuo, então, não existe uma conexão adiabática entre os estados de superfície e os de vácuo, fazendo com que hajam estados de superfície metálicos ("gapless") uma vez que, neste caso, necessariamente deve haver uma transição topológica na fronteira das duas regiões. Essa ideia é análoga ao fato de não podermos conectar uma esfera com uma rosquinha sem que façamos uma deformação abrupta (não contínua), consequência destas superfícies pertencerem a espaços topologicamente distintos.

A ideia acima explorada para isolantes pode ser estendida para supercondutores, uma vez que os estados normais, caracterizados por quase-partículas de Bogoliobov também apresentam um gap provindo do condensado supercondutor. Nas fases topologicamente não-triviais de sistemas supercondutores é que ocorrem excitações de energia zero (isto é, sem gap) que se comportam como férmiões de Majorana. A seguir vamos abordá-los no contexto simples do modelo de Kitaev.

De maneira formal, em topologia, a relação de equivalência entre dois mapas é chamada de homotopia. Neste caso estaremos interessados em mapas que podem ser continuamente deformados um no outro, caracterizando sua equivalência do ponto de vista topológico. Para uma abordagem

matematicamente rigorosa de topologia e suas aplicações em física veja a referência (41).

3.2.2 Invariante Topológico do modelo de Kitaev

A existência dos modos de Majorana está associada com a fase topológica a qual o sistema se encontra. Vamos então agora explorar os diferentes regimes topológicos do hamiltoniano de Kitaev calculando seu invariante topológico.

Primeiramente vamos escrever (3.17) da forma

$$\mathcal{H}_k = \begin{bmatrix} \varepsilon_k & \tilde{\Delta}_k \\ \tilde{\Delta}_k^* & -\varepsilon_k \end{bmatrix} = \varepsilon_k \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} + \text{Re}[\tilde{\Delta}_k] \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \text{Im}[\tilde{\Delta}_k] \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}.$$

Usando as já conhecidas matrizes de Pauli

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

podemos escrever

$$\mathcal{H}_k = \vec{h}(k) \cdot \vec{\sigma} \quad (3.22)$$

com

$$\vec{h}(k) = h_x(k) \hat{x} + h_y(k) \hat{y} + h_z(k) \hat{z},$$

$$\vec{\sigma} = \sigma^x \hat{x} + \sigma^y \hat{y} + \sigma^z \hat{z},$$

$$h_x(k) = \text{Re}[\tilde{\Delta}_k], \quad h_y(k) = \text{Im}[\tilde{\Delta}_k], \quad h_z = \varepsilon_k.$$

Olhando para (3.18) e (3.19) percebemos que

$$h_{x,y}(k) = -h_{x,y}(-k) \quad (3.23)$$

$$h_z(k) = h_z(-k). \quad (3.24)$$

Vamos definir agora o vetor unitário

$$\widehat{h}(k) = \frac{\vec{h}(k)}{|\vec{h}(k)|}. \quad (3.25)$$

O versor acima mapeia todo hamiltoniano (no espaço reciproco) em uma esfera unitária S^2 . Das relações de paridade acima é fácil perceber que nos limites da zona de Brillouin ($k = 0$ e $k = \pi$) temos

$h_{x,y}(0) = h_{x,y}(\pi) = 0$, onde usamos a simetria do sistema para considerar apenas o limite da zona de Brillouin $0 \leq k \leq \pi$. Com isso podemos escrever

$$\widehat{h}(0) = s_0 \hat{z} \quad (3.26)$$

e

$$\widehat{h}(\pi) = s_\pi \hat{z}. \quad (3.27)$$

Essas relações decorrem essencialmente do fato da supercondutividade no presente caso ser do tipo p . Lembrando que h_z representa a energia cinética (3.18) e escolhendo $a = 1$, temos

$$h_z(k) = -\mu + t \cos(k). \quad (3.28)$$

Perceba que o começo e término da trajetória (limites da zona de Brillouin) irá coincidir com os pólos da esfera unitária $s_0 \hat{z}$ e $s_\pi \hat{z}$. Estes dois pontos são identificáveis e, portanto, distintos. Perceba que isso é uma consequência da simetria partícula-buraco, esta é a simetria que nos garante estados topologicamente protegidos no presente caso.

Note que s_0 e s_π nada mais são do que o sinal da energia cinética nos pólos (medida em relação ao nível de Fermi) que claramente são ± 1 . É razoável procurarmos alguma quantidade que seja invariante do ponto de vista topológico. Note que s_0 e s_π sozinhos não revelam nenhuma física interessante. Contudo, vamos analisar o produto $s_0 s_\pi$.

Quando variamos de k de 0 até π podemos observar dois comportamentos distintos. Sempre que a trajetória de $\widehat{h}(k)$, sobre a superfície da esfera unitária, for fechada teremos que, independente do caminho que tomarmos, o produto $s_0 s_\pi$ sempre será positivo. Por outro lado, se tivermos uma trajetória que se fecha em algum ponto, correspondendo ao fechamento do gap, e portanto a transição de fase topológica, então neste caso temos que $s_0 s_\pi$ sempre será negativo. Portanto, nesse contexto, o invariante topológico pode ser definido simplesmente por (9)

$$\nu = s_0 s_\pi \quad (3.29)$$

Quando $\nu = 1$ teremos um regime chamado trivial ou não topológico. Se $\nu = -1$ então temos o chamado regime topológico. Usando a equação 3.28 teremos que

$$s_0 = \frac{h_z(0)}{|h_z(0)|} = \frac{t-\mu}{|t-\mu|} = \begin{cases} +1, & \text{se } \mu < t \\ -1, & \text{se } \mu > t \end{cases} \quad (3.30)$$

e

$$s_\pi = \frac{h_z(\pi)}{|h_z(\pi)|} = \frac{-t-\mu}{|t-\mu|} = \begin{cases} +1, & \text{se } \mu > -t \\ -1, & \text{se } \mu < -t \end{cases} \quad (3.31)$$

Logo,

$$\nu = s_0 s_\pi = -\frac{t^2 - \mu^2}{|t-\mu|^2} = \begin{cases} -1, & \text{se } |\mu| < t \\ +1, & \text{se } |\mu| > t \end{cases} \quad (3.32)$$

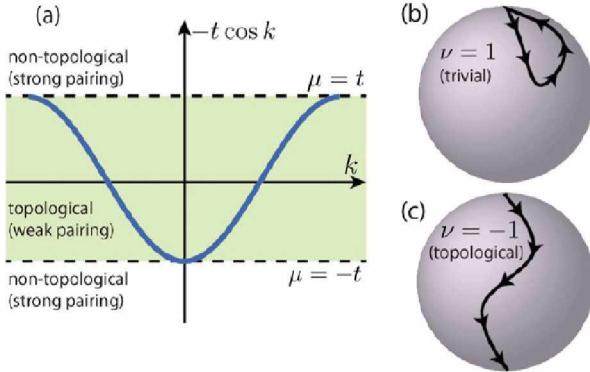


Figura 9: (a) Energia cinética para o modelo de Kitaev.(b) Regime topológico trivial, observe que o gap se fecha em determinado ponto.(c) Regime topológico não-trivial, perceba que o gap continua aberto neste caso, distinguindo-se do caso trivial(b). Fonte: Reports on Progress in Physics, 75(7):076501.

Perceba que em $\mu = \pm t$ temos exatamente a transição de fase do regime trivial para o topológico (veja Fig. 9 (a)), essa transição de fase é caracterizada pelos chamados “gapless states”. Vamos agora analisar a energia no ponto de transição topológica. Lembremos que

$$E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\tilde{\Delta}_k|^2},$$

com

$$\varepsilon_k = -[\mu + t \cos(k)], \quad \tilde{\Delta}_k = i\Delta e^{i\phi} \sin(k),$$

para $k = 0, \pi$ (limites da zona de Brillouin) temos $\varepsilon_{0,\pi} = -[\mu \pm t]$ e $\tilde{\Delta}_k = 0$, então para $\mu = \pm t$ temos simplesmente que

$$E_{0,\pi} = 0, \quad \text{com} \quad \mu = \pm t. \quad (3.33)$$

Mas, perceba que como vimos antes essa é exatamente a condição para modos de Majorana em supercondutores p -wave, por isso muitas vezes no contexto de matéria condensada chamamos modos de Majorana de energia zero. Portanto, será exatamente nos pontos de transição topológica (“gapless states”) que temos a ocorrência de modos de Majorana.

Se o fio estiver no regime topológico, suas pontas, que fazem fronteira com o vácuo, vão apresentar “gapless states” e, consequentemente, modos de Majorana. Isso decorre, como dito anteriormente, pelo fato do vácuo ser topologicamente trivial, logo, necessariamente na interface dos dois sistemas deve haver uma transição de estado topológico para que se conectem. Para acessar a física dos modos de Majorana neste sistema vamos decompor o férnion regular (efetivamente sem spin) em termos de dois férnions de Majorana da forma

$$c_j = \frac{e^{-i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j} + i\gamma_{A,j}). \quad (3.34)$$

Os operadores de Majorana obedecem as relações canônicas

$$\gamma_{\alpha,j} = \gamma_{\alpha,j}^\dagger \quad (3.35)$$

$$\{\gamma_{\alpha,j}, \gamma_{\alpha',j'}\} = 2\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{j,j'}. \quad (3.36)$$

Escrevendo a equação (3.10) em termos dos operadores de Majorana teremos

$$\begin{aligned}
H = & -\mu \sum_{j=1}^N \frac{e^{i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j}^\dagger - i\gamma_{A,j}^\dagger) \frac{e^{-i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j} + i\gamma_{A,j}) \\
& - \frac{t}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{e^{i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j}^\dagger - i\gamma_{A,j}^\dagger) \frac{e^{-i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j+1} + i\gamma_{A,j+1}) \right] \\
& - \frac{t}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{e^{i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j+1}^\dagger - i\gamma_{A,j+1}^\dagger) \frac{e^{-i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j} + i\gamma_{A,j}) \right] \\
& - \frac{\Delta}{2} \sum_{j=1}^{N-1} e^{i\phi} \frac{e^{-i\phi/2}}{2} \frac{e^{-i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j}^\dagger + i\gamma_{A,j}^\dagger) (\gamma_{B,j+1} + i\gamma_{A,j+1}) \\
& - \frac{\Delta}{2} \sum_{j=1}^{N-1} e^{-i\phi} \frac{e^{i\phi/2}}{2} \frac{e^{i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j+1}^\dagger + i\gamma_{A,j+1}^\dagger) (\gamma_{B,j} + i\gamma_{A,j}).
\end{aligned} \tag{3.37}$$

Manipulando matematicamente a equação acima e usando (3.35) e (3.36) encontramos

$$H = -\frac{\mu}{2} \sum_{j=1}^N (1 + i\gamma_{B,j}\gamma_{A,j}) - \frac{i}{4} \sum_{j=1}^{N-1} [(\Delta + t)\gamma_{B,j}\gamma_{A,j+1} + (\Delta - t)\gamma_{A,j}\gamma_{B,j+1}]. \tag{3.38}$$

O hamiltoniano acima se torna extremamente simples em dois casos limites. Primeiramente vamos analisar o caso em que $\mu \neq 0$ e $t = \Delta = 0$, analisando a equação 3.32, perceba que neste caso temos $\nu = +1$. Ou seja, corresponde ao regime trivial. Aplicando esse essas condições em (3.38) obtemos

$$H = -\frac{\mu}{2} \sum_{j=1}^N (1 + i\gamma_{B,j}\gamma_{A,j}). \tag{3.39}$$

Note que todos os modos estão ligados entre si. Considerando o outro limite dado pelas condições $\mu = 0$ e $t = \Delta \neq 0$. Neste caso, analisando (3.32), temos $\nu = -1$, correspondendo exatamente ao regime topológico. Neste caso temos que (3.38) fica simplesmente

$$H = -\frac{i}{2} t \sum_{j=1}^{N-1} \gamma_{B,j}\gamma_{A,j+1}. \tag{3.40}$$

Perceba que este regime possui uma característica interessante. Veja que o primeiro termo da soma de (3.40) conecta dois modos de Majorana de sítios diferentes através de $\gamma_{B,1}\gamma_{A,2}$ e o último termo da soma conecta $\gamma_{B,N-1}\gamma_{A,N}$. Mas veja que os termos $\gamma_{A,1}$ e $\gamma_{B,N}$ não aparecem no Hamiltoniano. Isto que dizer que eles estão desacoplados e não possuem custo de energia algum para o sistema

(veja figura 10). Perceba que isso só é possível no regime topológico, evidenciando a importância do mesmo para a aparição dos modos de Majorana. Talvez fique mais claro se escrevermos o Hamiltoniano neste limite em termos de um operador fermiônico ordinário, definindo

$$d_j = \frac{1}{2}(\gamma_{A,j+1} + i\gamma_{B,j}), \quad (3.41)$$

o Hamiltoniano (3.40) fica

$$H = t \sum_{j=1}^{N-1} \left(d_j^\dagger d_j - \frac{1}{2} \right). \quad (3.42)$$

Note que no Hamiltoniano acima fica evidente o termo que não depende da soma, esse termo está associado exatamente aos modos de Majorana nas pontas do fio. Note que ele está desacoplado do resto do Hamiltoniano, e é chamado termo de energia zero (porque não há custo algum de energia para adiciona-lo). É importante ressaltar também que qualquer operador fermiônico regular pode ser decomposto em uma parte real e imaginária como fizemos acima, consistindo nada mais do que uma técnica matemática sem desdobramentos físicos. Contudo, no presente caso, os estados topologicamente protegidos nas pontas do fio garantem a fracionalização do férnion em dois modos de Majorana espacialmente separados, mostrando que, neste caso, esse formalismo descreve um fenômeno físico e não consiste apenas um método algébrico (34).

Veja que mesmo que estejam a uma distância muito grande, sempre formarão um férnion regular (Eq. (3.41)). Essa não-localidade dos modos de Majorana é bastante interessante para possíveis aplicações em computação quântica (8, 9, 14, 34).

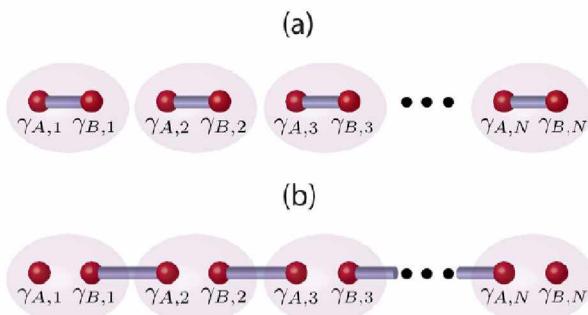


Figura 10: (a) Limite em que $\mu \neq 0$ e $t = \Delta = 0$ e (b) $\mu = 0$, $t = \Delta \neq 0$, perceba que neste limite temos na ponta da cadeia $\gamma_{A,1}$ e $\gamma_{B,N}$ formam um modo de Majorana de energia zero. Fonte: Reports on Progress in Physics, 75(7):076501.

3.3 Supercondutividade efetiva do tipo p

Como dito anteriormente, precisamos de um sistema que possa suportar supercondutividade do tipo p , isso pode ser feito utilizando os seguintes ingredientes: Um supercondutor usual do tipo s próximo a um fio quântico com forte interação spin-órbita e um campo magnético aplicado perpendicularmente a direção do fio. Vamos mostrar que estes elementos são capazes de nos gerar um estado onde os elétrons dos pares de Cooper produzam um emparelhamento do tipo tripleno.

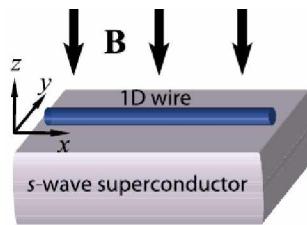


Figura 11: Campo magnético aplicado em um fio quântico próximo a um supercondutor. Fonte: Reports on Progress in Physics, 75(7):076501.

Vamos descrever separadamente cada termo do Hamiltoniano do sistema citado acima. Como dissemos, o fio quântico em questão precisa possuir acoplamento spin-órbita, para nossos propósitos iremos considerar o acoplamento spin-órbita tipo Rashba (42). O Hamiltoniano de Rashba no fio é dado por (43, 44)

$$H_R = - \sum_{jss'} i\alpha c_{j+1,s}^\dagger \hat{z} \cdot (\vec{\sigma}_{ss'} \times \hat{x}) c_{js'} + H.c. \quad (3.43)$$

onde $\vec{\sigma}_{ss'} = (\sigma_{ss'}^x, \sigma_{ss'}^y, \sigma_{ss'}^z)$, $\sigma_{ss'}^i$ são as já conhecidas matrizes de Pauli. Perceba que no capítulo 1 as descrevemos usando $x = 1$, $y = 2$ e $z = 3$, tal escolha é só uma questão de notação. Temos ainda que $c_{j+1,s}^\dagger$ cria um elétron no sítio $j+1$ com projeção de spin s e $c_{js'}$ aniquila um elétron no sítio j com projeção de spin s' e $H.c.$ significa hermitiano conjugado. O termo α nos dá a intensidade do acoplamento é dado por $\alpha = \sqrt{E_{SO}t}$, $E_{SO} = m^* \tilde{\alpha}^2 / 2\hbar$, onde m^* é a massa efetiva do elétron no fio, $\tilde{\alpha}$ a constante de Rashba e t o parâmetro de hopping. Primeiramente note que

$$\vec{\sigma}_{ss'} \times \hat{x} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \sigma_{ss'}^x & \sigma_{ss'}^y & \sigma_{ss'}^z \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \sigma_{ss'}^z \hat{y} - \sigma_{ss'}^y \hat{z}.$$

Com isso, é fácil ver que

$$\widehat{z}.(\vec{\sigma}_{ss'} \times \widehat{x}) = -\sigma_{ss'}^y$$

e lembrando que

$$\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

obtemos

$$(-i\alpha)\widehat{z}.(\vec{\sigma}_{ss'} \times \widehat{x}) = i\alpha\sigma_{ss'}^y = \alpha \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Escrevendo explicitamente agora o hamiltoniano de Rashba temos

$$H_R = \sum_j \alpha(c_{j+1,\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{j+1,\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j+1,\uparrow} - c_{j\uparrow}^\dagger c_{j+1,\downarrow}). \quad (3.44)$$

Devido ao campo magnético aplicado no fio também surgirá um termo de energia Zeeman no fio, este será importante para quebrar a degenerescência de spin. Esse termo é descrito por

$$H_z = \sum_{jss'} V_z c_{js}^\dagger \sigma_{ss'}^z c_{js'}, \quad (3.45)$$

onde V_z é energia de Zeeman que aparece devido a aplicação do campo magnético ao longo do eixo "z". A energia de Zeeman é dada por

$$V_z = g\mu_B B_z, \quad (3.46)$$

onde μ_B é o magneton de Bohr e B_z é a componente do campo magnético na direção z , e g o fator de Landé. Esse fator é modificado pela intensidade do acoplamento spin-órbita, de sorte que, mesmo que apliquemos um campo magnético pequeno, se tivermos um sistema com forte acoplamento spin-órbita, ou seja com alto fator de Landé, teremos uma energia de Zeeman considerável. Então é desejável que o fio quântico possua forte acoplamento spin-órbita, dois bons exemplos são fios feitos de *InAs* e *InSb* (9, 42). Podemos ainda por a expressão (3.45) numa forma mais simpática usando

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

e escrevendo os termos de spin explicitamente, o que nos conduz a

$$H_z = V_z \sum_j (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}). \quad (3.47)$$

Temos ainda os termos

$$H_e = -\mu \sum_j (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}), \quad (3.48)$$

onde μ é o potencial químico. Finalmente, o termo de tunelamento entre os sítios do fio é dado por

$$H_t = -t \sum_{js} (c_{j+1,s}^\dagger c_{js} + c_{js}^\dagger c_{j+1,s}), \quad (3.49)$$

onde t é o elemento de matriz entre funções de onda localizadas em distintos sítios, que permite um elétron ir de um sítio a outro. Por simplicidade consideramos sendo iguais para todos os sítios. Esses dois últimos termos correspondem ao fio sem acoplamento spin-órbita e efeito Zeeman. É possível induzir um par de Cooper no fio devido sua proximidade com o supercondutor. Esse efeito pode ser justificado de forma fenomenológica ou rigorosa por meio de funções de Green (45–48). Vamos simplesmente supor que induzimos supercondutividade no fio externo é do tipo s, de sorte que o termo de supercondutividade será dado pela expressão

$$H_{sc} = \Delta \sum_j (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}), \quad (3.50)$$

onde Δ é a magnitude do par de Cooper. Note que essa é uma supercondutividade do tipo s. Temos então que o Hamiltoniano total do fio será dado por

$$H = H_e + H_t + H_z + H_R + H_{sc},$$

ou de forma explícita,

$$\begin{aligned} H = & \sum_j [(-\mu + V_z) c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + (-\mu - V_z) c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}] - t \sum_{js} (c_{j+1,s}^\dagger c_{js} + c_{js}^\dagger c_{j+1,s}) \\ & + \sum_j \alpha (c_{j+1,\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{j+1,\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j+1,\uparrow} - c_{j\uparrow}^\dagger c_{j+1,\downarrow}) \\ & + \Delta \sum_j (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Para que a física fique mais clara, vamos diagonalizar o Hamiltoniano de Rashba. Para tanto vamos aplicar as seguintes transformações

$$c_{j+} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{j\uparrow} + i c_{j\downarrow})$$

$$c_{j-} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{j\uparrow} - i c_{j\downarrow}).$$

Consequentemente, as transformações inversas serão

$$c_{j\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{j+} + c_{j-})$$

$$c_{j\downarrow} = -\frac{i}{\sqrt{2}}(c_{j+} - c_{j-}).$$

Perceba que o que fizemos fisicamente foi rotacionar a base de spin dos elétrons. Afim de escrever os termos de (3.51) nesta nova base, note que

$$\begin{aligned} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} &= \frac{1}{2}(c_{j+}^\dagger + c_{j-}^\dagger)(c_{j+} + c_{j-}) = \frac{1}{2}(c_{j+}^\dagger c_{j+} + c_{j+}^\dagger c_{j-} + c_{j-}^\dagger c_{j+} + c_{j-}^\dagger c_{j-}), \\ c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} &= \frac{(i)(-i)}{2}(c_{j+}^\dagger - c_{j-}^\dagger)(c_{j+} - c_{j-}) = \frac{1}{2}(c_{j+}^\dagger c_{j+} - c_{j+}^\dagger c_{j-} - c_{j-}^\dagger c_{j+} + c_{j-}^\dagger c_{j-}). \end{aligned}$$

Temos ainda que

$$c_{j+1,s} c_{js} + c_{js}^\dagger c_{j+1,s} = c_{j+1,\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\uparrow}^\dagger c_{j+1,\uparrow} + c_{j\uparrow}^\dagger c_{j+1,\uparrow} + c_{j+1,\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j+1,\downarrow}.$$

Na nova base ficamos com

$$\begin{aligned} c_{j+1,\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\uparrow}^\dagger c_{j+1,\uparrow} + c_{j\uparrow}^\dagger c_{j+1,\uparrow} + c_{j+1,\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j+1,\downarrow} \\ = c_{j+1,+}^\dagger c_{j+} + c_{j+1,-}^\dagger c_{j-} + c_{j+}^\dagger c_{j+1,+} + c_{j-}^\dagger c_{j+1,-}. \end{aligned}$$

Os termos de emparelhamento se transformam como

$$\begin{aligned} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger &= \frac{i}{2}(c_{j+}^\dagger + c_{j-}^\dagger)(c_{j+}^\dagger - c_{j-}^\dagger) \\ &= \frac{i}{2}(c_{j-}^\dagger c_{j+}^\dagger - c_{j+}^\dagger c_{j-}^\dagger), \\ c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} &= -\frac{i}{2}(c_{j+} - c_{j-})(c_{j+} + c_{j-}) \\ &= -\frac{i}{2}(c_{j+} c_{j-} - c_{j-} c_{j+}). \end{aligned}$$

Somando os dois últimos termos obtemos

$$c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger + c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} = \frac{i}{2} \left[(c_{j-}^\dagger c_{j+}^\dagger + c_{j-} c_{j+}) - (c_{j+}^\dagger c_{j-}^\dagger + c_{j+} c_{j-}) \right].$$

Usando as relações de anti-comutação

$$[c_{j+}^{\dagger}, c_{j-}^{\dagger}]_+ = 0, \quad [c_{j+}, c_{j-}]_+ = 0,$$

ficamos com

$$c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} + c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} = i(c_{j-}^{\dagger} c_{j+}^{\dagger} - c_{j+} c_{j-}).$$

Utilizando os resultados acima podemos escrever as Eqs. (3.47), (3.48), (3.49) e (3.50) como:

$$H_z = \sum_j c_{j-}^{\dagger} c_{j+} + c_{j+}^{\dagger} c_{j-}, \quad (3.52)$$

$$H_e = -\mu \sum_j (c_{j+}^{\dagger} c_{j+} + c_{j-}^{\dagger} c_{j-}), \quad (3.53)$$

$$H_t = -t \sum_j (c_{j+1,+} c_{j+} + c_{j+1,-}^{\dagger} c_{j-} + c_{j+}^{\dagger} c_{j+1,+} + c_{j-}^{\dagger} c_{j+1,-}), \quad (3.54)$$

$$H_{sc} = i\Delta \sum_j (c_{j-}^{\dagger} c_{j+}^{\dagger} - c_{j+} c_{j-}). \quad (3.55)$$

Por último vamos calcular o termo de Rashba. Para tanto, note que na nova base temos

$$\begin{aligned} c_{j+1,\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} &= -\frac{i}{2} (c_{j+1,+}^{\dagger} c_{j+} - c_{j+1,+}^{\dagger} c_{j-} + c_{j+1,-}^{\dagger} c_{j+} - c_{j+1,-}^{\dagger} c_{j-}) \\ c_{j+1,\downarrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} &= \frac{i}{2} (c_{j+1,+}^{\dagger} c_{j+} + c_{j+1,+}^{\dagger} c_{j-} - c_{j+1,-}^{\dagger} c_{j+} - c_{j+1,-}^{\dagger} c_{j-}) \\ c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{j+1,\uparrow} &= \frac{i}{2} (c_{j+}^{\dagger} c_{j+1,+} - c_{j+}^{\dagger} c_{j+1,-} - c_{j-}^{\dagger} c_{j+1,+} - c_{j-}^{\dagger} c_{j+1,-}) \\ c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{j+1,\downarrow} &= -\frac{i}{2} (c_{j+}^{\dagger} c_{j+1,+} - c_{j+}^{\dagger} c_{j+1,-} + c_{j-}^{\dagger} c_{j+1,+} - c_{j-}^{\dagger} c_{j+1,-}). \end{aligned}$$

Substituindo estes resultados na equação (3.44) obtemos

$$H_R = i\alpha \sum_j (c_{j+}^{\dagger} c_{j+1,+} + c_{j+1,-}^{\dagger} c_{j-} - c_{j+1,+}^{\dagger} c_{j+} - c_{j-}^{\dagger} c_{j+1,-}). \quad (3.56)$$

Todos os cálculos até agora foram feitos no espaço real, porém a fim de estudarmos a topologia do sistema, comparando com o modelo de Kitaev (seção 3.2.2), precisamos saber como se dá a forma deste Hamiltoniano no espaço recíproco. Para isso vamos fazer uma transformada de Fourier discreta da forma

$$c_{jh} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikx_j} c_{kh}, \quad c_{jh}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikx_j} c_{kh}^\dagger,$$

com $h = +, -$. Aplicando a transformada de Fourier em cada um dos termos da Eq. (3.51). Para o termo de Zeeman temos

$$H_z = \frac{1}{N} V_z \sum_j \sum_{kk'} (e^{i(k-k')x_j} c_{k-}^\dagger c_{k'+} + e^{i(k-k')x_j} c_{k+}^\dagger c_{k'-}).$$

Lembrando que

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{i(k-k')x_j} = \delta_{kk'}, \quad (3.57)$$

temos

$$H_z = V_z \sum_k (c_{k-}^\dagger c_{k+} + c_{k+}^\dagger c_{k-}). \quad (3.58)$$

O termo do potencial químico no espaço reciproco fica

$$\begin{aligned} H_e &= -\mu \sum_j \sum_{kk'} (e^{i(k-k')x_j} c_{k+}^\dagger c_{k'+} + e^{i(k-k')x_j} c_{k-}^\dagger c_{k'-}) \\ H_e &= -\mu \sum_k (c_{k+}^\dagger c_{k+} + c_{k-}^\dagger c_{k-}). \end{aligned} \quad (3.59)$$

Transformando agora o termo de hopping

$$\begin{aligned} H_t &= -\frac{t}{N} \sum_j \sum_{kk'} e^{ik(x_j+a)} c_{k+}^\dagger c_{k'+} e^{-ik'x_j} + e^{ik(x_j+a)} c_{k-}^\dagger c_{k'-} e^{-ik'x_j} + \\ &\quad e^{ikx_j} c_{k+}^\dagger c_{k'} e^{-ik'(x_j+a)} + e^{ikx_j} c_{k-}^\dagger c_{k'} e^{-ik'(x_j+a)}. \end{aligned}$$

Ou

$$H_t = -t \sum_k (c_{k+}^\dagger c_{k+} + c_{k-}^\dagger c_{k-}) e^{ika} + (c_{k+}^\dagger c_{k+} + c_{k-}^\dagger c_{k-}) e^{-ika}.$$

Podemos ainda escrever de forma mais compacta,

$$H_t = -t \sum_{k,r} (c_{kr}^\dagger c_{kr})(e^{ika} + e^{-ika}),$$

de onde obtemos

$$H_t = -2t \sum_{kr} c_{kr}^\dagger c_{kr} \cos(ka). \quad (3.60)$$

Para o termo de Rashba podemos escrever

$$\begin{aligned} H_R &= \frac{i\alpha}{N} \sum_j \sum_{kk'} e^{ikx_j} c_{k+}^\dagger e^{ik'(x_j+a)} c_{k'+} + e^{ik(x_j+a)} c_{k-}^\dagger c_{k'-} e^{ik'x_j} - \\ &\quad e^{-ik(x_j+a)} c_{k+}^\dagger c_{k'+} e^{ik'x_j} - e^{ikx_j} c_{k-}^\dagger c_{k'-} e^{ik'(x_j+a)} \\ H_R &= i\alpha \sum_k c_{k+}^\dagger c_{k+} (e^{ika} - e^{-ika}) + c_{k-}^\dagger c_{k-} (e^{-ika} - e^{ika}) \\ H_R &= 2\alpha \sum_k (c_{k+}^\dagger c_{k+} - c_{k-}^\dagger c_{k-}) \sin(ka). \end{aligned} \quad (3.61)$$

Por último, temos

$$H_{sc} = \frac{i\Delta}{N} \sum_j \sum_{kk'} e^{ikx_j} c_{k-}^\dagger e^{ik'x_j} c_{k'+}^\dagger + e^{ikx_j} c_{k-}^\dagger e^{ik'x_j} c_{k'-}^\dagger.$$

Fazendo aqui $k' = -k$ e usando a relação (3.57) obtemos

$$H_{sc} = i\Delta \sum_k (c_{k-}^\dagger c_{-k,+}^\dagger + c_{-k,+} c_{k,-}). \quad (3.62)$$

Temos então que (3.51) no espaço recíproco fica como

$$H = \sum_k \left[\varepsilon_{k+} c_{k+}^\dagger c_{k+} + \varepsilon_{k-} c_{k-}^\dagger c_{k-} + V_z (c_{k+}^\dagger c_{k-} + c_{k-}^\dagger c_{k+}) + i\Delta (c_{k-}^\dagger c_{-k,+}^\dagger - c_{-k,+} c_{k,-}) \right]. \quad (3.63)$$

Onde

$$\varepsilon_{k+} = -\mu - 2t \cos(ka) + 2\alpha \sin(ka) \quad (3.64)$$

$$\varepsilon_{k-} = -\mu - 2t \cos(ka) - 2\alpha \sin(ka). \quad (3.65)$$

Para nossos propósitos vamos escrever (3.63) da forma

$$H = H_1 + H_{sc}, \quad (3.66)$$

onde separamos o termo supercondutor de (3.63). Perceba também que podemos escrever H_1 na forma matricial como

$$H_1 = \begin{pmatrix} c_{k+}^\dagger & c_{k-}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{k+} & V_z \\ V_z & \varepsilon_{k-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k+} \\ c_{k-} \end{pmatrix}.$$

Por meio de cálculo direto podemos ver que

$$\begin{pmatrix} c_{k+}^\dagger & c_{k-}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{k+} & V_z \\ V_z & \varepsilon_{k-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k+} \\ c_{k-} \end{pmatrix} = \varepsilon_{k+} c_{k+}^\dagger c_{k+} + \varepsilon_{k-} c_{k-}^\dagger c_{k-} + V_z c_{k+}^\dagger c_{k-} + V_z c_{k-}^\dagger c_{k+},$$

que nos dá exatamente todos os termos de (3.63), com exceção do termo supercondutor. Vamos agora diagonalizar H_1 , definindo E_k como os autovalores, temos

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{k+} - E_k & V_z \\ V_z & \varepsilon_{k-} - E_k \end{vmatrix} = 0. \quad (3.67)$$

Que nos dá

$$(\varepsilon_{k+} - E_k)(\varepsilon_{k-} - E_k) - V_z^2 = 0$$

$$E_k^2 - E_k(\varepsilon_{k+} + \varepsilon_{k-}) + \varepsilon_{k+}\varepsilon_{k-} - V_z^2 = 0.$$

As soluções da equação acima são

$$\begin{aligned}
E_{\pm}(k) &= \frac{\varepsilon_{k+} + \varepsilon_{k-}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{k+} + \varepsilon_{k-})^2 - 4\varepsilon_{k+}\varepsilon_{k-} + 4V_z^2} \\
&= \frac{\varepsilon_{k+} + \varepsilon_{k-}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\varepsilon_{k+}^2 + \varepsilon_{k-}^2 - 2\varepsilon_{k+}\varepsilon_{k-} + 4V_z^2} \\
&= \frac{\varepsilon_{k+} + \varepsilon_{k-}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{k+} - \varepsilon_{k-})^2 + 4V_z^2}.
\end{aligned}$$

Note que os valores ε_{k+} e ε_{k-} são dados por (3.64) e (3.65), respectivamente, de onde obtemos

$$E_{\pm}(k) = -\mu - 2t \cos(ka) \pm \frac{1}{2} \sqrt{16\alpha^2 \sin^2(ka) + 4V_z^2}.$$

Ou, finalmente

$$E_{\pm}(k) = -\mu - 2t \cos(ka) \pm \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}. \quad (3.68)$$

Até aqui apenas diagonalizamos o Hamiltoniano afim de obter a relação de dispersão e vermos como

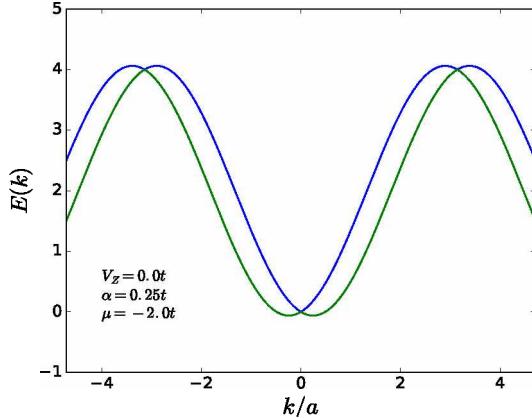


Figura 12: Relação de dispersão para $V_z = 0$ ($\vec{B} = 0$). Perceba que temos uma degenerescência exatamente em $k = 0$, impedindo assim a existência de estados “spinless”.

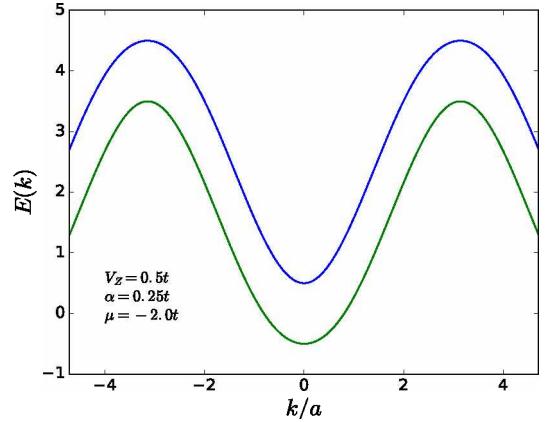


Figura 13: Relação de dispersão para $V_z \neq 0$ ($\vec{B} \neq 0$). Note que a degenerescência em $k = 0$ desaparece devido a polarização dos spins induzida pelo campo magnético aplicado. Permitindo acoplamento p-wave.

o campo magnético desdobra os níveis destruindo a degenerescência em $k = 0$ (figuras 12 e 13). Precisamos agora adicionar o efeito da supercondutividade nas bandas. Vimos que o emparelhamento supercondutor está relacionado com as projeções de spin, para isso precisamos voltar para a base original (\uparrow, \downarrow). Isto pode ser feito através das transformações inversas

$$c_{k+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{k\uparrow} + ic_{k\downarrow})$$

$$c_{k-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{k\uparrow} - ic_{k\downarrow}).$$

Computando agora os termos de interesse

$$\begin{aligned} c_{k+}^\dagger c_{k+} &= \frac{1}{2}(c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + ic_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} - ic_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}), \\ c_{k-}^\dagger c_{k-} &= \frac{1}{2}(c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - ic_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + ic_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}), \\ c_{k+}^\dagger c_{k-} &= \frac{1}{2}(c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - ic_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} - ic_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}), \\ c_{k-}^\dagger c_{k+} &= \frac{1}{2}(c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + ic_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + ic_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}), \\ c_{k-}^\dagger c_{-k+}^\dagger &= \frac{1}{2}(c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\uparrow}^\dagger - ic_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + ic_{k\downarrow}^\dagger c_{-k\uparrow}^\dagger + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger), \\ c_{-k+}^\dagger c_{k-} &= \frac{1}{2}(c_{-k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} - ic_{-k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} + ic_{-k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}) \end{aligned}$$

e substituindo as relações acima em (3.63) obtemos

$$\begin{aligned} H = \sum_k [(-\mu - 2t \cos(ka) + V_z) c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + (-\mu - 2t \cos(ka) - V_z) c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow}] \\ + \sum_k [2i\alpha \sin(ka) c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} - 2i\alpha \sin(ka) c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}] \\ + \sum_k \Delta(c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + c_{-k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}). \end{aligned} \quad (3.69)$$

Como fizemos anteriormente, vamos escrever o Hamiltoniano da forma

$$H = H_1 + H_{sc}$$

onde agora

$$H_1 = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^\dagger & c_{k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mu - 2t\cos(ka) + V_z & 2i\alpha\sin(ka) \\ -2i\alpha\sin(ka) & -\mu - 2t\cos(ka) - V_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{k\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (3.70)$$

Se diagonalizarmos H_1 iremos obter novamente

$$E_\pm(k) = -\mu - 2t\cos(ka) \pm \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}.$$

O que era esperado, uma vez que as transformações feitas apenas efetuaram uma rotação na base do sistema. Precisamos também encontrar os autovetores do sistema. Para isso considera o problema de autovetores geral

$$\begin{vmatrix} E_1 - E & \beta \\ \beta^* & E_2 - E \end{vmatrix} = 0, \quad (3.71)$$

que nos dá autovalores da forma

$$E_\pm = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right)^2 + |\beta|^2}.$$

Vamos determinar primeiramente os autovetores do autovalor E_+ :

$$\begin{pmatrix} E_1 & \beta \\ \beta^* & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix} = E_+ \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E_1 - E_+ & \beta \\ \beta^* & E_2 - E_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix} = 0$$

com isso obtemos a relação

$$\begin{aligned} (E_1 - E_+)a_+ + \beta b_+ &= 0 \\ b_+ &= -\frac{(E_1 - E_+)}{\beta}a_+. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Usando (3.72) e a condição de normalização que $|a_+|^2 + |b_+|^2 = 1$, obtemos

$$|a_+|^2 \left[1 + \frac{(E_1 - E_+)^2}{|\beta|^2} \right] = 1$$

$$|a_+|^2 [|\beta|^2 + (E_1 - E_+)^2] = |\beta|^2.$$

Escolhendo a_+ real, obtemos

$$a_+ = \frac{|\beta|}{\sqrt{(E_1 - E_+)^2 + |\beta|^2}}, \quad b_+ = -\frac{(E_1 - E_+)}{\sqrt{(E_1 - E_+)^2 + |\beta|^2}} \frac{\beta^*}{|\beta|}. \quad (3.73)$$

Para o autovalor E_- teremos

$$\begin{pmatrix} E_1 & \beta \\ \beta^* & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix} = E_- \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E_1 - E_- & \beta \\ \beta^* & E_2 - E_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix} = 0. \quad (3.74)$$

Resolvendo (3.74) obtemos

$$\beta^* a_- + (E_2 - E_-) b_- = 0$$

$$a_- = -\frac{(E_2 - E_-)}{\beta^*}.$$

Usando novamente a condição de normalização e escolhendo b_- real obtemos

$$a_- = -\frac{(E_2 - E_-)}{\sqrt{(E_2 - E_-)^2 + |\beta|^2}} \frac{\beta}{|\beta|}, \quad b_- = \frac{|\beta|}{\sqrt{(E_2 - E_-)^2 + |\beta|^2}}. \quad (3.75)$$

Comparando (3.70) com (3.71) temos

$$E_1 = -\mu - 2t \cos(ka) + V_z$$

$$E_2 = -\mu - 2t \cos(ka) - V_z$$

$$\beta = 2i\alpha \sin(ka)$$

$$\beta^* = -2i\alpha \sin(ka).$$

Vimos que para o caso geral que os autovetores tomam a forma

$$a_+ = \frac{|\beta|}{\sqrt{(E_1 - E_+)^2 + |\beta|^2}}, \quad b_+ = -\frac{(E_1 - E_+)}{\sqrt{(E_1 - E_+)^2 + |\beta|^2}} \frac{\beta^*}{|\beta|}$$

$$a_- = -\frac{(E_2 - E_-)}{\sqrt{(E_2 - E_-)^2 + |\beta|^2}} \frac{\beta}{|\beta|}, \quad b_- = \frac{|\beta|}{\sqrt{(E_2 - E_-)^2 + |\beta|^2}}.$$

Se usarmos as expressões acima para E_1 , E_2 e fizermos algumas manipulações algébricas ficamos com os coeficientes

$$a_+ = \frac{2\alpha |\sin(ka)|}{\sqrt{2 \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} \left[\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} - V_z \right]}}, \quad (3.76)$$

$$b_+ = -i \sqrt{\frac{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} - V_z}{2 \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}}} \text{sign}(k), \quad (3.77)$$

$$a_- = i \sqrt{\frac{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} - V_z}{2 \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}}} \text{sign}(k), \quad (3.78)$$

$$b_- = \frac{2\alpha |\sin(ka)|}{\sqrt{2 \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} \left[\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} - V_z \right]}}. \quad (3.79)$$

Onde $\text{sign}(k)$ é a chamada função sinal, ela retorna apenas o sinal de k . Agora que conhecemos os autovetores, podemos escrever $c_{k\uparrow}$ e $c_{k\downarrow}$ em função de c_{k+} e c_{k-} da forma

$$\begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{k\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_+^* & b_+^* \\ a_-^* & b_-^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k+} \\ c_{k-} \end{pmatrix}.$$

Que corresponde as relações

$$c_{k\uparrow} = a_+^* c_{k+} + b_+^* c_{k-} \quad (3.80)$$

$$c_{k\downarrow} = a_-^* c_{k+} + b_-^* c_{k-}. \quad (3.81)$$

Perceba que tais transformações aparecem de forma mais natural quando voltamos para a base definida pela projeção dos spin. Usando isso podemos agora escrever o termo supercondutor nessa nova base, então

$$\begin{aligned} H_{sc} &= \Delta \sum_k [a_+(k)c_{k+}^\dagger + b_+(k)c_{k-}^\dagger][a_-(-k)c_{-k+}^\dagger + b_-(-k)c_{-k-}^\dagger] + H.c. \\ &= \Delta \sum_k \{a_+(k)a_-(-k)c_{k+}^\dagger c_{-k+}^\dagger + b_+(k)b_-(-k)c_{k-}^\dagger c_{-k-}^\dagger \\ &\quad + a_+(k)b_-(-k)c_{k+}^\dagger c_{-k-}^\dagger + b_+(-k)a_-(-k)c_{-k-}^\dagger c_{k+}^\dagger\} + H.c. \end{aligned}$$

Que podemos escrever ainda como

$$\begin{aligned} H_{sc} &= \Delta \sum_k \{a_+(k)a_-(-k)c_{k+}^\dagger c_{-k+}^\dagger + b_+(k)b_-(-k)c_{k-}^\dagger c_{-k-}^\dagger \\ &\quad + [a_+(k)b_-(-k) - b_+(-k)a_-(k)]c_{k+}^\dagger c_{-k-}^\dagger\} + H.c. \end{aligned} \quad (3.82)$$

Note que usei a notação $a_r(k)$ uma vez que os autovetores são funções unicamente de k . Usando os valores que encontramos para os autovetores podemos calcular

$$\begin{aligned} a_+(k)a_-(-k) &= \frac{i\alpha \sin(ka)}{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}}, \quad b_+(k)b_-(-k) = \frac{i\alpha \sin(ka)}{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}}, \\ a_+(k)b_-(-k) &= \frac{-4\alpha^2 \sin^2(ka)}{2 \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} \left[\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} - V_z \right]}, \\ b_+(-k)a_-(k) &= \frac{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2} - V_z}{2 \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}}. \end{aligned}$$

Temos ainda que

$$a_+(k)b_-(-k) - b_+(-k)a_-(k) = \frac{V_z}{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}}.$$

Com isso podemos escrever (3.82) como

$$H_{sc} = \Delta \sum_k [f_p(k)(c_{k+}^\dagger c_{-k+}^\dagger + c_{k-}^\dagger c_{-k-}^\dagger) + f_s(k)c_{k+}^\dagger c_{-k-}^\dagger] + H.c. \quad (3.83)$$

onde

$$f_p(k) = -\frac{i\alpha \operatorname{sen}(ka)}{\sqrt{4\alpha^2 \operatorname{sen}^2(ka) + V_z^2}}; \quad f_s(k) = \frac{V_z}{\sqrt{4\alpha^2 \operatorname{sen}^2(ka) + V_z^2}}. \quad (3.84)$$

Note que $f_p(k)$ é uma função ímpar, que tanto almejávamos, $f_s(k)$ corresponde a uma função par, o emparelhamento do tipo p conecta elementos intra-banda, já o emparelhamento do tipo s acopla elementos inter-banda (figura 12). Precisamos agora encontrar um regime onde não haja emparelhamento do tipo s , mas apenas do tipo p . Isso vai acontecer quando o potencial químico se encontrar entre as bandas, de forma que os elétrons e buracos que se encontram nesse regime estarão todos com a mesma projeção de spin (figura 13).

Vamos escrever agora o Hamiltoniano na forma de Bogoliubov-de Gennes apresentada no capítulo anterior

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \Psi_k^\dagger \mathcal{H}_k \Psi_k.$$

Definindo agora $\Psi_k^\dagger = [c_{k-}^\dagger, c_{-k-}, c_{k+}^\dagger, c_{-k+}]$, temos que \mathcal{H}_k para o presente sistema toma a forma

$$\mathcal{H}_k = \begin{bmatrix} E_-(k) & \Delta f_p(k) & 0 & 0 \\ \Delta f_p^*(k) & -E_-(k) & \Delta f_s(k) & 0 \\ 0 & \Delta f_s^*(k) & E_+(k) & \Delta f_p(k) \\ 0 & 0 & \Delta f_p^*(k) & -E_+(k) \end{bmatrix} \quad (3.85)$$

A matriz acima pode ser subdividida em dois sub-espacos da forma

$$\mathcal{H}_k = \begin{bmatrix} H_P & H_{PQ} \\ H_{QP} & H_Q \end{bmatrix}$$

onde

$$H_P = \begin{bmatrix} E_-(k) & \Delta f_p(k) \\ \Delta f_p^*(k) & -E_-(k) \end{bmatrix}, \quad H_Q = \begin{bmatrix} E_+(k) & \Delta f_p(k) \\ \Delta f_p^*(k) & -E_+(k) \end{bmatrix}, \quad (3.86)$$

$$H_{PQ} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \Delta f_s(k) & 0 \end{bmatrix}, \quad H_{QP} = \begin{bmatrix} 0 & \Delta f_s^*(k) \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.87)$$

Note que $H_{PQ} = H_{QP}^\dagger$. Da equação de Schrödinger temos que

$$\mathcal{H}_k \Psi_k = E \Psi_k, \quad (3.88)$$

explicitamente temos que

$$\begin{pmatrix} H_P & H_{PQ} \\ H_{QP} & H_Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_P \\ \phi_Q \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_P \\ \phi_Q \end{pmatrix}.$$

Vamos nos concentrar apenas no sub-espaco P , considerando apenas a projeção do espaco Q no mesmo. Para isso vamos considerar há uma grande separação energetica das bandas representadas por H_Q e H_P . Com isso da equação acima temos

$$(H_P + H_{PQ}(E - H_Q)^{-1}H_{QP})\phi_P = E\phi_P$$

que nos leva então a um Hamiltoniano efetivo

$$\tilde{H}_P(K) = H_P + H_{PQ}(E - H_Q)^{-1}H_{QP}. \quad (3.89)$$

Podemos expandir o denominador da expressão acima da forma

$$\begin{aligned} \tilde{H}_P(K) &= H_P + H_{PQ}(E - H_Q)^{-1}H_{QP} \\ &= H_P + \frac{H_{PQ}}{E} \left[1 + \frac{H_Q}{E} + \left(\frac{H_Q}{E} \right)^2 + \dots \right] H_{QP}. \end{aligned}$$

Matricialmente temos

$$\begin{aligned} \tilde{H}_P(k) &= H_P + \frac{1}{E} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \Delta f_s & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \Delta f_s \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{E^2} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \Delta f_s^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_+(k) & \Delta f_p \\ \Delta f_p^* & -E_+(k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \Delta f_s \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \dots \\ &= H_P + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \Delta^2 f_s^2 / E \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \Delta^3 f_s^2 f_p^* / E^2 \end{bmatrix} + \dots \end{aligned}$$

Substituindo a expressão de H_P temos

$$\tilde{H}_P(k) \approx \begin{bmatrix} E_-(k) & \Delta f_p(k) \\ \Delta f_p^*(k) & -E_-(k) + \frac{f_s^2 \Delta^2}{E} + \frac{f_s^2 f_p^* \Delta^3}{E^2} \end{bmatrix}. \quad (3.90)$$

Assumindo

$$E \approx E_- = -\mu - 2t \cos(ka) + \sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}$$

e para k pequenos temos $\cos(ka) \approx 1$; $\sin^2(ka) \approx 0$ vemos que

$$\frac{\Delta^2 f_s^2}{E} \approx \frac{\Delta^2}{-2t + |V_z| - \mu}.$$

Perceba que se tivermos $|V_z - \tilde{\mu}| \gg \Delta$, com $\tilde{\mu} = \mu + 2t$, podemos escrever

$$\tilde{\mathcal{H}}_P(k) \approx \begin{bmatrix} E_-(k) & \Delta f_p(k) \\ \Delta f_p^*(k) & -E_-(k) \end{bmatrix}. \quad (3.91)$$

Portanto, temos um regime onde se apresenta apenas emparelhamento do tipo p e juntamente com a simetria partícula-buraco possibilita a existência dos modos de Majorana. Observe também que precisamos de uma grande energia de Zeeman (V_z) para que haja um emparelhamento efetivo do tipo p .

Vamos agora fazer a conexão com o modelo de Kitaev. Para isso vamos escrever (3.91) explicitamente, usando (3.84) temos

$$\mathcal{H}_p(k) = \begin{bmatrix} E_-(k) & \frac{i\tilde{\Delta}\alpha \sin(ka)}{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}} \\ \frac{-i\tilde{\Delta}\alpha \sin(ka)}{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}} & -E_-(k) \end{bmatrix}. \quad (3.92)$$

Expandindo os termos dependentes de k para seus pequenos valores, obtemos

$$\frac{i\tilde{\Delta}\alpha \sin(ka)}{\sqrt{4\alpha^2 \sin^2(ka) + V_z^2}} \approx \frac{i\tilde{\Delta}\alpha ka}{\sqrt{4\alpha^2 (k^2 a^2) + V_z^2}} \approx \frac{i\tilde{\Delta}\alpha ka}{|V_z|}.$$

Nos dando então

$$\mathcal{H}_p(k) \approx \begin{bmatrix} E_-(\tilde{k}) & \frac{i\tilde{\Delta}\alpha ka}{|V_z|} \\ \frac{-i\tilde{\Delta}\alpha ka}{|V_z|} & -E_-(\tilde{k}) \end{bmatrix}, \quad (3.93)$$

onde \tilde{k} é a dependência em k próximo a origem. Fazendo o mesmo para (3.17) ficamos

$$\mathcal{H}_k(k) \approx \begin{bmatrix} -E_-(\tilde{k}) & i\Delta e^{i\phi} ka \\ -i\Delta e^{-i\phi} ka & E_-(\tilde{k}) \end{bmatrix}. \quad (3.94)$$

Podemos então estabelecer a relação

$$\Delta_{Kitaev} = \Delta e^{i\phi}, \tilde{\Delta} \text{ corresponde à supercondutividade induzida no fio pelo supercondutor. Esse resultado ocorre quando estamos próximos do fundo da banda superior e o topo da banda inferior (figura 13). Se o potencial químico se encontrar entre as bandas, então é possível acessar estados com emparelhamento supercondutor do tipo } p \text{ (triplo). Note que é desejável que } |V_z| \text{ seja considerável, de tal forma que a razão } \alpha/|V_z| \text{ seja razoavelmente pequena, fazendo que o emparelhamento supercondutor seja pequeno (equação (3.95)), o que corresponde exatamente ao regime topológico } (\nu = -1) \text{ do modelo de Kitaev.}$$

Vimos que o que difere o regime trivial e topológico é o fechamento do "gap" protegido por alguma simetria do sistema, como já discutimos. Portanto, para que tenhamos a passagem do regime topológico para o trivial temos necessariamente que o gap deve fechar.

Discutimos acima o caso limite onde $|V_z| - \tilde{\mu}| >> \Delta$, onde mostramos o mapeamento do sistema proposto no modelo de Kitaev. Contudo, podemos analisar melhor a estrutura de bandas do sistema e a fase topológica do mesmo se usarmos o Hamiltoniano de Bogoliobov-de Gennes em sua totalidade (3.85). Primeiramente vamos analisar o caso onde temos o campo magnético aplicado ($V_z = 0$). O resultado é mostrado na figura 14. Perceba que a estrutura de bandas apresentam a simetria partícula-buraco presente do Hamiltoniano de Bogoliobov-de Gennes, isso se reflete no fato da estrutura de bandas ser simétrica com relação a $E(k) = 0$.

Para campos magnéticos fracos, como na figura 15, temos que o gap em $k = 0$ se abre, mas observe que a região de acesso do potencial químico correspondente a emparelhamento supercondutor do tipo p ainda é muito limitada. Isso decorre do fato das bandas de diferente helicidade (curva azul e vermelha da figura 15) estarem muito próximas, impossibilitando a eliminação da supercondutividade do tipo s , que como vimos anteriormente, conecta elementos de diferentes bandas. No entanto, percebemos que o gap fecha em $k = 0$ exatamente para o valor de $V_z^c = \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\mu}^2}$, como mostrado na figura 16, caracterizando então a passagem do regime trivial para o regime topológico e é exatamente onde ocorre a formação de modos de Majorana, o valor da energia de Zeeman crítica pode ser encontrado diagonalizando analiticamente o Hamiltoniano (3.85) (9, 17).

Os resultados acima são calculados no "bulk" do fio supercondutor. Logo, precisamos que o fio se encontre em um regime topológico para que sua fronteira com o vácuo apresente "gapless states" e consequentemente, a presença de modos de Majorana nestes pontos. Então para que o sistema esteja

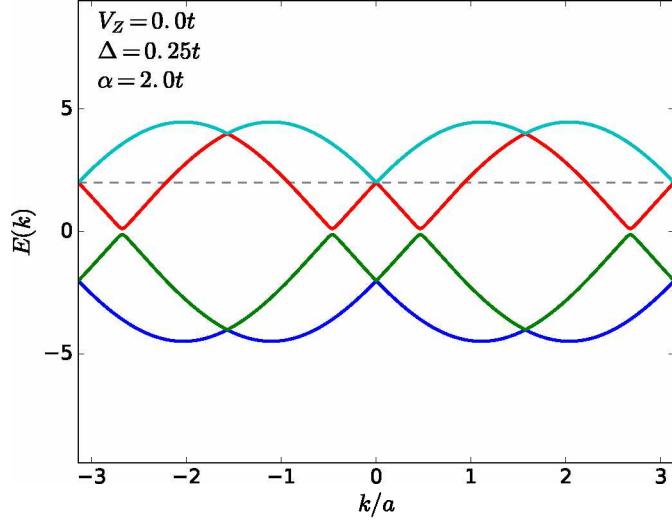


Figura 14: Estrutura de banda do fio supercondutor para campo magnético nulo. A linha tracejada corresponde à posição do potencial químico com relação ao fundo da banda, definida por $\tilde{\mu} = \mu + 2t$. A escolha do alto valor da interação spin-órbita (α) é apenas para a melhor vizualização das bandas.

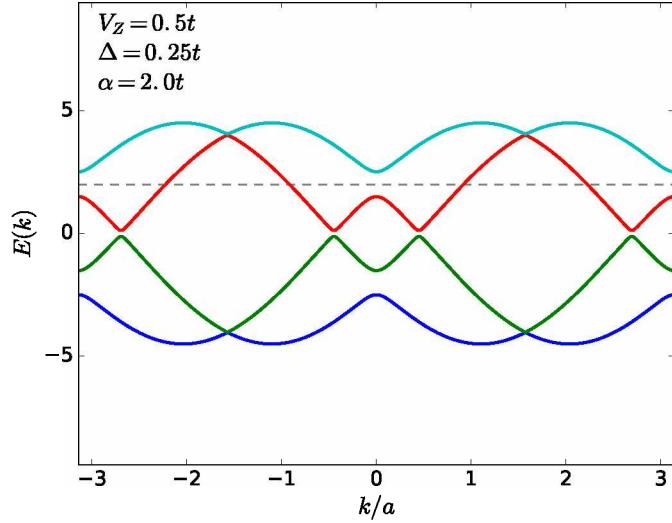


Figura 15: Estrutura de banda do fio supercondutor para pequeno campo magnético. A linha tracejada corresponde à posição do potencial químico com relação ao fundo da banda, definida por $\tilde{\mu} = \mu + 2t$. Perceba que a região de acesso a emparelhamento supercondutor do tipo p é bastante limitada.

na fase topológica precisamos obedecer à condição

$$|V_z| > \sqrt{\tilde{\Delta}^2 + \tilde{\mu}^2}, \quad (3.96)$$

a figura 17 mostra o fio supercondutor no regime topológico. Apesar de limites próximos da transição de fase topológica não apresentarem supercondutividade do tipo p muito robusta, ainda assim obser-

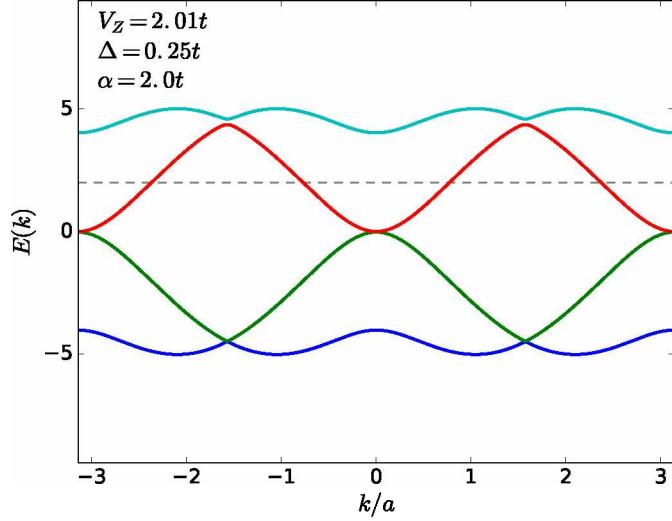


Figura 16: Estrutura de banda do fio supercondutor. A linha tracejada corresponde à posição do potencial químico com relação ao fundo da banda, definida por $\tilde{\mu} = \mu + 2t$. O gap se fecha em $k = 0$, caracterizado pela energia de Zeeman crítica $V_Z^c = \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\mu}^2}$, no presente caso $V_Z^c \approx 2.01t$.

varemos modos de Majorana, uma vez que os mesmos tem origem topológica e só podem desaparecer caso haja a interface com uma fase trivial.

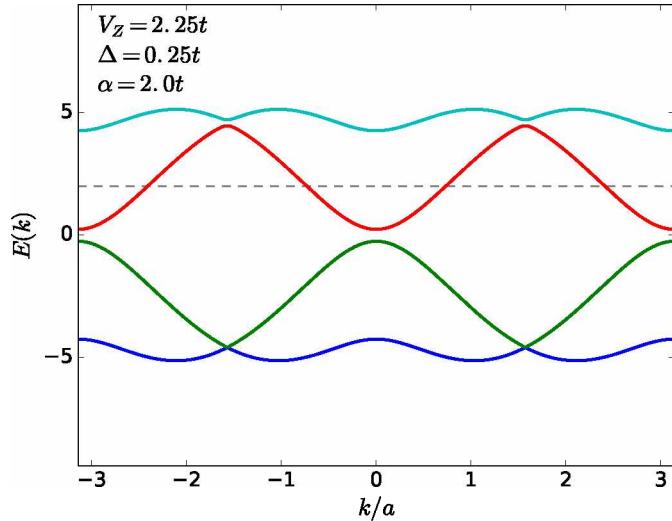


Figura 17: Estrutura de banda do fio supercondutor, com $V_Z > V_Z^c$. A linha tracejada corresponde à posição do potencial químico com relação ao fundo da banda, definida por $\tilde{\mu} = \mu + 2t$. Neste caso o supercondutor é topológico e sua interface com o vácuo (trivial) irá suportar modos de Majorana.

4 Estados ligados de Andreev e Majorana em pontos quânticos

4.1 Motivação

Nos capítulos anteriores discutimos em detalhes os mecanismos responsáveis pela formação de estados ligados de Andreev e Majorana. O primeiro surge na junção de sistemas normais com supercondutores usuais, enquanto o segundo aparece na interface de um sistema trivialmente topológico com um supercondutor topologicamente não trivial.

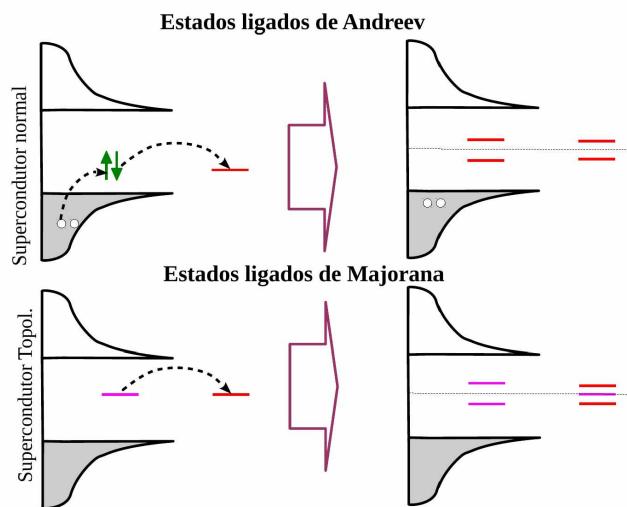


Figura 18: Esquematização do contato entre um nível ressonante e um supercondutor usual (figura superior) e topológico (figura inferior). No caso usual vemos a formação do estado ligado de Andreev, enquanto na inferior a presença do modo de Majorana. Fonte: Figura elaborada por Edson Vernek e adaptada pelo autor.

Por simplicidade, vamos considerar apenas um nível ressonante em contato com um supercondutor, trivial em um caso e topológico no outro, os fenômenos associados com esse tipo de junções estão esquematizados na figura 18. Note na figura superior a presença de um estado ligado de Andreev, caracterizado pelos picos duplos e simétricos com relação ao nível energético do nível ressonante. Já na

figura inferior podemos observar a transferência do modos de Majorana do supercondutor usual para o nível ressonante, como previsto em (49).

Apesar dos dois fenômenos descritos acima já serem extensivamente estudados, pouca atenção tem sido dedicada para a influência que um possa exercer no outro (19, 20). Devemos então procurar um sistema simples que possa suportar os dois fenômenos e que, além disso, possibilite o acoplamento de um com o outro como mostrado na figura 19.

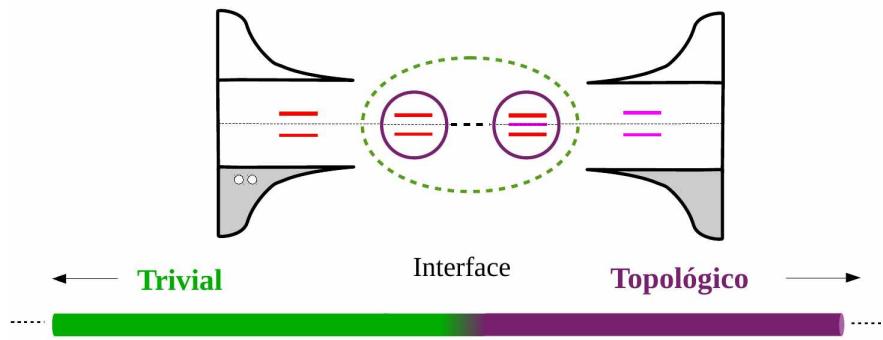


Figura 19: Esquematização de um sistema que suporte tanto estados ligados de Andreev quanto de Majorana e que possibilite a interação entre ambos. Fonte: Figura elaborada por Edson Vernek e adaptada pelo autor.

Para estudarmos então os dois fenômenos e sua interação propomos um sistema de estudo que é composto por dois pontos quânticos acoplados entre si e os mesmos acoplados cada um a um respetivo reservatório metálico e a seu supercondutor (veja figura 20).

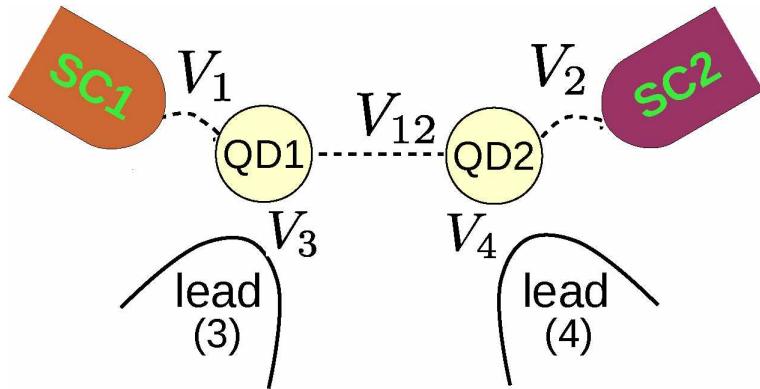


Figura 20: Sistema de estudo. Dois pontos quânticos acoplados entre si e os mesmos a acoplados a reservatórios metálicos e fios supercondutores, sendo que o supercondutor SC2 apresenta uma fase topológica.

No limite de banda larga os reservatórios metálicos apenas vão oferecer um alargamento ao nível do ponto quântico. Contudo, aqui os supercondutores serão tratados em sua totalidade, para o cálculo

das propriedades espetrais do mesmo usaremos o método iterativo descrito em detalhes na próxima seção. O Hamiltoniano do sistema é então dado por

$$H = H_{\text{dots}} + H_{\text{SC}} + H_{\text{leads}} + H_{\text{dot-leads}} + H_{\text{dot-SC}} + H_{\text{T}}, \quad (4.1)$$

onde

$$H_{\text{dots}} = \sum_{i=1,2,s} \varepsilon_{i,s} d_{i,s}^\dagger d_{i,s}, \quad (4.2)$$

$$H_{\text{leads}} = \sum_{\ell \mathbf{k}, s} \varepsilon_{\ell \mathbf{k}, s} c_{\ell \mathbf{k}, s}^\dagger c_{\ell \mathbf{k}, s} \quad (\ell = 3, 4), \quad (4.3)$$

$$H_{\text{dot-leads}} = \sum_{\mathbf{k}, s} (V_3 d_{1,s}^\dagger c_{3,\vec{\mathbf{k}},s} + V_4 d_{2,s}^\dagger c_{4,\vec{\mathbf{k}},s} + H.c.), \quad (4.4)$$

$$H_{\text{dot-SC}} = - \sum_s (V_1 d_{1,s}^\dagger c_{-1,s} + V_2 d_{2,s}^\dagger c_{1,s}) + H.c., \quad (4.5)$$

$$H_{\text{T}} = -V_{12} \sum_s (d_{1,s}^\dagger d_{2,s} + d_{2,s}^\dagger d_{1,s}). \quad (4.6)$$

Na expressão acima temos que $d_{i,s}^\dagger (d_{i,s})$ cria (aniquila) um elétron no ponto quântico correspondente com energia $\varepsilon_{i,s}$ e spin s e $c_{\ell \mathbf{k}, s}^\dagger (c_{\ell \mathbf{k}, s})$ cria (aniquila) um elétron no reservatório metálico com momento \mathbf{k} e energia $\varepsilon_{\ell \mathbf{k}, s}$. V_1 e V_2 denotam o acoplamento com os cadeias supercondutoras, V_3 e V_4 são os acoplamentos do PQ com seu respectivo reservatório metálico, e por último, V_{12} representa o acoplamento entre os PQs.

O Hamiltoniano das cadeias supercondutoras H_{SC} deve ser analisado cuidadosamente. O supercondutor 1 (SC1) representa apenas uma cadeia supercondutora usual (BCS). Já o supercondutor 2 (SC2) apresenta também interação spin-órbita e um campo magnético aplicado perpendicularmente ao mesmo, para que o mesmo possa ser mapeado em uma cadeia de Kitaev que apresenta estados topologicamente protegidos, capazes de suportar modos de Majorana.

Explicitamente temos que $H_{\text{SC}} = H_1 + H_2$, com

$$H_1 = \sum_{\substack{j=1 \\ s}}^{\infty} \left(t_1 c_{j+1,s}^\dagger c_{j,s} + \Delta_1 c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger + H.c. \right), \quad (4.7)$$

e

$$\begin{aligned} H_2 = & \sum_{j=1,s}^{\infty} \left[\frac{1}{2} (-\mu + V_Z \sigma_{ss}^z) c_{j,s}^\dagger c_{j,s} - t_2 c_{j+1,s}^\dagger c_{j,s} \right. \\ & \left. + \Delta_2 c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger + H.c. \right] + i\alpha \sum_{\substack{j=1 \\ ss'}}^{\infty} (c_{j+1,s}^\dagger \sigma_{ss'}^y c_{j,s'} + H.c.). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Note que H_2 é igual a H_1 se fizermos $\Delta_2 = \Delta_1$, $t_2 = t_1$, $\mu = V_Z = \alpha = 0$, por isso vamos considerar no cálculo iterativo H_2 e basta considerarmos as escolhas acima para representarmos H_1 . Podemos escrever de uma forma mais explícita o termo H_2 sob a forma

$$\begin{aligned} H_2 = & \sum_{j=1,s}^{\infty} \left[\frac{1}{2} (-\mu + V_Z \sigma_{ss}^z) c_{j,s}^\dagger c_{j,s} - t_2 c_{j+1,s}^\dagger c_{j,s} + \Delta_2 c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger + H.c. \right] \\ & + \alpha \sum_{j=1}^{\infty} (c_{j+1,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow} + c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j+1,\uparrow} - c_{j+1,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow} - c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j+1,\downarrow}). \end{aligned} \quad (4.9)$$

É interessante notar no último termo da expressão acima que ao tunelar de um sítio para outro, o elétron precessa seu spin, isso é uma consequência do acoplamento spin-órbita do tipo Rashba.

4.2 Cálculo iterativo da função de Green para a cadeia supercondutora

Vamos agora calcular a função de Green do fio supercondutor descrito por H_2 . Para isso vamos usar um método iterativo, de tal forma que consigamos descrever a função de Green da ponta do cadeia ($j = 1$) renormalizada pela interação com o restante da cadeia. Definindo a função de Green retardada:

$$G_{js,js'}(\varepsilon) \equiv \langle\langle c_{js}; c_{js'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon. \quad (4.10)$$

Que obedece à seguinte equação de movimento

$$\varepsilon \langle\langle c_{js}; c_{js'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon = \delta_{ss'} + \langle\langle [c_{js}, H]_-; c_{js'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon. \quad (4.11)$$

A fim de demonstrar o método recursivo adotado, começemos pelo cálculo da função de Green do sítio $j = N - 1$. Sua equação de movimento é dada por

$$\varepsilon \langle\langle c_{N-1,s}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon = \delta_{ss'} + \langle\langle [c_{N-1,s}, H]_-; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon \quad (4.12)$$

Substituindo na equação de movimento o Hamiltoniano (4.9) e usando novamente a relação

$$[A, BC]_- = [A, B]_+C - B[A, C]_+, \quad (4.13)$$

obtemos

$$\begin{aligned} [c_{N-1,\uparrow}, H] &= \varepsilon_{N-1,\uparrow} c_{N-1,\uparrow} - t c_{N,\uparrow} + \Delta c_{N-1,\downarrow}^\dagger - \alpha c_{N,\downarrow}, \\ [c_{N-1,\downarrow}, H] &= \varepsilon_{N-1,\downarrow} c_{N-1,\downarrow} - t c_{N,\downarrow} - \Delta c_{N-1,\uparrow}^\dagger + \alpha c_{N,\uparrow}, \end{aligned}$$

onde $\varepsilon_{N-1,\uparrow} = -\mu + V_z$ e $\varepsilon_{N-1,\downarrow} = -\mu - V_z$.

Com isso ficamos com as seguintes equações de movimento:

$$\begin{aligned} \varepsilon \langle\langle c_{N-1,\uparrow}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon &= \delta_{\uparrow,s'} + \varepsilon_{N-1,\uparrow} \langle\langle c_{N-1,\uparrow}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon - t \langle\langle c_{N,\uparrow}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon \\ &\quad + \Delta \langle\langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon + \alpha \langle\langle c_{N,\downarrow}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon, \end{aligned} \quad (4.14)$$

e

$$\begin{aligned} \varepsilon \langle\langle c_{N-1,\downarrow}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon &= \delta_{\downarrow,s'} + \varepsilon_{N-1,\downarrow} \langle\langle c_{N-1,\downarrow}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon - t \langle\langle c_{N,\downarrow}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon \\ &\quad - \Delta \langle\langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon - \alpha \langle\langle c_{N,\uparrow}; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon. \end{aligned} \quad (4.15)$$

A equação de movimento das funções de Green de Gor'kov serão dadas por:

$$\varepsilon \langle\langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon = \delta_{\uparrow,s'} + \langle\langle [c_{N-1,\uparrow}^\dagger, H]; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon \quad (4.16)$$

$$\varepsilon \langle\langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon = \delta_{\downarrow,s'} + \langle\langle [c_{N-1,\downarrow}^\dagger, H]; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon \quad (4.17)$$

Usando novamente o Hamiltoniano (4.9) e a relação (4.13) temos

$$[c_{N-1,\uparrow}^\dagger, H] = -\varepsilon_{N-1,\uparrow} c_{N-1,\uparrow}^\dagger + tc_{N\uparrow}^\dagger - \Delta c_{N-1,\downarrow} + \alpha c_{N,\downarrow}^\dagger,$$

e

$$[c_{N-1,\downarrow}^\dagger, H] = -\varepsilon_{N-1,\downarrow} c_{N-1,\downarrow}^\dagger + tc_{N\downarrow}^\dagger + \Delta c_{N-1,\uparrow} - \alpha c_{N,\uparrow}^\dagger.$$

Obtemos as equações de movimento

$$\begin{aligned} \varepsilon \langle \langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon &= -\varepsilon_{N-1,\uparrow} \langle \langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon - \Delta \langle \langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon, \\ &\quad + t \langle \langle c_{N,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon + \alpha \langle \langle c_{N\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon \langle \langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon &= -\varepsilon_{N-1,\downarrow} \langle \langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon + \Delta \langle \langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \\ &\quad + t \langle \langle c_{N,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon - \alpha \langle \langle c_{N\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon. \end{aligned} \quad (4.19)$$

As equações acima compõem o conjunto de equações de movimento:

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{N-1,\uparrow}) \langle \langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon &= \delta_{s'\uparrow} + \Delta \langle \langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon - t \langle \langle c_{N\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \\ &\quad + \alpha \langle \langle c_{N\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon - \varepsilon_{N-1,\downarrow}) \langle \langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon &= \delta_{s'\downarrow} - \Delta \langle \langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon - t \langle \langle c_{N\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \\ &\quad - \alpha \langle \langle c_{N\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon + \varepsilon_{N-1,\uparrow}) \langle \langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon &= -\Delta \langle \langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon + t \langle \langle c_{N\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \\ &\quad + \alpha \langle \langle c_{N\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} (\varepsilon + \varepsilon_{N-1,\downarrow}) \langle \langle c_{N-1,\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon &= \Delta \langle \langle c_{N-1,\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon + t \langle \langle c_{N\downarrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \\ &\quad - \alpha \langle \langle c_{N\uparrow}^\dagger; c_{N-1,s'}^\dagger \rangle \rangle_\varepsilon \end{aligned}$$

O conjunto de equações acima pode ser descrito de uma forma mais conveniente se definirmos o spinor de Nambu $\Psi_i = \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} & c_{i\downarrow} & c_{i\uparrow}^\dagger & c_{i\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}^T$. Com isso podemos definir a função de Green no espaço

de Nambu

$$\mathbf{G}_{i,j}(\varepsilon) \equiv \langle\langle \Psi_i \otimes \Psi_j^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon, \quad (4.20)$$

de forma explicita temos

$$\mathbf{G}_{i,j}(\varepsilon) = \left\langle \left(\begin{array}{c} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \\ c_{i\uparrow}^\dagger \\ c_{i\downarrow}^\dagger \end{array} \right) \otimes \left(\begin{array}{cccc} c_{j\uparrow}^\dagger & c_{j\downarrow}^\dagger & c_{j\uparrow} & c_{j\downarrow} \end{array} \right) \right\rangle,$$

ao realizarmos o produto tensorial obtemos

$$\mathbf{G}_{i,j}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} \langle\langle c_{i\uparrow}; c_{j\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\uparrow}; c_{j\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\uparrow}; c_{j\uparrow} \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\uparrow}; c_{j\downarrow} \rangle\rangle_\varepsilon \\ \langle\langle c_{i\uparrow}; c_{j\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\downarrow}; c_{j\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\downarrow}; c_{j\uparrow} \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\downarrow}; c_{j\downarrow} \rangle\rangle_\varepsilon \\ \langle\langle c_{i\uparrow}^\dagger; c_{j\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\uparrow}^\dagger; c_{j\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\uparrow}^\dagger; c_{j\uparrow} \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\uparrow}^\dagger; c_{j\downarrow} \rangle\rangle_\varepsilon \\ \langle\langle c_{i\downarrow}^\dagger; c_{j\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\downarrow}^\dagger; c_{j\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\downarrow}^\dagger; c_{j\uparrow} \rangle\rangle_\varepsilon & \langle\langle c_{i\downarrow}^\dagger; c_{j\downarrow} \rangle\rangle_\varepsilon \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

Assim, as equações de movimento podem ser escritas na forma matricial

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon) = & \mathbf{g}_{N-1,N-1}(\varepsilon) + \mathbf{g}_{N-1,N-1}(\varepsilon) \Delta \mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon) \\ & + \mathbf{g}_{N-1,N-1}(\varepsilon) \mathbf{t} \mathbf{G}_{N,N-1}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (4.22)$$

com

$$\mathbf{g}_{j,j}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_\uparrow} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_\uparrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{t} = \begin{pmatrix} -t & -\alpha & 0 & 0 \\ -\alpha & -t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t & \alpha \\ 0 & 0 & \alpha & t \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

e

$$\Delta = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta & 0 & 0 \\ \Delta & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Manipulando a Eq. (4.22) podemos escrevê-la sob a

$$(\mathbf{1} - \mathbf{g}_{N-1,N-1}(\varepsilon)\Delta)\mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon) = \mathbf{g}_{N-1,N-1}(\varepsilon) + \mathbf{g}_{N-1,N-1}(\varepsilon)\mathbf{t}\mathbf{G}_{N,N-1}(\varepsilon).$$

Definindo a função de Green

$$\tilde{\mathbf{g}}_{j,j}(\varepsilon) = (\mathbf{1} - \mathbf{g}_{j,j}(\varepsilon)\Delta)^{-1}\mathbf{g}_{j,j}(\varepsilon) \quad ,$$

que representa a função de Green livre local renormalizada localmente devido a presença da supercondutividade. Podemos então escrever

$$\mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon) = \tilde{\mathbf{g}}_{N-1,N-1}(\varepsilon) + \tilde{\mathbf{g}}_{N-1,N-1}(\varepsilon)\mathbf{t}\mathbf{G}_{N,N-1}(\varepsilon). \quad (4.25)$$

Note que esta equação é uma equação de Dyson na forma matricial. Perceba que, uma vez que conhecemos a função de Green do sítio N , podemos então calcular a do sítio $N-1$, e assim por diante de forma iterativa, de tal forma que podemos calcular a função de Green do primeiro sítio renormalizada devido a presença de todos os outros. Na maioria dos casos a função de Green do sítio N é dada pela função de Green de um único sítio desacoplado do resto da cadeia, sendo a condição inicial do problema.

Podemos ainda calcular $\mathbf{G}_{N,N-1}(\varepsilon)$ através de sua equação de movimento que é simplesmente dada por

$$\mathbf{G}_{N,N-1}(\varepsilon) = \tilde{\mathbf{g}}_{N,N}(\varepsilon)\mathbf{t}^\dagger\mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon). \quad (4.26)$$

Substituindo o resultado acima na equação de Dyson para $\mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon)$ obtemos:

$$\mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon) = \left[\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{g}}_{N-1,N-1}(\varepsilon)\mathbf{t}\tilde{\mathbf{g}}_{N,N}(\varepsilon)\mathbf{t}^\dagger \right]^{-1} \tilde{\mathbf{g}}_{N-1,N-1}(\varepsilon). \quad (4.27)$$

Observe que desta forma expressamos a função de Green apenas em termos da função de Green local $\tilde{\mathbf{g}}_{N-1,N-1}(\varepsilon)$ renormalizada devido a presença do sítio N do supercondutor.

Podemos já perceber que para uma cadeia semi-infinita a função de Green que leva em conta a ponta da cadeia ($j = 1$), representada por $\mathbf{G}_{N,N}(\varepsilon)$ é igual a $\mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon)$, ou seja

$$\mathbf{G}_{N,N}(\varepsilon) = \mathbf{G}_{N-1,N-1}(\varepsilon), \quad N \rightarrow \infty. \quad (4.28)$$

Levando isso adiante, obteríamos uma equação matricial de segundo grau, cuja solução forneceria de forma analítica exata a função de Green para a extremidade do fio. Entretanto, a solução de uma

equação matricial de segundo grau só é possível em condições muito especiais, não contempladas no presente caso. Assim, precisamos resolver a mesma numericamente. Como todos os termos do Hamiltoniano são quadráticos, teremos que a solução será numericamente exata.

A solução numérica consiste em calcular as funções de Green iterativamente, começando do último sítio da cadeia supercondutora e então calculando a função de Green do sítio anterior renormalizada pelo sítio posterior. De forma que, consigamos calcular a função de Green da ponta da cadeia renormalizada pela presença de todos os outros sítios. Para a convergência de nossos cálculos usamos uma cadeia de 20 mil sítios. Detalhes sobre o método iterativo aqui usados são discutidos na referência (50).

4.3 Funções de Green dos Pontos Quânticos

Uma vez que conhecemos as funções de Green das cadeias supercondutoras, podemos calcular as funções de Green dos pontos quânticos acoplados as mesmas. Para isso vamos definir os spinors de Nambu para os pontos quânticos denotada por $\Psi_{dl} = \begin{pmatrix} d_{l\uparrow} & d_{l\downarrow} & d_{l\uparrow}^\dagger & d_{l\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}^T$, com $l = 1, 2$. Vamos primeiramente considerar os pontos quânticos desacoplados entre si, mas acoplados a seus reservatórios metálicos e cadeias supercondutoras. Usando as Eqs. (4.2), (4.4) e (4.5) podemos escrever as equações de movimento

$$\mathbf{G}_{dl,dl}(\varepsilon) = \mathbf{g}_{dl}(\varepsilon) + \mathbf{g}_{dl}(\varepsilon) \mathbf{V}_l \mathbf{G}_{1l,1l}(\varepsilon), \quad (4.29)$$

$$\mathbf{G}_{1l,1l}(\varepsilon) = \tilde{\mathbf{g}}_{1l,1l}(\varepsilon) \mathbf{V}_l^\dagger \mathbf{G}_{dl}(\varepsilon), \quad (4.30)$$

onde $\mathbf{G}_{1l,1l}(\varepsilon)$ é a função de Green do primeiro sítio da cadeia supercondutora a qual o ponto quântico se acopla, ela é calculada via (4.28) e $\mathbf{G}_{dl,dl}(\varepsilon) \equiv \langle\langle \Psi_{dl} \otimes \Psi_{dl}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon$ a função de Green do ponto quântico no espaço de Nambu. Temos ainda que

$$\mathbf{g}_{dl}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{l\uparrow} + i\Gamma} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{l\downarrow} + i\Gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_{l\uparrow} + i\Gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_{l\downarrow} + i\Gamma} \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

e

$$\mathbf{V}_l = \begin{pmatrix} V_l & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_l & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -V_l & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -V_l \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

onde $\Gamma = \pi V^2 / 2D$, onde usamos $V_3 = V_4 = V$, com D sendo a metade da largura da banda de condução. Este é o alargamento do nível do PQ devido ao acoplamento com o reservatório metálico (limite de banda larga). Resolvendo as equações de movimento acopladas temos

$$\mathbf{G}_{dl,dl}(\varepsilon) = \left[\mathbf{1} - \mathbf{g}_{dl}(\varepsilon) \mathbf{V}_l \tilde{\mathbf{g}}_{N,N}(\varepsilon) \mathbf{V}_l^\dagger \right]^{-1} \mathbf{g}_{dl}(\varepsilon) \equiv \tilde{\mathbf{g}}_{dl}(\varepsilon). \quad (4.33)$$

Perceba que o ponto quântico conectado a sua respectiva cadeia supercondutora foi reduzido a um problema de sítio único com a função de Green efetiva $\tilde{\mathbf{g}}_{dl}(\varepsilon)$.

Podemos, finalmente, acoplar os dois pontos quânticos entre si, que agora são representados por dois sítios efetivos. Usando a Eq. (4.6) se pode notar que a equação de movimento de ambos é dada por

$$\mathbf{G}_{d1,d1}(\varepsilon) = \tilde{\mathbf{g}}_{d1}(\varepsilon) + \tilde{\mathbf{g}}_{d1} \mathbf{V}_{12} \mathbf{G}_{d2,d1}(\varepsilon), \quad (4.34a)$$

$$\mathbf{G}_{d2,d1}(\varepsilon) = \tilde{\mathbf{g}}_{d2}(\varepsilon) \mathbf{V}_{12}^\dagger \mathbf{G}_{d1}(\varepsilon) \quad (4.34b)$$

e

$$\mathbf{G}_{d2,d2}(\varepsilon) = \tilde{\mathbf{g}}_{d2}(\varepsilon) + \tilde{\mathbf{g}}_{d2} \mathbf{V}_{12}^\dagger \mathbf{G}_{d1,d2}(\varepsilon), \quad (4.35a)$$

$$\mathbf{G}_{d1,d2}(\varepsilon) = \tilde{\mathbf{g}}_{d1}(\varepsilon) \mathbf{V}_{12} \mathbf{G}_{d2}(\varepsilon), \quad (4.35b)$$

com $\mathbf{G}_{d2,d1}(\varepsilon) \equiv \langle\langle \Psi_{d2} \otimes \Psi_{d1}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon$, $\mathbf{G}_{d1,d2}(\varepsilon) \equiv \langle\langle \Psi_{d1} \otimes \Psi_{d2}^\dagger \rangle\rangle_\varepsilon$ e

$$\mathbf{V}_{12} = \begin{pmatrix} V_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -V_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -V_{12} \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Isso nos permite então escrever a função de Green para cada ponto quântico

$$\mathbf{G}_{d1,d1}(\varepsilon) = \left[\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{g}}_{d1}(\varepsilon) \mathbf{V}_{12} \tilde{\mathbf{g}}_{d2}(\varepsilon) \mathbf{V}_{12}^\dagger \right]^{-1} \tilde{\mathbf{g}}_{d1}(\varepsilon), \quad (4.37)$$

$$\mathbf{G}_{d2,d2}(\varepsilon) = \left[\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{g}}_{d2}(\varepsilon) \mathbf{V}_{12}^\dagger \tilde{\mathbf{g}}_{d1}(\varepsilon) \mathbf{V}_{12} \right]^{-1} \tilde{\mathbf{g}}_{d2}(\varepsilon). \quad (4.38)$$

Observe que todas as informações não locais estão contidas nas funções de Green efetivas, de tal forma que as equações acima possuem toda a informação dos reservatórios e das cadeias superconductoras, portanto, para conhecermos as propriedades espectrais locais do sistema de pontos quânticos duplos em sua totalidade basta usarmos estas expressões, uma vez determinada as funções de Green efetivas de cada um.

4.4 Densidade de estados

Uma vez que conhecemos as funções de Green dos pontos quânticos, podemos calcular grandezas físicas relevantes para nossos propósitos, como a densidade de estados local (LDOS), que como já vimos é dada em termos da função de Green na forma

$$\rho_i^s(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [\langle\langle d_{i,s}; d_{i,s}^\dagger \rangle\rangle], \quad (i = 1, 2). \quad (4.39)$$

No limite em que o acoplamento entre os PQ's é muito maior do que o alargamento dos níveis, $\Gamma \ll V_{12}$ o sistema encontra-se em um regime que chamaremos de molecular, uma vez que neste limite os níveis individuais dos PQ's se hibridizam como em uma molécula. O regime $\Gamma \gg V_{12}$, por sua vez, será chamado de regime atômico. O regime molecular é melhor entendido se definirmos os operadores

$$d_{\pm,s} = \frac{1}{\sqrt{2}}(d_{1,s} \pm d_{2,s}), \quad (4.40)$$

que agora nos dá a densidade de estados molecular local (MLDOS)

$$\rho_\pm^s(\varepsilon) = \frac{\rho_1^s(\varepsilon) + \rho_2^s(\varepsilon)}{2} \mp \frac{1}{2\pi} \text{Im} [\langle\langle d_{1,s}; d_{2,s}^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle d_{2,s}; d_{1,s}^\dagger \rangle\rangle].$$

Perceba que no limite $V_{12} \rightarrow 0$ temos que a MLDOS se torna apenas a média aritmética da LDOS dos PQ's.

Do ponto de vista teórico, é interessante também definirmos a chamada função de Green de Majorana

$$M_{\alpha i, \alpha i}^s(\varepsilon) \equiv \langle\langle \gamma_{\alpha i}^s; \gamma_{\alpha i}^s \rangle\rangle \quad (\text{com } \alpha = A, B), \quad (4.41)$$

onde os operadores de Majorana γ_α são dados por

$$\gamma_{Ai}^s = \frac{1}{2}(f_{i,s} + f_{i,s}^\dagger), \quad \gamma_{Bi}^s = -\frac{i}{2}(f_{i,s} - f_{i,s}^\dagger), \quad (4.42)$$

onde $f_{i,s}$ é um operador fermiônico regular genérico, como por exemplo $d_{i,s}$. Note ainda que

$$\gamma_{\alpha i}^s = (\gamma_{\alpha i}^s)^\dagger, \quad \{\gamma_{\alpha i}^s, \gamma_{\alpha' i}^{s'}\} = 2\delta_{i,j}\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{ss'}, \quad (4.43)$$

que são as propriedades fundamentais dos férmiões de Majorana. É interessante expressarmos a função de Green de Majorana em termos de operadores fermiônicos regulares usando as relações acima, com isso obtemos

$$M_{Ai,Ai}^s(\varepsilon) = \frac{1}{4} [\langle\langle f_{i,s}; f_{i,s}^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle f_{i,s}^\dagger; f_{i,s} \rangle\rangle + \langle\langle f_{i,s}; f_{i,s} \rangle\rangle + \langle\langle f_{i,s}^\dagger; f_{i,s}^\dagger \rangle\rangle], \quad (4.44)$$

$$M_{Bi,Bi}^s(\varepsilon) = \frac{1}{4} [\langle\langle f_{i,s}; f_{i,s}^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle f_{i,s}^\dagger; f_{i,s} \rangle\rangle - \langle\langle f_{i,s}; f_{i,s} \rangle\rangle - \langle\langle f_{i,s}^\dagger; f_{i,s}^\dagger \rangle\rangle]. \quad (4.45)$$

O resultado acima nos mostra dois elementos fundamentais para a existência de modos de Majorana no contexto da matéria condensada: supercondutividade e emparelhamento supercondutor do tipo p . Isso pode ser observado no surgimento de funções de Green anômalas (funções de Green de Gor'kov), que são diferentes de zero em sistemas supercondutores, cujo sinal é exatamente o que difere as expressões $M_{Ai,Ai}^s$ e $M_{Bi,Bi}^s$. Note ainda que, as funções de Green de Gor'kov aparecem para componentes com mesma projeção de spin, diferente do que no caso da supercondutividade usual do tipo s , mas caracterizando supercondutividade do tipo p , que como já dito extensivamente, pode suportar modos de Majorana.

Devemos enfatizar que não faz sentido falarmos de número de ocupação para $\gamma_{\alpha i}$, mas apenas para férmiões regulares formados pela superposição de modos de Majorana. Por isso, não podemos definir uma densidade de estados de Majorana, mas podemos definir sua função espectral para um dado spin s da forma

$$\mathcal{D}_{\alpha i}^s(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[M_{\alpha i, \alpha i}^s] \quad (4.46)$$

que como veremos adiante, nos auxiliará na análise dos resultados.

4.5 Resultados

Para nossos cálculos numéricos usamos $t_1 = t_2 = t = 10$ meV, $\Gamma = 5 \times 10^{-5}t$ e também escolhemos $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$, também escolhemos os valores $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.025t$ e $\alpha = 0.07t$. Os valores acima foram escolhidos devido a valores realísticos previamente estudados experimentalmente (44, 51).

4.5.1 Configuração de pontos quânticos desacoplados ($V_{12} = 0$)

Para analisar em detalhes os fenômenos físicos possíveis do sistema proposto vamos observar as propriedades espetrais na configuração em que os pontos quânticos estão desacoplados, e quando eles se acoplam. Ambas configurações apresentam características interessantes. Na configuração de pontos quânticos desacoplados iremos abordar em detalhes a transição de fase topológica, variando parâmetros tais como potencial químico e energia de Zeeman. Já na configuração de pontos quânticos duplos estaremos interessados em analisar a coexistência de estados ligados de Andreev e Majorana e como se relacionam.

Primeiramente, vamos estudar a configuração de apenas um único ponto quântico acoplado a um supercondutor topológico, para isso vamos fazer $V_{12} = 0$ e calcular as propriedades espetrais do PQ2 que está acoplado ao supercondutor que apresenta fase topologicamente não trivial. Nesta configuração vamos variar o potencial químico da cadeia supercondutora μ e a energia de Zeeman V_Z que é proporcional ao campo magnético aplicado na cadeia, analisando então as consequências na densidade de estados local do PQ2, os resultados são mostrados na figura 21.

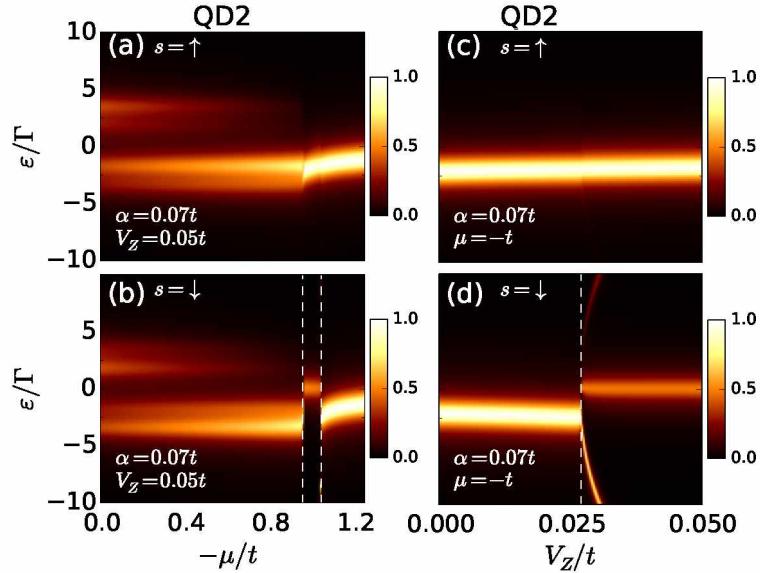


Figura 21: Densidade de estados local (LDOS) do PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para ambas componentes de spin, variando a energia, o potencial μ (esquerda) e energia de Zeeman V_Z (direita). Na esquerda mantemos $V_Z = 0.05t$ fixo e variamos μ , e no lado direito variamos a energia de Zeeman V_Z mantendo fixo o potencial químico em $\mu = -1.01t$. As linhas tracejadas denotam a transição de fase topológica corroborando com o critério $V_Z > \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\mu}^2}$, com $\tilde{\mu} = \mu + t$.

Vamos primeiro analisar o caso em que variamos μ , mantendo V_Z fixo (painéis do lado esquerdo da figura 21). Perceba que, para $\mu = 0$ observamos dois picos correspondentes a estados ligados

de Andreev resultante do efeito de proximidade ao supercondutor SC2 [figura 21(a)], os mesmos sofrem um pequeno desdobramento, consequência do campo magnético aplicado. À medida em que diminuímos μ de $\mu = 0$ até $\mu = -t$, os picos característicos de Andreev desaparecem. Isso decorre pelo fato de que a medida que variamos o potencial químico aumentamos a assimetria entre partículas e buracos, isso dificulta o processo de reflexão de Andreev, que é formada por elétrons e buracos, como já discutido anteriormente.

Contudo, o regime mais interessante encontra-se na região delimitada pelas linhas tracejadas da figuras 21(b) e 21(d). Esse regime caracteriza a transição de fase topológica do regime trivial para o não trivial, que, como dissemos anteriormente, corresponde à abertura do gap em $k = 0$ definida por $V_Z > \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\mu}^2}$, com $\tilde{\mu} = \mu + t$, ou $\mu \in [-t - (V_Z - \Delta)^{1/2}, -t + (V_Z - \Delta)^{1/2}]$, para os parâmetros escolhidos temos então que o critério acima é respeitado para $\mu \in [-1.043t, -0.957t]$ que corresponde exatamente à região tracejada no painel acima, para os cálculos acima também escolhemos $V_2 = 0.008t$.

Na transição de fase topológica ocorre a formação de modos de Majorana nas pontas do fio supercondutor, que como já dissemos, são caracterizados por energia zero e por serem "metade" de um férnion regular. Ambas assinaturas presentes na LDOS do PQ2 na região tracejada, uma vez que um modo de Majorana "vaza" para o PQ (49). Esse fenômeno ocorre mesmo quando o PQ é interagente, veja a Ref.(52). Perceba também que temos a presença de modos de Majorana apenas para a componente de spin down, uma vez que, os modos de Majorana podem aparecer apenas mediados por correlações de mesma projeção de spin, no presente caso, spin down. Se invertermos o sinal de V_Z será a componente de spin up e que será acoplada com o modo de Majorana.

Vamos agora analisar o caso onde variamos V_Z e mantendo o potencial químico fixo (painéis do lado direito da figura 21). Acima do valor crítico $V_Z^c = \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\mu}^2}$, note a presença de um modo de Majorana em energia zero, figura 21(d), note também próximo a linha tracejada dois picos que rapidamente se desdobram para energias distantes de zero. Isso é um efeito da fracionalização do férnion regular em dois modos de Majorana, um deles presente na ponta do fio acoplada ao PQ e o outro na outra ponta, que no caso em questão se encontram separados por uma distância infinita, uma vez que consideramos um fio semi-infinito. A interação entre os modos de Majorana é proporcional a $e^{-\xi L}$ (9), onde ξ é o comprimento de coerência e L o comprimento do fio. Assim, para um fio semi-infinito temos essencialmente que os modos de Majorana não interagem entre si.

A fim de conectar nossos cálculos com grandezas experimentais, é interessante analisar a densidade de estados local em energia zero, isso porque a condutância diferencial em experimentos, por exemplo de STM é proporcional a densidade de estados nesse ponto¹. Logo, na figura 22 é mostrado a

¹veja o Apêndice C.2

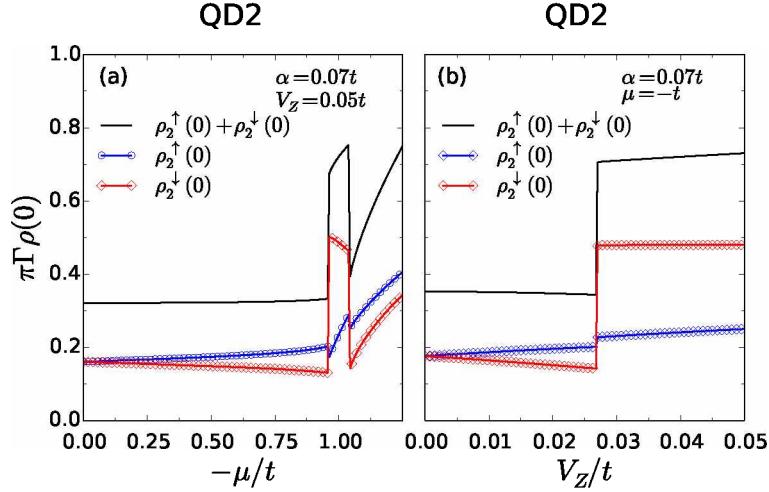


Figura 22: Densidade de estados local(LDOS) em energia zero do PQ2 para ambas componentes de spin, variando o potencial μ (esquerda) e energia de Zeeman V_Z (direita) usando os mesmos parâmetros da figura 21.

LDOS em energia zero para o sistema na configuração acima abordada. É interessante notar que, pelo menos na configuração de único PQ, estados ligados de Andreev e Majorana, no presente contexto, não coexistem.

A densidade de estados em energia zero é também interessante por outro motivo. Quando analisamos com mais cuidado a mesma podemos perceber a acentuada descontinuidade da mesma no ponto de transição de fase topológica. Podemos então fazer uma pequena alusão com as transições de fase usuais (Landau) de primeira ordem. Contudo, perceba que, como já dissemos, a transição de fase topológica não está associada com alguma quebra espontânea de simetria, mas sim com o invariante topológico da fase em questão. Dito isso, podemos afirmar que tais descontinuidades podem indicar, em certas condições, transições de fase topológicas em experimentos de STM, fazendo com que abordagens como a nossa sejam relevantes para futuras análises experimentais.

4.5.2 Configuração de dois pontos quânticos acoplados ($V_{12} \neq 0$)

Vamos agora analisar o sistema em sua totalidade, considerando agora o acoplamento entre os pontos quânticos. O acoplamento do PQ1 com o supercondutor SC1 dá origem a estados ligados de Andreev como já discutido anteriormente. Já o acoplamento do PQ2 ao supercondutor SC2 irá abrigar um modo de Majorana no regime topológico de SC2, como estudado extensivamente na seção anterior.

Mostramos que na configuração de um único ponto quântico, a coexistência de estados ligados de Majorana e Andreev não é possível. Porém, perceba que na configuração de ponto quântico duplo podemos conectar os dois pontos que apresentam separadamente estado ligado de Majorana ou Andreev e ver como esses estados ligados interagem. Para isso, vamos analisar a LDOS de cada PQ como função do acoplamento entre eles V_{12} . Com o intuito de analisar tanto o regime trivial quanto

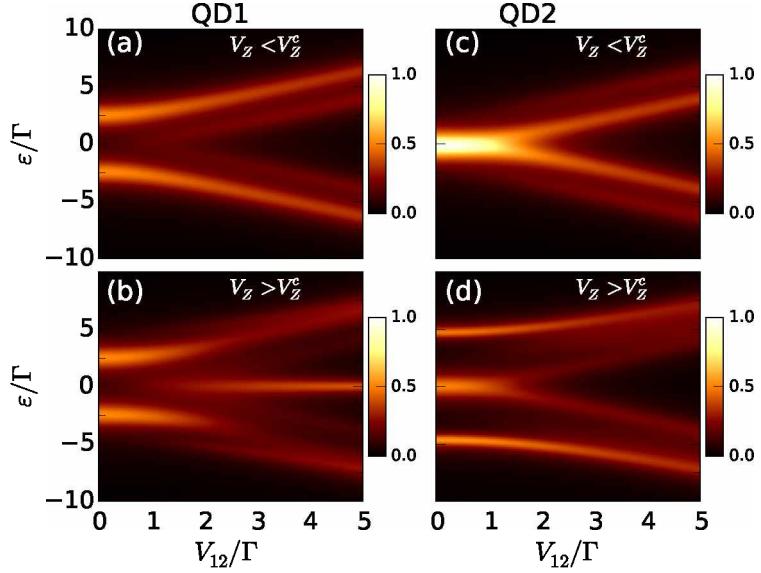


Figura 23: Densidade de estados local(LDOS) do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin down, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . São mostrados os resultados para a fase trivial (painéis superiores) e para a fase topológica (painéis inferiores), perceba na fase topológica a passagem do modo de Majorana do PQ2 para o PQ1 para grandes valores de V_{12} .

o topológico do SC2 vamos usar diferentes valores de energia de Zeeman. Vimos que a transição de fase topológica ocorre para $V_Z^c = \sqrt{\Delta^2 + \tilde{\mu}^2}$, para os parâmetros usados temos que a energia de Zeeman crítica é $V_Z^c \approx 0.027t$. Logo, para os cálculos no regime trivial usaremos $V_Z = 0.02t < V_Z^c$ e para os cálculos do regime topológico usamos $V_Z = 0.05t > V_Z^c$. Usamos também para nossos cálculos $V_1 = 0.008t$ e $V_2 = 0.002t$. A escolhas de V_1 e V_2 simplesmente afeta a posição e a intensidade dos picos de Andreev, mas não interfere nos fenômenos físicos em questão. Os valores escolhidos foram apenas para uma melhor visualização.

O ponto quântico 1 sempre irá apresentar estados ligados de Andreev, uma vez que ele se encontra conectado ao supercondutor SC1 que possui apenas uma fase topologicamente trivial. Por outro lado, o PQ2 irá apresentar um único pico em energia zero, relacionado a um férnion regular, que pode ser fracionalizado em modos de Majorana dependendo da fase de SC2, como discutido anteriormente. Uma vez que os modos de Majorana se acoplam apenas a uma componente de spin, vamos discutir separadamente os casos para cada uma delas.

Para a componente de spin down, figura 23, observamos para a fase trivial (painéis superiores) os dois fenômenos citados acima, para o PQ1 observamos os estados ligados de Andreev, que por sua vez se desdobram a medida que o acoplamento entre os PQ's aumenta, o mesmo é observado para o pico em energia zero do PQ2, relacionado a um férnion regular. Contudo, na fase topológica (painéis inferiores) ocorrem fenômenos ainda mais interessantes. Perceba para pequenos valores de V_{12} a LDOS do PQ2 apresenta um pico em energia zero e com metade da altura de um férnion regular, denotando então o modo de Majorana, os outros picos que aparecem em energias não nulas correspondem ao outro modo de Majorana que se separa do modo em energia nula devido a fracionalização. No entanto, note que para valores maiores de V_{12} o modo de Majorana “vaza” do PQ2 para o PQ1, denotado pela presença de um pico em energia zero, agora na LDOS do PQ1. Isso mostra que para acoplamentos grandes o modo de Majorana se transfere de um ponto quântico para outro. É interessante notar também que existe uma região de coexistência entre o estado ligado de Andreev e de Majorana, que vai desaparecendo à medida que a interação entre os PQ's se torna muito maior que o alargamento dos níveis Γ , veja a figura 23(b).

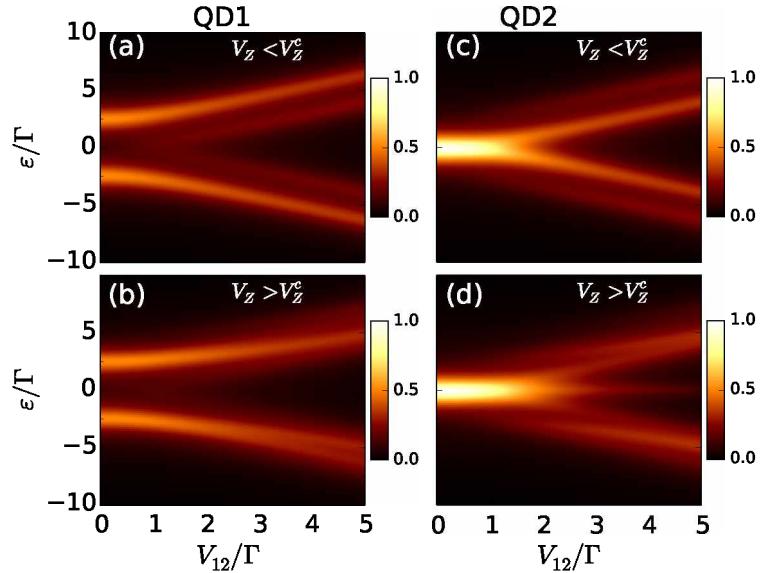


Figura 24: Densidade de estados local(LDOS) do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin up, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . São mostrados os resultados para a fase trivial (painéis superiores) e para a fase topológica (painéis inferiores), perceba que para grandes valores de V_{12} o PQ2 apresenta modos de Majorana mediados pelos estados ligados de Andreev.

Como já discutimos em detalhes na seção 2.1, a reflexão de Andreev consiste de uma reflexão de um elétron em um buraco, com momentos e spin opostos, logo, estados ligados de Andreev podem fornecer canais que conectam as diferentes componentes de spin do sistema. Como já dissemos, os modos de Majorana se conectam apenas com uma das componentes de spin. No entanto, devido a

mecanismos como a reflexão de Andreev, que estão presentes no PQ1, pode conectar os modos de Majorana indiretamente com outra componente de spin. Para observarmos esse fenômeno calculamos a LDOS também para a componente de spin up mostrada na figura 24. Perceba que na LDOS do PQ2, para grandes valores de V_{12} temos a presença de um pico fraco correspondente à projeção do Férnion de Majorana do PQ2, que é intermediada pelos estados ligados de Andreev. Observe também que o sinal do modo de Majorana é muito mais fraco do que para a componente de spin down que se conecta diretamente com o mesmo. Isso decorre pelo fato do acoplamento indireto com a componente up ser um processo de alta ordem.

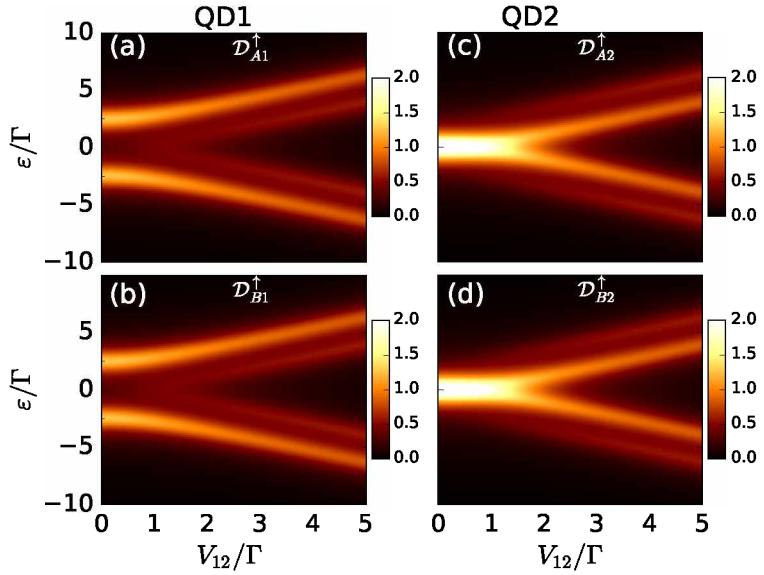


Figura 25: Função espectral de Majorana (MSF) no regime trivial do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin up, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} .

Para melhor entender a presença de modos de Majorana nesse sistema, vamos fazer uso da função espectral de Majorana (MSF), definida na Eq. 4.46. Como já dissemos anteriormente, a função espectral de Majorana não corresponde a um observável, mas nos ajuda a confirmar as propriedades singulares dos modos de Majorana. Primeiramente vamos considerar o regime trivial, onde não há a presença de modos de Majorana, a MSF para spin up e down é mostrada na figura 25 e 26, respectivamente. Note, nos painéis (c) e (d) das figuras 25 e 26, que em energia zero, para pequenos valores de V_{12} , temos que os dois modos de Majorana, aqui denotados por A e B se encontram energeticamente superpostos, mostrando que correspondem simplesmente a um férnion regular denotado na base de Majorana. A partir de $V_{12} \sim \Gamma$ vemos o desdobramento usual dos níveis. É interessante notar também que, na fase trivial, não temos essencialmente nenhuma diferença entre as diferentes componentes de spin da MSF (figuras 25 e 26).

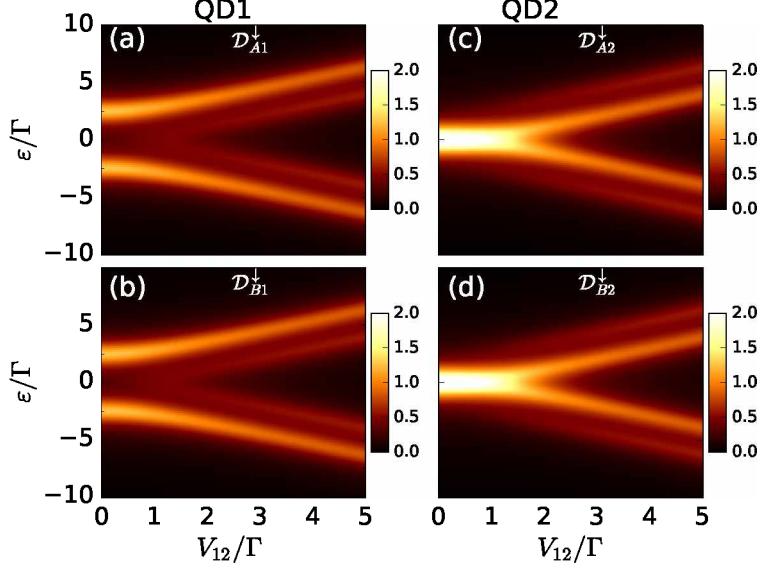


Figura 26: Função espectral de Majorana (MSF) no regime trivial do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin down, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} .

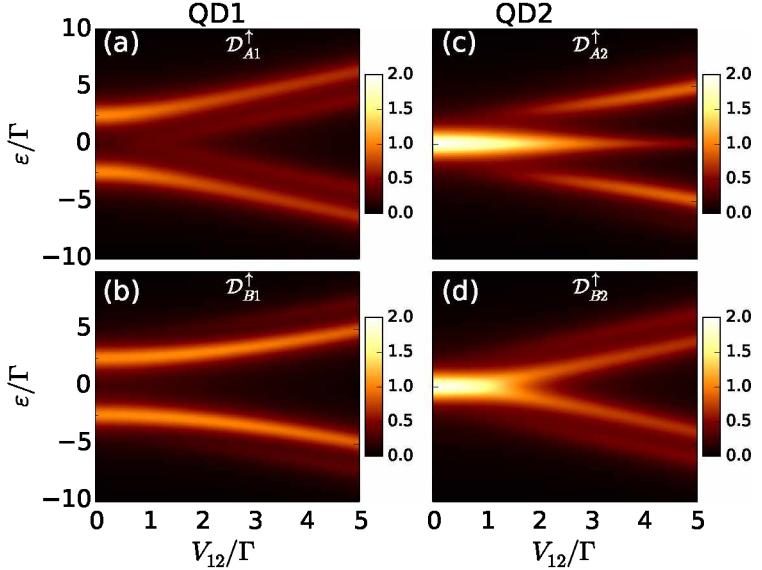


Figura 27: Função espectral de Majorana (MSF) no regime topológico do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin up, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . Note a presença de um modo de Majorana em energia zero no PQ2 apenas para valos grandes de V_{12} .

Por outro lado, no regime topológico temos a presença de modos de Majorana no sistema, a MSF pode corroborar com tal característica. Com esta finalidade calculamos a MSF dos PQ's no regime topológico para ambas componentes de spin, os resultados são mostrados nas figuras 27 e 28. Para a componente de spin down do PQ2, figura 28(c), podemos perceber claramente a presença de um único modo de Majorana em energia zero, enquanto o outro modo se encontra energeticamente separado, figura 28(d), confirmando a separação espacial dos modos de Majorana. Como já observado

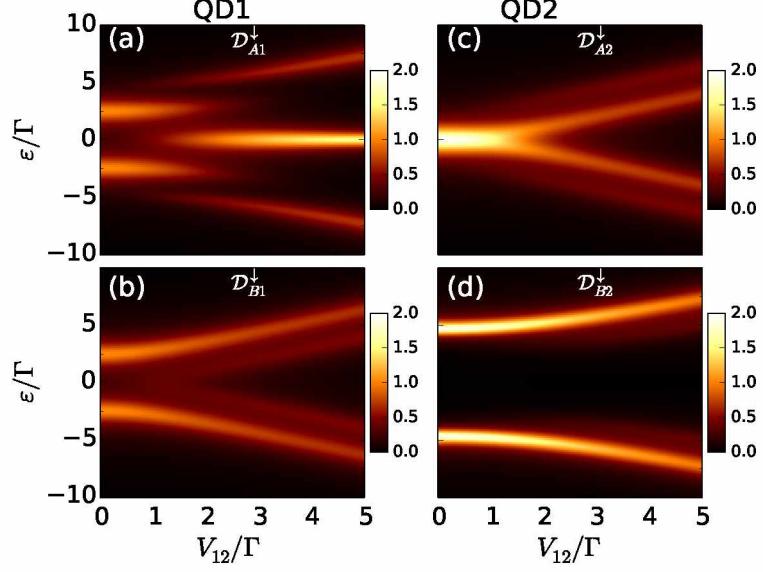


Figura 28: Função espectral de Majorana (MSF) no regime topológico do PQ1 e PQ2 em unidades de $1/\pi\Gamma$ para componentes de spin down, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . Perceba a separação energética entre os modos de Majorana A e B em PQ2.

nos resultados anteriores, para grandes valores de V_{12} o modo de Majorana se transfere de um ponto quântico para outro. Para a componente de spin up, figura 27, observamos, no painel (c), a presença de um modo de Majorana em energia zero apenas para valores muito altos de V_{12} provindo da conexão entre as diferentes componentes de spin devido aos estados ligados de Andreev.

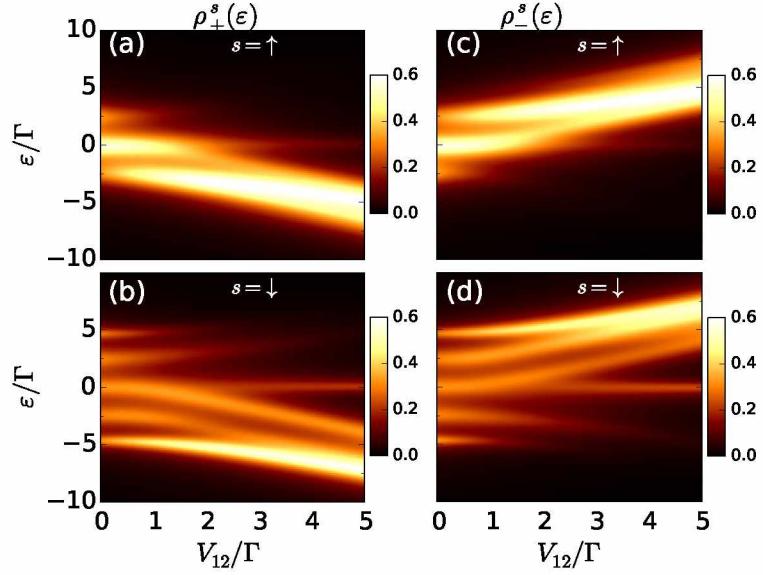


Figura 29: Densidade de estados local molecular (MLDOS) no regime topológico em unidades de $1/\pi\Gamma$ para ambas componentes de spin, em função da energia e acoplamento entre os PQ's V_{12} . Perceba que neste caso não temos PQ1 e PQ2, mas os orbitais moleculares \pm .

Dos resultados acima percebemos que ocorre uma mudança de comportamento quando $V_{12} \sim \Gamma$. Isso ocorre porque, neste caso, passamos de um regime “atômico” para um regime “molecular”. Como já definimos anteriormente temos que o regime atômico é denotado $V_{12} \ll \Gamma$ e o regime molecular para $V_{12} \gg \Gamma$, onde a passagem de um regime para o outro ocorre para $V_{12} \sim \Gamma$. No regime atômico o sistema é melhor descrito pelas componentes individuais de cada PQ, como fizemos nos cálculos anteriores. Entretanto, para valores muito grandes de V_{12} se faz interessante pensar não mais em cada PQ individualmente, mas sim como uma molécula de dois níveis, devido à forte hibridização dos níveis nesse limite. Para analisar o regime molecular usaremos então a densidade de estados local molecular (MLDOS) definida pela Eq. (4.41), mostrada na figura 29.

No regime molecular a noção de PQ1 e PQ2 como entes separados perde o sentido e se faz mais interessante pensar nos dois como um sistema de dois níveis com orbitais moleculares denotados aqui por “+” e “-”. Observe na figura 29 que para pequenos valores de V_{12} a MLDOS não passa da média aritmética da LDOS de cada um dos pontos quânticos, como já dito anteriormente. Contudo, é para valores grande de V_{12} que se faz interessante a MLDOS, observamos que nesse regime para ambos orbitais nós temos a presença do modo de Majorana caracterizado novamente pelo pico em energia zero, sendo mais evidente para as componentes de spin down, e quase imperceptível para a componente de spin up. Isso decorre, como já dissemos, devido ao acoplamento indireto com o Majorana através das reflexões de Andreev, nas componentes de spin up. É interessante notar também que os estados ligados de Andreev se faz presente em toda molécula, mesmo para $V_{12} \gg \Gamma$. Isso é caracterizado pelo fato de que, os picos satélites, em torno de energia zero, devido a Andreev se encontram separados no orbital “+” e “-”, tanto para spin up, quanto para spin down (figura 29). Por outro lado, o estado ligado de Majorana, denotado pelo pico em energia zero, se encontra em ambos orbitais atômicos. Isso significa que o modo de Majorana sempre está ligado a um orbital atômico em questão. Isso decorre porque o modo de Majorana sempre se encontra ligado a um único ponto quântico, revelando, no presente contexto, seu caráter atômico, ou seja, altamente localizado.

Com o intuito de conectarmos novamente com a observação experimental dos fenômenos aqui citados vamos analisar com mais cuidado a LDOS em energia zero do sistema de pontos quânticos duplo. Vamos analisar o caso onde variamos o acoplamento V_{12} e também onde variamos a energia de Zeeman, para observamos a transição de fase topológica nessa configuração.

Ao variarmos o acoplamento entre os PQ’s V_{12} observamos na LDOS em energia zero no regime trivial que no PQ1 vemos que a mesma é muito pequena devido ao desdobramento provindo dos estados ligados de Andreev figura 30(a). Já para o PQ2 vemos que a LDOS em energia zero é presente em grande intensidade e à medida que o acoplamento V_{12} aumenta ela diminui devido ao desdobra-

mento provindo desse acoplamento figura 30(c). Note que há degenerescência entre as componentes de spin, isso decorre pelo fato de que, no regime trivial, o sistema não apresenta modos de Majorana, que influência, drasticamente, a componente de spin a qual se acopla diretamente, quebrando então a degenerescência das componentes de spin.

No regime topológico, analisando a curva correspondente à componente de spin down, que acopla com o modo de Majorana, observamos que ela se reduz pela metade [figura 30(d)], caracterizando a fracionalização do férnion regular em um modo de Majorana. Perceba que à medida que o acoplamento V_{12} aumenta o modo de Majorana passa do PQ2 para o PQ1 figura 30(b). Isso fica evidente no aumento da LDOS da componente de spin down neste painel, a partir de $V_{12} \sim \Gamma$, acompanhada da diminuição da componente de spin down do painel 30(d), indicando então a transferência do modos de Majorana do PQ2 para o PQ1.

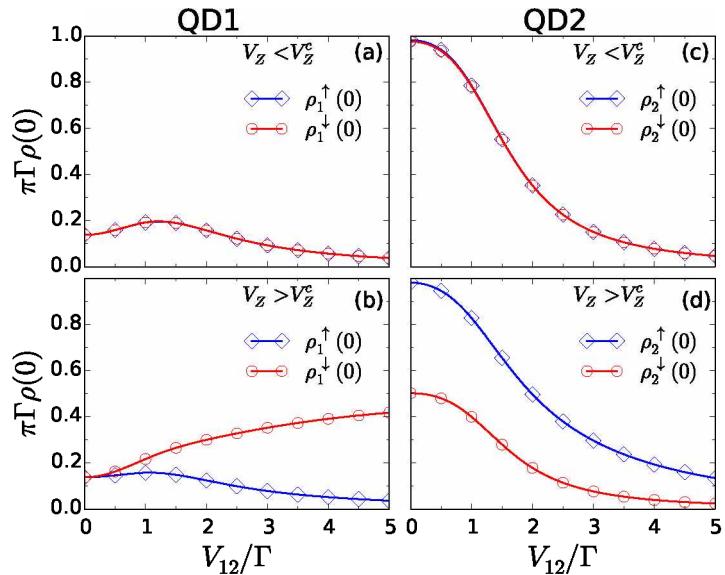


Figura 30: Densidade de estados local (LDOS) em energia zero dos PQ's em função do acoplamento V_{12} . No regime trivial (painéis superiores) e no regime topológico (painéis inferiores).

Novamente, é interessante analisarmos a LDOS em energia zero em função da energia de Zeeman para compararmos a evolução da fase trivial para a fase topológica do sistema. Para isso analisamos o sistema tanto no regime atômico quanto no regime molecular, os resultados estão mostrados na figura 31. Perceba que no regime molecular, acima da energia critica de Zeeman observamos para o PQ2 a presença do modo de Majorana figura 31(c), novamente caracterizada pelo pico de energia zero a meia altura. No regime molecular figuras 31(b) e 31(d), observamos acima da energia de Zeeman critica a aparição do modo de Majorana, só que agora no PQ1 caracterizando a transferência do modo de um ponto quântico para outro, como argumentado anteriormente. A análise mais cuidadosa da

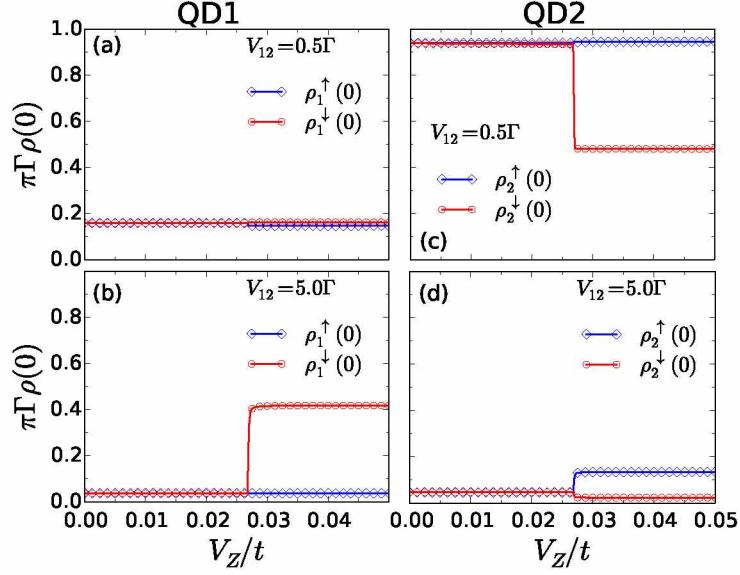


Figura 31: Densidade de estados local (LDOS) em energia zero dos PQ's em função da energia de Zeeman V_Z . No regime atômico (painéis superiores) e no regime molecular (painéis inferiores).

LDOS em energia zero corrobora com nossas afirmação anterior, que mesmo no regime molecular, o modo de Majorana sobrevive. De maneira análoga a configuração de pontos quânticos desacoplados, perceba que no ponto de transição de fase topológica observamos novamente uma descontinuidade, evidenciando a presença de modos de Majorana na fase topológica. Além disso, analisando o regime molecular e atômico, podemos observar o deslocamento da descontinuidade do espectro de um ponto quântico para o outro, confirmando então a transferência do modo do PQ2 para o PQ1.

5 *Conclusão*

Neste trabalho estudamos a formação de estados ligados de Andreev e Majorana em sistemas compostos por supercondutores e pontos quânticos. Para tal utilizamos o método das funções de Green para o cálculo da densidade de estados dos sistemas propostos. Discutimos também os aspectos topológicos da formação de estados ligados de Majorana em fios supercondutores, o modelo artificial de Kitaev, e discutindo uma já proposta realização experimental do mesmo utilizando supercondutores usuais, acoplamento spin órbita e campo magnético aplicado.

Para observarmos como os estados ligados de Andreev influenciam os estados ligados de Majorana propomos um sistema composto por dois pontos acoplados entre si e cada um deles suportando um dos tipos de estado ligado. Primeiramente analisamos a configuração de um único ponto quântico acoplado a um supercondutor que apresentava fase topologicamente não trivial. Observamos então que a forte assimetria produzida pelo critério topológico impossibilita a coexistência de estados ligados de Andreev e Majorana no configuração de um único ponto quântico.

Por outro lado, na configuração de pontos quânticos duplos observamos que por um pequeno período estados ligados de Andreev e Majorana podem coexistir. Além disso, observamos que mesmo a componente de spin que não se conecta diretamente ao modo de Majorana apresenta influência do mesmo, isso devido ao acoplamento indireto induzido pelas reflexões de Andreev que conectam férmons com diferentes componentes de spin. Analisando a densidade de estados molecular concluímos que no regime molecular, $V_{12} \gg \Gamma$, os estados ligados de Andreev se encontram em todo orbital molecular, enquanto o estado ligado de Majorana se encontra acoplado sempre a um único ponto quântico em questão, refletindo o caráter de estado altamente localizado do modo de Majorana.

A análise cuidadosa da LDOS em energia zero nos revelou que, os pontos de transição de fase topológica são caracterizados por descontinuidades acentuadas, que podem servir como caracterização de transições de fase deste tipo em experimentos de STM. Além disso, na configuração de pontos quânticos acoplados, observamos também descontinuidades nos pontos de transição de fase to-

pológica, além da transferência da descontinuidade de um ponto quântico para outro, quando temos $V_{12} \sim \Gamma$, caracterizando então a localização espacial do modos de Majorana.

Como perspectivas futuras pretendemos analisar o caso onde há interação Coulombiana nos pontos quânticos, uma vez que essa é uma das escalas de energia mais relevantes para esse tipo de sistema. Com isso poderemos observar fenômenos tais como o efeito Kondo que podem vir a influenciar os estados ligados de Majorana (52). No regime interagente podemos ainda observar os estados ligados de Shiba (53) e como se relaciona com os outros estados ligados presentes no sistema. Pretendemos também atacar diferentes configurações e como a topologia do sistema influencia os fenômenos envolvidos.

APÊNDICE A – Representações na Mecânica Quântica

Na mecânica quântica existem essencialmente três tipos de representações, são elas: Representação de Schrodinger, Representação de Heisenberg e Representação de interação. Cada uma delas se torna interessante dependendo do problema físico em questão e as quantidades a serem calculadas. Vamos discutir brevemente cada uma delas.

A.1 Representação de Schrodinger

A Representação de Schrodinger é a mais conhecida e utilizada em um primeiro contato com a mecânica quântica. Como sabemos a dinâmica de um estado quântico $|\psi(t)\rangle$ é governada pela equação de Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle, \quad (\text{A.1})$$

onde H é o Hamiltoniano do sistema físico em questão, é importante ressaltar que o Hamiltoniano é independente do tempo e obedece a equação de Schrodinger independente do tempo

$$H|\psi(0)\rangle = E|\psi(0)\rangle, \quad (\text{A.2})$$

onde E é a auto energia do estado $|\psi(0)\rangle$. Com isso temos como solução da equação de Schrodinger

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{iH}{\hbar}t}|\psi(0)\rangle. \quad (\text{A.3})$$

Seja agora A um operador qualquer, que pode ser dependente do tempo ou não. Se queremos tomar o valor esperado deste operador temos então que

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle,$$

em resumo nesta representação temos que a dinâmica se encontra na evolução do estado quântico e não dos operadores.

A.2 Representação de Heisenberg

A principal diferença entre a Representação de Heisenberg e da anterior é que neste caso a dinâmica é governada pela evolução temporal dos operadores, e não dos estados. Para ver isso vamos voltar novamente na média do operador A definida anteriormente

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle A \rangle = \langle \psi(0) | e^{\frac{iH}{\hbar}t} A e^{-\frac{iH}{\hbar}t} | \psi(0) \rangle,$$

resultando então em

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | A(t) | \psi(0) \rangle,$$

onde definimos

$$A(t) = e^{\frac{iH}{\hbar}t} A e^{-\frac{iH}{\hbar}t}, \quad (\text{A.4})$$

note que podemos também escrever a evolução de $|\psi(0)\rangle$, usando (A.2)

$$|\psi(0)\rangle = e^{\frac{iH}{\hbar}t} |\psi(t)\rangle. \quad (\text{A.5})$$

Como agora temos que a dinâmica é dada pelo operador precisamos encontrar uma equação que governa tal evolução temporal do sistema, para isso basta derivarmos $A(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A(t) &= \frac{d}{dt} [e^{\frac{iH}{\hbar}t} A e^{-\frac{iH}{\hbar}t}] = \frac{iH}{\hbar} e^{\frac{iH}{\hbar}t} A e^{-\frac{iH}{\hbar}t} + e^{\frac{iH}{\hbar}t} A e^{-\frac{iH}{\hbar}t} \left(-\frac{iH}{\hbar} \right) + \frac{\partial}{\partial t} A \\ &= \frac{i}{\hbar} [H, A(t)] + \frac{\partial}{\partial t} A, \end{aligned}$$

aqui vamos considerar que A seja independente do tempo, logo a última derivada parcial na expressão acima é nula e então temos

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)]_-, \quad (\text{A.6})$$

onde $[H, A(t)]_- = HA(t) - A(t)H$ é a relação de comutação usual. A equação acima é chamada equação de Heisenberg e domina toda a dinâmica nesta representação. Utilizaremos a mesma quando formos deduzir uma expressão para a dinâmica das funções de Green.

A.3 Representação de Interação

A Representação de Interação é uma representação intermediária entre as duas anteriores, neste caso temos que tanto o operador, quanto o estado evoluem no tempo. É importante notar que em ambas representações acima o Hamiltoniano era independente do tempo, nesta representação vamos definir um Hamiltoniano mais geral, cuja as componentes de interação dependem do tempo:

$$H(t) = H_0 + V(t),$$

e nesta representação temos

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = e^{\frac{iH_0}{\hbar}t}|\psi(t)\rangle, \quad (\text{A.7})$$

e

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{iH_0}{\hbar}t}Ae^{-\frac{iH_0}{\hbar}t}. \quad (\text{A.8})$$

Nesta representação os operadores sempre serão representados com um "chapéu" para distingui-los das outras representações. Queremos agora saber como se dá a dinâmica de $|\hat{\psi}(t)\rangle$, para isso vamos calcular sua derivada temporal parcial

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} |\hat{\psi}(t)\rangle &= \left(i \frac{\partial}{\partial t} e^{\frac{iH_0}{\hbar}t} \right) |\psi(t)\rangle + e^{\frac{iH_0}{\hbar}t} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar} e^{\frac{iH_0}{\hbar}t} [-H_0 + H] |\psi(t)\rangle = e^{\frac{iH_0}{\hbar}t} \frac{V(t)}{\hbar} |\psi(t)\rangle,
\end{aligned}$$

mas temos que $|\psi(t)\rangle = e^{\frac{-iH_0}{\hbar}t} |\hat{\psi}(t)\rangle$, isso nos leva à

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\hat{\psi}(t)\rangle = e^{\frac{iH_0}{\hbar}t} V(t) e^{-\frac{iH_0}{\hbar}t} |\hat{\psi}(t)\rangle,$$

resultando então

$$\frac{\partial}{\partial t} |\hat{\psi}(t)\rangle = -i \frac{\hat{V}(t)}{\hbar} |\hat{\psi}(t)\rangle, \quad (\text{A.9})$$

vamos considerar que a evolução do estado $|\hat{\psi}(t)\rangle$ seja dada por um operador unitário U , de forma que $|\hat{\psi}(t)\rangle = U(t, t_0) |\hat{\psi}(t_0)\rangle$, note que $U(t_0, t_0) = 1$, dito isso ficamos com

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\hat{\psi}(t_0)\rangle = -i \frac{\hat{V}(t)}{\hbar} U(t, t_0) |\hat{\psi}(t_0)\rangle,$$

nos resultando então uma equação para $U(t, t_0)$ dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = -i \frac{\hat{V}(t)}{\hbar} U(t, t_0),$$

note que a equação acima não é simplesmente uma exponencial como nos casos anteriores porque agora $\hat{V}(t)$ depende do tempo, logo a solução neste caso é uma equação integral da forma

$$U(t, t_0) = 1 + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t \hat{V}(t') U(t', t_0) dt', \quad (\text{A.10})$$

onde usamos que $U(t_0, t_0) = 1$. Essa equação integral pode ser resolvida de forma iterativa, temos que

$$U(t, t_0) = 1 + \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}(t_1) U(t_1, t_0) dt_1$$

,

mas $U(t_1, t_0)$ por sua vez é dado por

$$U(t_1, t_0) = 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^{t_2} \hat{V}(t_2) U(t_2, t_0) dt_2,$$

substituindo em $U(t, t_0)$ ficamos com

$$U(t, t_0) = 1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \left[1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 V(t_2) U(t_2, t_0) \right],$$

temos agora uma nova equação para $U(t_2, t_0)$ e assim por diante. Continuando a iteração ficamos com

$$\begin{aligned} U(t, t_0) = 1 &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

podemos escrever os produtos de integrais da expressão acima de uma forma mais interessante percebendo o seguinte

$$\int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1),$$

onde apenas permutamos t_1 com t_2 nas integrais acima. Vamos usar agora a chamada função degrau, a função degrau é definida por

$$\theta(t - t') = \begin{cases} 1, & \text{se } t > t' \\ 0, & \text{se } t < t' \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

podemos então escrever

$$\int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 [\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \theta(t_1 - t_2) + \hat{V}(t_2) \hat{V}(t_1) \theta(t_2 - t_1)],$$

definindo agora o operador de ordenamento temporal

$$T[\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2)] = \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \theta(t_1 - t_2) + \hat{V}(t_2) \hat{V}(t_1) \theta(t_2 - t_1), \quad (\text{A.13})$$

ficamos com

$$\int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T[\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2)],$$

de maneira análoga podemos escrever o produto triplo de integrais da forma

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) &= \frac{1}{6} \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \\ &\quad + \frac{1}{6} \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1), \end{aligned}$$

onde apenas permutamos t_1, t_2 e t_3 , seguindo os mesmo passos do caso anterior com a ajuda da função degrau podemos escrever

$$\int_{t_0}^{t_1} dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \hat{V}(t_2) \int_{t_0}^{t_3} dt_3 \hat{V}(t_3) = \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^t dt_3 T[\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \hat{V}(t_3)],$$

com

$$\begin{aligned}
T[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_3)] &= \hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_3)\theta(t_1-t_2)\theta(t_2-t_3) \\
&\quad + \hat{V}(t_1)\hat{V}(t_3)\hat{V}(t_2)\theta(t_1-t_3)\theta(t_3-t_2) \\
&\quad + \hat{V}(t_2)\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_3)\theta(t_2-t_3)\theta(t_3-t_1) \\
&\quad + \hat{V}(t_2)\hat{V}(t_3)\hat{V}(t_1)\theta(t_2-t_1)\theta(t_1-t_3) \\
&\quad + \hat{V}(t_3)\hat{V}(t_2)\hat{V}(t_1)\theta(t_2-t_1)\theta(t_1-t_3) \\
&\quad + \hat{V}(t_3)\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\theta(t_1-t_2)\theta(t_2-t_3),
\end{aligned}$$

a generalização para o operador de ordenamento temporal para o produto de n operadores é direto:

$$T[\hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\dots\hat{V}(t_n)] = \sum_{p \in S_n} \hat{V}(t_1)\hat{V}(t_2)\dots\hat{V}(t_n)\theta(t_{p(1)}-t_{p(2)})\dots\theta(t_{p(n-1)}-t_{p(n)}), \quad (\text{A.14})$$

onde S_n é o grupo das permutações. Fazendo isto para todos os produtos de integrais que aparecem na expressão de $U(t, t_0)$ temos

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T[\hat{V}(t_1)\dots\hat{V}(t_n)], \quad (\text{A.15})$$

logo o operador de evolução temporal se reduz simplesmente a forma

$$U(t, t_0) = T \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t')} \right], \quad (\text{A.16})$$

finalmente temos nessa representação que um estado evolui de um tempo t_0 até um posterior t da forma

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = T \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t')} \right] |\hat{\psi}(t_0)\rangle. \quad (\text{A.17})$$

Muitas vezes, quando a perturbação (interação) do sistema é significantemente pequena em relação as escalas de energias analisadas, podemos considerar apenas os primeiros termos de (A.15), a mais importante dessas aproximações é a que chamamos de **resposta linear**, neste caso, considera-se

apenas o termo linear na interação no operador de evolução temporal e temos

$$U(t, t_0) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t'), \quad (\text{A.18})$$

esta aproximação será importante quando considerarmos sistemas fora do equilíbrio, onde utilizaremos a fórmula de Kubo que será discutida mais adiante.

APÊNDICE B – Funções de Green

Uma das ferramentas mais poderosas da chamada teoria quântica de campos são as chamadas funções de correlação. Contudo, essa ferramenta se mostrou bastante útil para cálculos de física estatística, sobretudo, utilizando as chamadas funções de Green.

As funções de Green em física estatística são funções de correlação generalizadas de dois operadores, as principais funções de Green em física estatística são a função de Green causal (GC), função de Green retardada (GR) e função de Green avançada (GA), definidas respectivamente como (27):

$$G^c(t; t') \equiv \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^c = -i\langle TA(t)B(t')\rangle, \quad (B.1)$$

$$G^r(t; t') \equiv \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^r = -i\theta(t - t')\langle[A(t), B(t')]_\zeta\rangle, \quad (B.2)$$

$$G^a(t; t') \equiv \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^a = i\theta(t' - t)\langle[A(t), B(t')]_\zeta\rangle, \quad (B.3)$$

onde $A(t), (B(t'))$ são operadores genéricos escritos na representação de Heisenberg, T é o operador de ordenamento temporal, $\theta(t - t')$ a função degrau usual e

$$[A(t), B(t')]_\zeta = A(t)B(t') - \zeta B(t')A(t), \quad (B.4)$$

com $\zeta = 1$ caso $A(t)(B(t'))$ sejam operadores bosônicos e $\zeta = -1$ caso sejam fermiônicos. Para nossos propósitos vamos nos concentrar em GR, note que a mesma pode ser escrita de forma explícita da forma

$$G^r(t; t') = \theta(t - t')[-i\langle A(t)B(t')\rangle + \zeta i\langle B(t')A(t)\rangle], \quad (B.5)$$

vamos agora definir a chamada função de Green maior e função de Green menor, dadas respectivamente

mente por

$$G^>(t; t') \equiv -i\langle A(t)B(t')\rangle, \quad (\text{B.6})$$

$$G^<(t; t') \equiv -i\zeta\langle B(t')A(t)\rangle. \quad (\text{B.7})$$

Usando as definições acima podemos escrever GR como

$$G^r(t; t') = \theta(t - t')[G^>(t; t') - G^<(t; t')]. \quad (\text{B.8})$$

De forma análoga, podemos escrever GA como

$$G^a(t; t') = \theta(t' - t)[G^<(t; t') - G^>(t; t')]. \quad (\text{B.9})$$

Para nossos cálculos estamos interessados na função de Green não no domínio temporal, mas sim no domínio das frequências. Para tanto, precisamos efetuar uma transformada de Fourier na mesma. Entretanto, primeiramente vamos olhar com mais cuidado a média termodinâmica $\langle A(t)B(t')\rangle$. No contexto da mecânica estatística, essa média termodinâmica (no ensemble canônico) é calculada da forma¹

$$\langle A(t)B(t')\rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | e^{-\beta H} A(t)B(t') | n \rangle,$$

ou simplesmente

$$\langle A(t)B(t')\rangle = \text{Tr}\{\rho A(t)B(t')\}. \quad (\text{B.10})$$

Na expressão acima ρ é a matriz densidade dada por

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (\text{B.11})$$

e Z é a função de partição que tem a forma

¹A generalização para o ensemble grande-canônico é direta, considerando o vínculo do número de partículas tomando $\mathcal{H} = H - \mu N$ e somando sobre o número de partículas.

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle,$$

com $\beta = [K_B T]^{-1}$ e $|\{n\}\rangle$ é o conjunto dos auto-estados do Hamiltoniano H . Como a média termodinâmica só depende do traço da matriz densidade que por sua vez é invariante sobre mudança de base, escolhemos o conjuntos dos auto-estados por conveniência.

Lembrando agora que os operadores estão escritos na representação de Heisenberg temos²

$$\begin{aligned} A(t) &= e^{iHt} A e^{-iHt}, \\ B(t') &= e^{iHt'} B e^{-iHt'}. \end{aligned}$$

Utilizando a completeza do espaço $\sum_{n'} |n'\rangle\langle n'| = 1$, podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle A(t)B(t') \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n | e^{-iHt} A e^{-iHt} | n' \rangle \langle n' | e^{iHt'} B e^{-iHt'} | n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n | A | n' \rangle \langle n' | B | n \rangle e^{i(t-t')(E_n - E_{n'})}. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

De forma análoga obtemos

$$\begin{aligned} \langle B(t')A(t) \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n | e^{-iHt'} B e^{-iHt'} | n' \rangle \langle n' | e^{iHt} A e^{-iHt} | n \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n | B | n' \rangle \langle n' | A | n \rangle e^{-i(t-t')(E_n - E_{n'})}. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

É interessante notar dos resultados acima, que GR depende apenas de $t - t'$. Geralmente como estamos interessados no espaço das frequências e dos momentos, efetuaremos a transformada de Fourier

$$G^r(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G^r(t; t') e^{i\omega(t-t')} d(t-t'), \quad (\text{B.14})$$

cuja a transformada inversa dada por

²Note que utilizamos $\hbar = 1$, o mesmo será feito para todos os cálculos desta seção.

$$G^r(t; t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega. \quad (\text{B.15})$$

Usando (B.5), (B.12) e (B.13) temos

$$G^r(\omega) = -\frac{i}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \theta(\tau) \left[\langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle e^{i\tau(E_n - E_{n'})} - \zeta \langle n|B|n' \rangle \langle n'|A|n \rangle e^{-i\tau(E_n - E_{n'})} \right],$$

onde fizemos $\tau = t - t'$.

Devido a descontinuidade de GR no espaço temporal, vamos nos concentrar na transformada de Fourier no espaço das frequências. Primeiramente note que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \theta(\tau) e^{i\tau[\omega + (E_n - E_{n'})]} = \int_0^{\infty} d\tau e^{i\tau[\omega + (E_n - E_{n'})]}$$

conduzindo-nos à

$$\int_0^{\infty} d\tau e^{i\tau[\omega + (E_n - E_{n'})]} = \frac{e^{i[\omega + (E_n - E_{n'})]\infty}}{i[\omega + (E_n - E_{n'})]} - \frac{1}{i[\omega + (E_n - E_{n'})]}.$$

De modo análogo, temos

$$\int_0^{\infty} d\tau e^{i\tau[\omega - (E_n - E_{n'})]} = \frac{e^{i[\omega - (E_n - E_{n'})]\infty}}{i[\omega - (E_n - E_{n'})]} - \frac{1}{i[\omega - (E_n - E_{n'})]}.$$

Perceba que o primeiro termo do resultado das duas integrais acima diverge. Isto é uma consequência da não continuidade da função $\theta(t - t')$, o que faz com que tanto GR quanto GA não sejam bem definidas pra $t = t'$. Para resolvemos este problema temos que efetuar uma continuação analítica da frequência no plano complexo, fazendo $\omega \rightarrow \omega + i\eta$, onde η é um infinitesimal puramente real e positivo. Fazendo isso nas integrais acima obtemos

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\tau e^{i\tau[\omega+i\eta+(E_n-E_{n'})]} &= \frac{e^{i[\omega+(E_n-E_{n'})]\infty} e^{-\eta\infty}}{i[\omega+i\eta+(E_n-E_{n'})]} - \frac{1}{i[\omega+i\eta+(E_n-E_{n'})]} \\ &= -\frac{1}{i[\omega+i\eta+(E_n-E_{n'})]} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \int_0^\infty d\tau e^{i\tau[\omega+i\eta-(E_n-E_{n'})]} &= \frac{e^{i[\omega-(E_n-E_{n'})]\infty} e^{-\eta\infty}}{i[\omega+i\eta-(E_n-E_{n'})]} - \frac{1}{i[\omega+i\eta-(E_n-E_{n'})]} \\ &= -\frac{1}{i[\omega+i\eta-(E_n-E_{n'})]}. \end{aligned}$$

Nas duas últimas expressões usamos que $e^{-\eta\infty} \rightarrow 0$. Para GA o procedimento é o mesmo, mudando apenas a continuação analítica para o plano complexo inferior ($\omega \rightarrow \omega - i\eta$), uma vez que GA depende de $\theta(t' - t)$. Isso nos leva à expressão de GR e GA, respectivamente

$$G^r(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_{n'}} \left[\frac{\langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle}{\omega + i\eta + (E_n - E_{n'})} - \zeta \frac{\langle n|B|n' \rangle \langle n'|A|n \rangle}{\omega + i\eta - (E_n - E_{n'})} \right],$$

e

$$G^a(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_{n'}} \left[\frac{\langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle}{\omega - i\eta + (E_n - E_{n'})} - \zeta \frac{\langle n|B|n' \rangle \langle n'|A|n \rangle}{\omega - i\eta - (E_n - E_{n'})} \right].$$

Dessa forma fica clara a relação que existe entre GR e GA no espaço das frequências, uma é simplesmente o complexo conjugado da outra

$$G^r(\omega) = [G^a(\omega)]^*. \quad (\text{B.16})$$

Podemos juntar os dois termos da GR na expressão acima, notando que

$$e^{-\beta E_n} \frac{\langle n|B|n' \rangle \langle n'|A|n \rangle}{\omega + i\eta - (E_n - E_{n'})} = e^{\beta E_n} \frac{\langle n'|A|n \rangle \langle n|B|n' \rangle}{\omega + i\eta - (E_n - E_{n'})},$$

que ainda podemos escrever como

$$e^{\beta E_n} \frac{\langle n|B|n' \rangle \langle n'|A|n \rangle}{\omega + i\eta - (E_n - E_{n'})} = e^{-\beta E_{n'}} \frac{\langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle}{\omega + i\eta + (E_n - E_{n'})}.$$

Dessa forma, a GR pode ser finalmente escrita como

$$G^r(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{nn'} \frac{\langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle}{\omega + i\eta + (E_n - E_{n'})} (e^{-\beta E_n} - \zeta e^{-\beta E_{n'}}). \quad (\text{B.17})$$

A função de Green escrita da forma acima é conhecida como função de Green na representação de Lehmann. Vamos agora efetuar a transformada de Fourier para as funções de Green maior e menor. Para a função de Green maior temos que

$$\begin{aligned} G^>(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} G^>(t; t') e^{i\omega(t-t')} d(t-t') \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} \langle A(t)B(t') \rangle e^{i\omega(t-t')} d(t-t'). \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Usando novamente (B.12) temos

$$G^>(\omega) = -\frac{i}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\tau[\omega + (E_n - E_{n'})]}.$$

Note que

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\tau[\omega + (E_n - E_{n'})]} = 2\pi\delta[\omega + (E_n - E_{n'})],$$

o que nos fornece

$$G^>(\omega) = -\frac{2\pi i}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle \delta[\omega + (E_n - E_{n'})]. \quad (\text{B.19})$$

Para a função de Green menor, de forma análoga,

$$\begin{aligned} G^<(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} G_k^<(t; t') e^{i\omega(t-t')} d(t-t') \\ &= -i\zeta \int_{-\infty}^{\infty} \langle B(t')A(t) \rangle e^{i\omega(t-t')} d(t-t'). \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Usando agora (B.13) obtemos

$$G^<(\omega) = -\zeta \frac{2\pi i}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n|B|n' \rangle \langle n'|A|n \rangle \delta[\omega - (E_n - E_{n'})].$$

Comutando novamente os dois elementos de matrizes A e B podemos escrever

$$G^<(\omega) = -\zeta \frac{2\pi i}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_{n'}} \langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle \delta[\omega + (E_n - E_{n'})]. \quad (\text{B.21})$$

Podemos relacionar as duas funções de Green, menor e maior notando da função delta que $E_{n'} - E_n = \omega$, logo, comparando (B.19) com (B.21) notamos que

$$G^<(\omega) = \zeta G^>(\omega) e^{-\beta\omega}. \quad (\text{B.22})$$

Vamos agora relacionar a parte imaginária de GR com as funções de Green maior e menor. Para isso, usaremos a relação

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\omega + i\eta} = \frac{P}{\omega} - i\pi\delta(\omega)$$

em (B.17) podemos escrever

$$\begin{aligned} 2\text{Im}[G(\omega)] &= -\frac{2\pi}{Z} \sum_{nn'} \langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle \delta[\omega + (E_n - E_{n'})] (e^{-\beta E_n} - \zeta e^{-\beta E_{n'}}) \\ &= -\frac{2\pi}{Z} \sum_{nn'} e^{-\beta E_n} \langle n|A|n' \rangle \langle n'|B|n \rangle \delta[\omega + (E_n - E_{n'})] (1 - \zeta e^{-\beta\omega}) \\ &= -i(1 - \zeta e^{-\beta\omega}) G^>(\omega). \end{aligned}$$

Definindo agora a função espectral $\mathcal{A}(\omega) = -2\text{Im}[G(\omega)]$ temos então as relações

$$\begin{aligned} G^>(\omega) &= -\frac{1}{1 - \zeta e^{-\beta\omega}} i\mathcal{A}(\omega) \\ G^<(\omega) &= -\zeta \frac{1}{e^{\beta\omega} - \zeta} i\mathcal{A}(\omega), \end{aligned}$$

lembrando que a distribuição de Fermi-Dirac ($\zeta = -1$) e Bose-Einstein ($\zeta = 1$) são dadas por

$$f_\zeta(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - \zeta}, \quad (\text{B.23})$$

podemos escrever as importantes relações

$$iG^>(\omega) = [1 + \zeta f_\zeta(\omega)]\mathcal{A}(\omega) \quad (\text{B.24})$$

$$iG^<(\omega) = \zeta f_\zeta(\omega)\mathcal{A}(\omega). \quad (\text{B.25})$$

As relações acima são fundamentais para a teoria de funções de Green no equilíbrio termodinâmico, elas representam o chamado **teorema de flutuação-dissipação**. Este nome é dado porque das relações acima vemos que flutuações, relacionadas com as funções de Green maior e menor se relacionam diretamente com a parte imaginária da função de Green retardada, que por sua vez está associada com fenômenos de dissipação. Vemos ainda que, GR e GA são o complexo conjugado uma da outra, logo como $\mathcal{A}(\omega) = -2\text{Im}[G(\omega)]$ temos então

$$\mathcal{A}(\omega) = i(G^r(\omega) - G^a(\omega)). \quad (\text{B.26})$$

Vamos explorar ainda mais os resultados do teorema de dissipação-flutuação. Da transformada inversa de Fourier sabemos que

$$G^>(t; t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G^>(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega,$$

das relações acima podemos escrever

$$G^>(t; t') = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} [1 + \zeta f_\zeta(\omega)] i\mathcal{A}(\omega) e^{-i\omega(t-t')} d\omega.$$

Da definição temos $G^>(t; t') = -i\langle A(t)B(t') \rangle$, obtemos

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) [1 + \zeta f_\zeta(\omega)] e^{i\omega(t-t')} d\omega, \quad (\text{B.27})$$

com

$$J(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G(\omega)], \quad (\text{B.28})$$

onde usamos que $\mathcal{A}(\omega) = -2\text{Im}[G(\omega)]$. De forma análoga para $G^<(t; t')$ obtemos

$$\langle B(t')A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) f_{\zeta}(\omega) e^{i\omega(t-t')} d\omega. \quad (\text{B.29})$$

Note que as médias acima podem ser calculadas mesmo pra $t = t'$, vimos também de (B.12) e (B.13) que as mesmas só dependem de $t - t'$, nos levando então as relações

$$\langle A(t)B(t) \rangle = \langle A(0)B(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) [1 + \zeta f_{\zeta}(\omega)] d\omega \quad (\text{B.30})$$

$$\langle B(t)A(t) \rangle = \langle B(0)A(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(\omega) f_{\zeta}(\omega) d\omega. \quad (\text{B.31})$$

As médias termodinâmicas acima são conhecidas como funções de correlação temporal e possuem importante papel em diversos cálculos (e.g. transporte). Perceba que uma vez que conhecemos GR estamos a princípio aptos a calcular as funções de correlação. Até aqui $A(t)$ e $B(t')$ são operadores genéricos, a especificação dos mesmos depende da contextualização do problema físico e das quantidades físicas de interesse.

B.1 Equação de Movimento para a função de Green

Até aqui apenas descrevemos as propriedades da função de Green retardada, vamos agora apresentar uma método de obtermos a mesma, o qual será utilizado constantemente nesta dissertação. Como vimos na seção anterior, a função de Green retardada é dada por

$$G^r(t; t') \equiv \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^r = -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\zeta} \rangle.$$

Derivando com a expressão acima com relação ao tempo temos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^r &= \frac{d}{dt} \left[-i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\zeta} \rangle \right] \\ &= -i\delta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\zeta} \rangle - i\theta(t - t') \frac{d}{dt} \langle [A(t), B(t')]_{\zeta} \rangle, \end{aligned}$$

onde usamos que

$$\frac{d}{dt}\theta(t-t') = \delta(t-t').$$

Uma vez que, como estamos na representação de Heisenberg, os operadores obedecem a equação de movimento

$$\frac{d}{dt}A(t) = -i[A(t), H]_{-}. \quad (\text{B.32})$$

Assim,

$$\frac{d}{dt}\langle [A(t), B(t')]_{\zeta} \rangle = \langle [-i[A(t), H]_{-}, B(t')]_{\zeta} \rangle,$$

que nos conduz à equação

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^r = \delta(t-t')\langle [A(t), B(t)]_{\zeta} \rangle + \langle\langle [A(t), H]_{-}; B(t') \rangle\rangle^r. \quad (\text{B.33})$$

A equação (B.33) é a chamada equação de movimento para a função de Green. Como estamos interessados no espaço das frequências, aplicando uma transformada de Fourier na equação acima obtemos:

$$\omega\langle\langle A; B \rangle\rangle_{\omega}^r = \langle [A, B]_{\zeta} \rangle + \langle\langle [A, H]_{-}; B \rangle\rangle_{\omega}^r. \quad (\text{B.34})$$

Tendo sempre em mente que para fins de continuidade analítica devemos fazer $\omega \rightarrow \omega + i\eta$. Esta equação será usada para a obtenção das funções de Green no presente trabalho.

Note que as informações de muitos corpos estão contidas no termo $[A, H]_{-}$, isso faz com que ao aplicarmos o método da equação de movimento, geramos uma nova família de funções de Green, cujas equações de movimento geram outras novas famílias, e assim sucessivamente. Este conjunto de equações geralmente não é fechado, logo, se é preciso truncar a hierarquia das funções de Green com as aproximações apropriadas.

Como exemplo simples, consideremos um gás de Fermi não interagente. Vamos então calcular a

função de Green $\langle\langle c_k; c_k^\dagger \rangle\rangle$. Da equação de movimento temos que

$$\omega \langle\langle c_k; c_k^\dagger \rangle\rangle_\omega^r = \langle [c_k, c_k^\dagger]_+ \rangle + \langle\langle [c_k, H]_-; c_k^\dagger \rangle\rangle_\omega^r. \quad (\text{B.35})$$

Neste caso Hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k. \quad (\text{B.36})$$

Usando agora as importantes relações $[A, BC]_- = [A, B]_- C + B[A, C]_-$, $[A, BC]_+ = [A, B]_+ C - B[A, C]_+$, e que $[c_k, c_{k'}^\dagger]_+ = \delta_{kk'}, [c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger]_+ = [c_k, c_{k'}]_+ = 0$ temos

$$[c_k, H]_- = \varepsilon_k [c_k, c_k^\dagger]_+ c_k - \varepsilon_k c_k^\dagger [c_k, c_k]_+ = \varepsilon_k c_k.$$

Substituindo esta equação na Eq. (B.35) obtemos

$$\langle\langle c_k; c_k^\dagger \rangle\rangle_\omega^r = \frac{1}{\omega + i\eta - \varepsilon_k}. \quad (\text{B.37})$$

Essa é a chamada função de Green de uma única partícula, ou ainda, propagador livre. Temos ainda que a média do operador número é dada por

$$\langle c_k^\dagger c_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_k(\omega) f_+(\omega) d\omega, \quad (\text{B.38})$$

onde percebemos neste caso que $J(\omega)$ nada mais é do que a densidade de estados local, dada por

$$\rho_k(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\langle\langle c_k; c_k^\dagger \rangle\rangle_\omega \right].$$

Note ainda que, podemos escrever este resultado em termos da função espectral $A_k(\omega)$

$$\rho_k(\omega) = \frac{1}{2\pi} A_k(\omega),$$

onde usamos que $A_k(\omega) = -2\text{Im}[G_k(\omega)]$. Se queremos saber a densidade de estados total, temos que

somar todos os momentos, logo temos a importante relação entre a função espectral e a densidade de estados:

$$\sum_k A_k(\omega) = 2\pi\rho(\omega) \quad (\text{B.39})$$

O cálculo da densidade de estados via GR é uma das aplicações mais importantes do método das funções de Green. Apesar de exemplificarmos usando o modelo simples do gás de fermi não interageante a relação acima se mantém válida, uma vez que o formalismo das funções de Green é geral. No caso acima podemos calcular de forma simples a densidade de estados lembrando que

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

que nos leva à

$$\rho_k(\omega) = \delta(\omega - \varepsilon_k). \quad (\text{B.40})$$

Vamos entender melhor o porque essa função de Green é chamada de propagador livre. Para isso vamos calcular a transformada de Fourier inversa, temos então

$$\begin{aligned} G_k(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} G_k(\omega) d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta - \varepsilon_k} d\omega. \end{aligned}$$

Essa integral pode ser resolvida por integração complexa via teorema dos resíduos, mostrando mais uma vez a utilidade da continuidade analítica. Vamos tomar um contorno C no sentido anti-horário no semi-plano complexo inferior, uma vez que ele possui uma singularidade em $\omega = \varepsilon_k - i\eta$, do teorema dos resíduos temos

$$\oint_C f(z-a) dz = 2\pi i \text{Res}(a), \quad (\text{B.41})$$

onde a representa um ponto singular no plano complexo. No presente caso temos que

$$\oint_C \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta - \varepsilon_k} d\omega = \int_{-\infty}^{-\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta - \varepsilon_k} d\omega + \int_{C_{\text{inf}}} \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta - \varepsilon_k} d\omega,$$

onde a primeira integral do contorno representa a integral no plano real e a segunda no semi-plano complexo inferior. Usando então o teorema dos resíduos temos que

$$\oint_C \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta - \varepsilon_k} d\omega = 2\pi i \text{Res}(\varepsilon_k - i\eta).$$

Como temos polos simples a formula para o resíduo é

$$\text{Res}(a) = \lim_{z \rightarrow a} (z - a) f(z). \quad (\text{B.42})$$

Assim,

$$\begin{aligned} \text{Res}(\varepsilon_k - i\eta) &= \lim_{\omega \rightarrow \varepsilon_k - i\eta} \frac{1}{2\pi} \frac{(\omega - \varepsilon_k + i\eta) e^{-i\omega t}}{(\omega - \varepsilon_k + i\eta)} \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{-i(\varepsilon_k - i\eta)t}. \end{aligned}$$

Uma vez que, por definição que a função de Green para partículas é definida para tempos positivos, então a integral no plano complexo inferior deve zerar e, portanto,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\eta - \varepsilon_k} d\omega = -ie^{-i(\varepsilon_k - i\eta)t}. \quad (\text{B.43})$$

Se quisermos estender esse resultado para todos os tempos, basta utilizarmos a função degrau, com isso finalmente obtemos

$$G_k(t) = -i\theta(t) e^{-i(\varepsilon_k - i\eta)t}. \quad (\text{B.44})$$

O termo complexo no argumento da exponencial entre parenteses é o responsável pela convergência do propagador para tempos muito longos, como dissemos anteriormente. Veremos que, em sistemas interagentes, o termo imaginário do polo da função de Green está associado com o tempo de meia

vida de uma quase-partícula.

B.2 Equação de Dyson

Uma das formas de calcularmos as funções de Green de um certo sistema é usarmos a chamada equação de Dyson, que conecta a função de Green do sistema interagente com a função de Green do sistema não interagente, também chamada de propagador livre. Como exemplo vamos utilizar um sistema descrito por uma impureza acoplada a um gás de elétrons não interagente, de maneira que o Hamiltoniano seja dado por

$$H = \sum_{\sigma} \varepsilon_{d\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k d_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + V_k^* c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}, \quad (\text{B.45})$$

onde $d_{\sigma}^{\dagger}(d_{\sigma})$ cria(aniquila) um elétron com energia ε_d e spin σ na impureza, $c_{k\sigma}^{\dagger}(c_{k\sigma})$ cria(aniquila) um elétron com energia ε_k e spin σ na banda de condução e V_k é a matriz de hibridização que acopla a impureza e os elétrons da banda de condução. Usando o método da equação de movimento descrito na seção anterior, temos que

$$\omega \langle \langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = 1 + \langle \langle [d_{\sigma}, H]_-; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle.$$

Efetuando o comutador obtemos

$$[d_{\sigma}, H]_- = \varepsilon_{d\sigma} d_{\sigma} + \sum_{k\sigma} V_k c_{k\sigma},$$

o que nos leva à

$$\omega \langle \langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = 1 + \varepsilon_{d\sigma} \langle \langle d_{\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle + \sum_{k\sigma} V_k \langle \langle c_{k\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle.$$

Agora temos que fazer a equação de movimento pra a nova função de Green que apareceu do lado direito da equação acima

$$\omega \langle \langle c_{k\sigma}; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle = \langle \langle [c_{k\sigma}, H]_-; d_{\sigma}^{\dagger} \rangle \rangle.$$

Como

$$[c_{k\sigma}, H]_- = \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma} + V_k^* d_{\sigma},$$

obtemos o conjunto de equações

$$\begin{aligned} G_{d\sigma}(\omega) &= g_{d\sigma}(\omega) + g_{d\sigma}(\omega) \sum_{k\sigma} V_k G_{k\sigma, d\sigma}(\omega), \\ G_{k\sigma, d\sigma}(\omega) &= (\omega - \varepsilon_{k\sigma})^{-1} V_k^* G_{d\sigma}(\omega), \end{aligned}$$

onde definimos $G_{d\sigma}(\omega) \equiv \langle\langle d_\sigma; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$, $G_{k\sigma,d\sigma}(\omega) \equiv \langle\langle c_{k\sigma}; d_\sigma^\dagger \rangle\rangle$ e o propagador livre $g_{d\sigma}(\omega) \equiv (\omega - \varepsilon_{d\sigma})^{-1}$.

Combinando o conjunto de equações acima, podemos escrever

$$G_{d\sigma}(\omega) = g_{d\sigma}(\omega) + g_{d\sigma}(\omega) \left[\sum_{k\sigma} V_k (\omega - \varepsilon_{k\sigma})^{-1} V_k^* \right] G_d(\omega). \quad (\text{B.46})$$

Perceba que toda a informação da interação está contida no termo em colchetes. De maneira geral podemos escrever a equação acima da forma

$$G_{d\sigma}(\omega) = g_{d\sigma}(\omega) + g_{d\sigma}(\omega) \Sigma(\omega) G_{d\sigma}(\omega), \quad (\text{B.47})$$

onde $\Sigma(\omega)$ é chamada auto-energia que contem toda a informação das interações da interação do sistema. A equação acima é chamada **Equação de Dyson**. Para o presente sistema, a auto-energia é simplesmente dada por

$$\Sigma(\omega) = \sum_{k\sigma} V_k (\omega - \varepsilon_{k\sigma})^{-1} V_k^*. \quad (\text{B.48})$$

A forma da equação de Dyson é a mesma para sistemas mais complexos, mas geralmente precisa ser resolvida de forma iterativa e com auto-energias mais complicadas, podendo ainda tomar a forma matricial.

Vamos olhar com atenção a auto-energia nesse presente caso. Para isso, vamos lembrar que por meios de continuidade analítica temos que tomar $\omega \rightarrow \omega + i\eta$, com isso temos que

$$\Sigma(\omega) = \sum_k \frac{|V_k|^2}{\omega + i\eta - \varepsilon_{k\sigma}}. \quad (\text{B.49})$$

Podemos então separar a auto-energia em uma parte real e uma imaginária da forma

$$\Sigma(\omega) = \Lambda(\omega) + i\Delta(\omega), \quad (\text{B.50})$$

onde definimos

$$\Lambda(\omega) = \sum_k \frac{|V_k|^2(\omega - \varepsilon_{k\sigma})}{(\omega - \varepsilon_{k\sigma})^2 + \eta^2}, \quad \Delta(\omega) = -\eta \sum_k \frac{|V_k|^2}{(\omega - \varepsilon_{k\sigma})^2 + \eta^2}. \quad (\text{B.51})$$

Por simplicidade vamos considerar $V_k = V$ e $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_\sigma$, ou seja, independentes de k . Vamos agora transformar a somatória nos momentos em uma integral na energia, e assumir que a densidade de estados para os elétrons livres é dada por $\rho(\varepsilon) = \rho_0 \theta(|D| - \varepsilon)$, com $\rho_0 = 1/2D$ e $2D$ sendo a largura da

banda de condução. Com isso temos então que

$$\Lambda(\omega) = \sum_k \frac{|V_k|^2(\omega - \varepsilon_{k\sigma})}{(\omega - \varepsilon_{k\sigma})^2 + \eta^2} = \rho_0|V|^2 \int_{-D}^D \frac{\omega - \varepsilon}{(\omega - \varepsilon)^2 + \eta^2} d\varepsilon = \rho_0|V|^2 \ln \left[\frac{(\omega + D)^2 + \eta^2}{(\omega - D)^2 + \eta^2} \right]^{1/2}.$$

Perceba que se estivermos interessados em excitações próximas do nível de Fermi, que geralmente se encontra no meio da banda e tomado a banda muito larga, podemos fazer $\omega \ll D$ e lembrando que $\eta \rightarrow 0$ temos então $\Lambda(\omega) = \rho_0|V|^2 \ln(1)^{1/2} = 0$. Portanto, para o limite em que a banda é muito larga, temos que a parte real da auto-energia neste caso não contribui para o sistema. Essa é a chamado limite da banda larga ou **Wide Band Limit (WBL)**.

Para a parte imaginária, neste caso, temos que

$$\begin{aligned} \Delta(\omega) &= -\eta \sum_k \frac{|V_k|^2}{(\omega - \varepsilon_{k\sigma})^2 + \eta^2} \\ &= -\rho_0|V|^2 \int_{-D}^D \frac{\eta}{(\omega - \varepsilon)^2 + \eta^2} d\varepsilon \\ &= -\rho_0|V|^2 \pi \int_{-D}^D \delta(\omega - \varepsilon) d\varepsilon \\ &= -\pi\rho_0|V|^2, \end{aligned}$$

onde usamos

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{(\omega - \varepsilon)^2 + \eta^2} = \delta(\omega - \varepsilon). \quad (\text{B.52})$$

Pela equação de Dyson podemos escrever

$$\begin{aligned} G_d(\omega) &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - \Sigma(\omega)} \\ &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - [\Lambda(\omega) + i\Delta(\omega)]} \\ &= \frac{\omega - \varepsilon_d - \Lambda(\omega)}{[\omega - \varepsilon_d - \Lambda(\omega)]^2 + [\Delta(\omega)]^2} + \frac{i\Delta(\omega)}{[\omega - \varepsilon_d - \Lambda(\omega)]^2 + [\Delta(\omega)]^2}, \end{aligned}$$

lembrando que $\rho_d(\omega) = -1/\pi \text{Im}[G_d(\omega)]$ temos então

$$\rho_d(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Delta(\omega)}{[\omega - \varepsilon_d - \Lambda(\omega)]^2 + [\Delta(\omega)]^2}. \quad (\text{B.53})$$

Para o caso presente, onde usamos o aproximação da banda larga, temos simplesmente que

$$\rho_d(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \Gamma^2}, \quad (\text{B.54})$$

onde $\Gamma = \pi \rho_0 |V|^2$. Perceba, portanto, que a densidade de estados da impureza neste caso é simplesmente uma lorentziana centrada em ε_d e com largura Γ . Note que, uma vez que o acoplamento com o gás de elétrons diminui, temos que a densidade de estados de torna uma delta de Dirac novamente, como o esperado. É interessante notar também que, na aproximação da banda larga, a auto-energia não depende da frequência. Em geral isso não é verdade. Para sistemas supercondutores, por exemplo, mesmo em WBL temos ainda dependência da auto-energia com a frequência. Essa aproximação é muito utilizada em toda a dissertação.

Perceba que, com a equação de Dyson conseguimos escrever a função de Green na presença da interação na forma de um propagador livre, mas com o polo $\varepsilon_d + \Sigma(\omega)$, usando WBL, vimos que a função de Green toma a forma

$$G_d(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_d + i\Gamma}, \quad (\text{B.55})$$

que nos leva a

$$G_d(t) = -i\theta(t)e^{-i(\varepsilon_d - i\Gamma)t}, \quad (\text{B.56})$$

onde do termo imaginário em parenteses conseguimos identificar o tempo de meia vida $\tau^{-1} = \Gamma$. A medida que Γ aumenta, o que corresponde ao aumento da interação da impureza com o gás de elétrons, o tempo de meia vida do elétron na impureza diminui, uma vez possui maior probabilidade do elétrons escapar da impureza.

B.3 Líquido de Landau-Fermi

Uma das mais importantes aplicações da equação de Dyson é na chamada teoria do líquido de Landau-Fermi, as vezes chamado simplesmente de líquido de Fermi. Se considerarmos agora a equação de Dyson em sua forma geral

$$G(\mathbf{k}, \omega) = G^0(\mathbf{k}, \omega) + G^0(\mathbf{k}, \omega)\Sigma(\mathbf{k}, \omega)G(\mathbf{k}, \omega), \quad (\text{B.57})$$

vemos que neste caso a auto-energia possui todos os processos de espalhamento entre propagações livres, ou seja, a auto-energia carrega toda a informação de muitos corpos. Uma das maneiras mais comuns de expressar a auto-energia é usando diagramas de Feynman. De forma geral, a auto-energia sempre é uma grandeza complexa que pode ser separada em uma parte real e uma imaginária, como

fizemos no exemplo anterior, de forma que

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \Lambda(\mathbf{k}, \omega) + i\Delta(\mathbf{k}, \omega). \quad (\text{B.58})$$

Ao resolvemos a equação de Dyson obtemos

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k - [\Lambda(\mathbf{k}, \omega) + i\Delta(\mathbf{k}, \omega)]}. \quad (\text{B.59})$$

Vimos no exemplo anterior que a densidade de estados nesse caso é uma lorentziana. Quando a parte real da auto-energia não é nula, temos que

$$\rho(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{\Delta(\mathbf{k}, \omega)}{[\omega - \varepsilon_k - \Lambda(\mathbf{k}, \omega)]^2 + [\Delta(\mathbf{k}, \omega)]^2}, \quad (\text{B.60})$$

que nada mais é do que uma lorentziana centrada na energia renormalizada devido interações $\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k + \Lambda(\mathbf{k}, \omega)$. Vamos tomar $\tilde{\varepsilon}_k^*$ o ponto onde seja o máximo dessa energia renormalizada, se estamos interessados em excitações próximas desse ponto podemos expandir a energia em torno dele, de forma que

$$\Lambda(\mathbf{k}, \omega) = \Lambda(\mathbf{k}, \tilde{\varepsilon}_k^*) + (\omega - \tilde{\varepsilon}_k^*) \left(\frac{\partial}{\partial \omega} \Lambda(\mathbf{k}, \omega) \right)_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k^*}.$$

Com isso temos então

$$\omega - \varepsilon_k - \Lambda(\mathbf{k}, \omega) = \omega - \varepsilon_k - \Lambda(\mathbf{k}, \tilde{\varepsilon}_k^*) - (\omega - \tilde{\varepsilon}_k^*) \left(\frac{\partial}{\partial \omega} \Lambda(\mathbf{k}, \omega) \right)_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k^*} = (\omega - \tilde{\varepsilon}_k^*) Z_k^{-1},$$

onde definimos

$$Z_k^{-1} = 1 - \left(\frac{\partial}{\partial \omega} \Lambda(\mathbf{k}, \omega) \right)_{\omega=\tilde{\varepsilon}_k^*}. \quad (\text{B.61})$$

Desta forma podemos então escrever a função de Green da forma

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z_k}{\omega - \tilde{\varepsilon}_k^* - i\tilde{\Delta}_k^*}, \quad (\text{B.62})$$

com

$$\tilde{\varepsilon}_k^* = \varepsilon_k + \Lambda(\mathbf{k}, \tilde{\varepsilon}_k^*), \quad (\text{B.63})$$

sendo a energia renormalizada e

$$\tau^{-1} = Z_k \Delta(\mathbf{k}, \tilde{\varepsilon}_k^*) \quad (\text{B.64})$$

o tempo de meia vida. Perceba que, ao fazermos essa expansão, conseguimos ainda obter características de um propagador livre, mas com parâmetros renormalizados devido as interações. Esse é o importante conceito de **líquido de Fermi** (6, 54), onde podemos conectar de forma adiabática

sistemas fermiônicos não interagentes com sistemas interagentes, mas com parâmetros renormalizados devido as interações. Neste caso, temos o que chamamos de **quase-partículas** (55, 56), uma vez que devido as interações elas não possuem exatamente as mesmas características de partículas livres, mas parâmetros renormalizados. Z_k é o chamado peso da quase-partícula e nos dá o "overlap" entre as quase-partículas e as partículas não interagentes. Note também que quanto menor for a parte imaginária da auto-energia, maior será o tempo de vida da quase-partícula. Sistemas fortemente correlacionados muitas vezes não podem ser descritos como líquidos de Fermi (6).

Como fizemos uma expansão apenas em torno do pico da lorentziana, onde processos coerentes dominam, precisamos considerar os termos não coerentes correspondentes a interações de muitos corpos mais complicadas, se quisermos descrever todos os processos mais importantes, de tal forma que a função de Green de um líquido de Fermi seja dada por

$$G(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z_k}{\omega - \tilde{\varepsilon}_k^* - i\Delta_k^*} + G_{inc}(\mathbf{k}, \omega), \quad (\text{B.65})$$

onde $G_{inc}(\mathbf{k}, \omega)$ possui as contribuições não coerentes das interações. A teoria do líquido de Fermi consegue responder, por exemplo, porque um gás de férnions não interagentes consegue explicar muito bem a maioria das propriedades dos metais usuais. Para sistemas fermiônicos unidimensionais essa teoria não se aplica. Isso acontece devido ao fato de que em uma dimensão os polos da função de Green são instáveis em todos os pontos, neste caso precisamos recorrer para a chamada teoria do líquido de Luttinger (57), a qual não abordaremos aqui.

APÊNDICE C – Sistemas fora do equilíbrio- Resposta linear

Toda teoria de funções de Green aqui apresentada só é válida para sistemas em equilíbrio. A teoria quântica de campos fora do equilíbrio é extremamente rica e interessante, contudo, não a abordaremos no presente trabalho. Para descrevermos sistemas fora do equilíbrio vamos considerar apenas a resposta linear a perturbações e então associar as médias termodinâmicas de equilíbrio com estados fora do equilíbrio via a chamada fórmula de Kubo.

C.1 Formula de Kubo

Vamos considerar um sistema em equilíbrio governado pelo Hamiltoniano H_0 , de tal forma que suas autoenergias sejam dadas pelo conjunto $\{E_n\}$ e auto estados $\{|n\rangle\}$. O valor médio de um operador A no presente caso é dada simplesmente por

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n | A | n \rangle e^{-\beta E_n}, \quad (\text{C.1})$$

ou simplesmente

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z_0} \text{Tr}[\rho_0 A].$$

Onde

$$\rho_0 = e^{-\beta H_0} = \sum_n |n\rangle \langle n| e^{-\beta E_n}, \quad (\text{C.2})$$

sendo ρ_0 chamado operador densidade e $Z_0 = \text{Tr}[\rho_0]$ a função de partição do sistema em equilíbrio. Vamos agora em $t = t_0$ ligar uma perturbação, de tal forma que agora o sistema é governado por um Hamiltoniano dependente do tempo na forma

$$H(t) = H_0 + V(t)\theta(t - t_0). \quad (\text{C.3})$$

Neste caso temos que agora os estados dependem do tempo, de tal forma que o valor médio de A depende do tempo da forma

$$\langle A(t) \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n(t) | A | n(t) \rangle e^{-\beta E_n},$$

ou simplesmente

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z_0} \text{Tr}[\rho(t)A],$$

com

$$\rho(t) = e^{-\beta H(t)} = \sum_n |n(t)\rangle \langle n(t)| e^{-\beta E_n}. \quad (\text{C.4})$$

A forma de (C.3) claramente sugere que neste caso é interessante usarmos a representação de interação, em que

$$|n(t)\rangle = e^{-iH_0 t} |\hat{n}(t)\rangle,$$

como vimos, na versão de interação temos $|\hat{n}(t)\rangle = U(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle$. Com isso podemos escrever nos leva que

$$\begin{aligned}
\langle A(t) \rangle &= \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n | U^\dagger(t, t_0) e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t} U(t, t_0) | n \rangle \\
&= \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n | U^\dagger(t, t_0) \hat{A}(t) U(t, t_0) | n \rangle,
\end{aligned}$$

onde usamos que $|\hat{n}(t_0)\rangle = |n\rangle$. Vamos considerar agora que a interação não é muito forte de maneira que possamos considerar

$$U(t, t_0) \approx 1 - i \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t'),$$

de forma que

$$\begin{aligned}
\langle n | U^\dagger(t, t_0) \hat{A}(t) U(t, t_0) | n \rangle &= \langle n | \left[1 + i \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t') \right] \hat{A}(t) \left[1 - i \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t') \right] | n \rangle \\
&= \langle n | \hat{A}(t) | n \rangle + \langle n | \left[i \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t') \hat{A}(t) \right] | n \rangle \\
&\quad - \langle n | \left[i \hat{A}(t) \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t') \right] | n \rangle + O(\hat{V}^2(t)).
\end{aligned}$$

Considerando apenas termos lineares na perturbação temos então

$$\langle A(t) \rangle = \langle A \rangle_0 - i \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{A}(t), \hat{V}(t')]_- \rangle_0, \quad (\text{C.5})$$

onde $\langle \dots \rangle_0$ denota que a média é feita sobre os estados de equilíbrio. Definindo agora a diferença entre a média fora do equilíbrio e de equilíbrio $\delta \langle A(t) \rangle = \langle A(t) \rangle - \langle A \rangle_0$, temos, finalmente,

$$\delta \langle A(t) \rangle = -i \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{A}(t), \hat{V}(t')]_- \rangle_0, \quad (\text{C.6})$$

esta é a celebrada **fórmula de Kubo**, que relaciona a diferença entre médias fora do equilíbrio e no equilíbrio em resposta linear com a perturbação. Podemos ainda escrever de uma forma mais familiar essa equação como

$$\delta\langle A(t)\rangle = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{AV}^r(t, t') e^{-\eta(t-t')}, \quad (\text{C.7})$$

onde $C_{AV}^r(t, t')$ é a chamada função de correlação retardada dada por

$$C_{AV}^r(t, t') = -i\theta(t-t')' \langle [\hat{A}(t), \hat{V}(t')]_- \rangle_0. \quad (\text{C.8})$$

Note que essa função tem a forma das funções de Green apresentadas anteriormente. Como dito anteriormente, as funções de Green no presente contexto são funções de correlação de dois operadores.

O termo $e^{-\eta(t-t')}$ aparece novamente para evitar divergências não físicas no infinito, como já vimos no caso de GR e GA. Isso fica mais claro quando passamos para o espaço das frequências a formula de Kubo. Primeiramente vamos fazer a transformada de Fourier em $V(t)$:

$$V(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} V_{\omega}.$$

Assim,

$$C_{AV}^r(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} C_{AV\omega}(t, t').$$

Substituindo a equação acima na formula de Kubo e fazendo $t_0 = -\infty$ onde não estamos preocupados com o transiente, temos

$$\delta\langle A(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{-i(\omega+i\eta)(t'-t)} C_{AV\omega}^r(t'-t),$$

onde usamos novamente que a função de correlação assim como a função de Green depende apenas da diferença $t - t'$. Temos, portanto,

$$\delta\langle A(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} C_{AV\omega}^r(\omega),$$

com

$$C_{AV\omega}^r(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)(t-t')} C_{AV\omega}^r(t-t'). \quad (\text{C.9})$$

Podemos perceber, portanto que

$$\delta\langle A(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \delta\langle \mathcal{A}(\omega) \rangle, \quad \delta\langle \mathcal{A}(\omega) \rangle = C_{AV\omega}^r(\omega). \quad (\text{C.10})$$

Veremos que quando usamos a formula de Kubo no espaço das frequências podemos utilizar o teorema de dissipação-flutuação, resultando em uma das suas mais poderosas aplicações.

C.2 Corrente de Tunelamento

Uma importante aplicação da formula de Kubo é no cálculo da chamada corrente de tunelamento. Isto porque, uma das técnicas experimentais mais poderosas para o estudo de sistemas nanoscópicos e efeitos de muitos corpos faz uso do chamado “Scanning Tunneling Microscope” (STM). Neste tipo de experimento, uma ponta de prova, geralmente feita de Tungstênio (W) ou Platina-Irídio (Pt-Ir) é colocada próxima a superfície do sistema a ser analisado (amostra). Uma diferença de potencial é então aplicada entre a amostra e a ponta de prova, de tal forma que o movimento dos elétrons crie uma corrente. Essa corrente não pode ser entendida do ponto de vista da mecânica clássica, já que a ponta e a amostra não estão conectadas em si, mas sim muito próximas. Portanto, ocorre o tunelamento dos elétrons da amostra para a ponta de prova, devido ao “orvelap” das respectivas funções de onda. O que é então medido é a condutância local de cada ponto da amostra (veja figura 32).

Experimentos de STM foram usados com muito sucesso em diversos tipos de sistemas, de pontos quânticos a supercondutores (28, 29, 58). Vamos então deduzir uma expressão para a corrente de tunelamento e então mostrar que para pequenas voltagens e temperaturas muito baixas a condutância é proporcional a densidade de estados local do sistema. Para isso vamos considerar dois sistemas (1) e (2), que possuem um termo de tunelamento, mas que suas componentes individuais sejam independentes. O Hamiltoniano desse sistema é dado por

$$H(t) = H_0 + \sum_{kp} T_{kp} c_{1k}^\dagger(t) c_{2p}(t) + T_{kp}^* c_{2p}^\dagger(t) c_{1k}(t), \quad (\text{C.11})$$

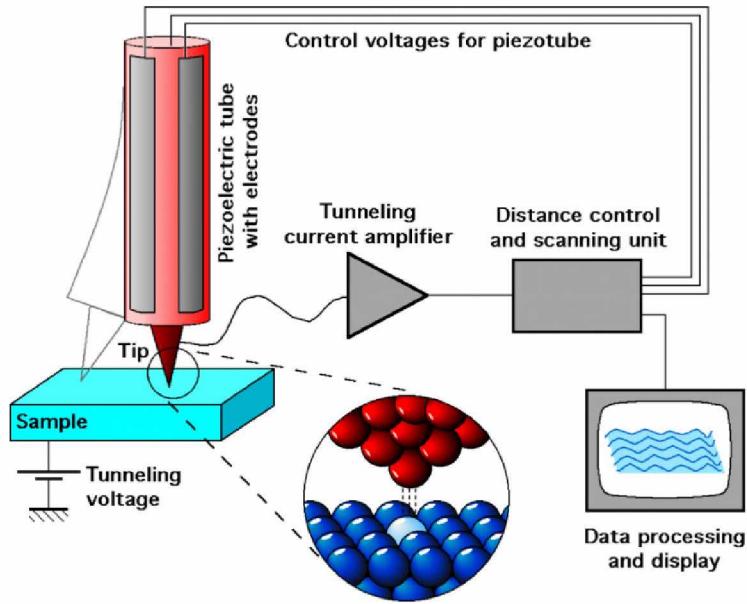


Figura 32: Representação esquemática do funcionamento do método de STM. O movimento da ponta de prova é controlado por um tubo piezoelettrico que varre a superfície da amostra. Uma diferença de potencial aplicada na amostra produz uma corrente de tunelamento mostrada em detalhes no círculo em destaque. Fonte: Michael Schmid, TU Wien. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Scanning_tunneling_microscope.

onde $H_0 = H_1 + H_2$ é a parte não perturbada do sistema, mas que contém toda eventual física de muitos corpos de cada um e $[H_1, H_2]_- = 0$, ou seja, os termos não perturbados são independentes. A única conexão entre os dois é o termo de tunelamento, que no presente caso é a própria perturbação, k e p são graus de liberdade das partículas e T_{kp} o elemento de matriz entre os dois sistemas, que nos dá a amplitude do tunelamento. Primeiramente temos que perceber que no presente caso temos flutuações de partículas e então precisamos fazer $\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu N$ ou $H_0 = \mathcal{H}_0 + \mu N$. Com isso temos então que o termo de tunelamento $H_T(t)$ na representação de interação é dado por

$$H_T(t) = e^{iH_0 t} H_T e^{-iH_0 t}. \quad (\text{C.12})$$

Como há flutuação de partículas dos dois lados temos que esta expressão se torna

$$H_T(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} e^{i(\mu_1 N_1 + \mu_2 N_2)t} H_T e^{-i\mathcal{H}_0 t} e^{-i(\mu_1 N_1 + \mu_2 N_2)t}, \quad (\text{C.13})$$

onde μ_1 e μ_2 são os potenciais químicos do sistema 1 e 2 respectivamente, o operador número $N_i = \sum_j c_{ij}^\dagger c_{ij}$, com $i = 1, 2$; $j = k, p$. E por último

$$H_T = \sum_{kp} T_{kp} c_{1k}^\dagger c_{2p} + T_{kp}^* c_{2p}^\dagger c_{1k}. \quad (\text{C.14})$$

Temos que ser cuidadosos ao calcular os termos da equação C.13, isso porque tratam-se de exponenciais de operadores. Para ilustrarmos isso vamos calcular um dos termos que aparecem no Hamiltoniano de tunelamento:

$$e^{i(\mu_1 N_1 + \mu_2 N_2)t} c_{1k}^\dagger c_{2p} e^{-i(\mu_1 N_1 + \mu_2 N_2)t} = e^{i\mu_1 N_1 t} c_{1k}^\dagger e^{i[\mu_2 N_2 - \mu_1 N_1]t} c_{2p} e^{-i\mu_2 N_2 t},$$

onde usamos que H_1 e H_2 são independentes. Lembrando que estamos trabalhando com exponenciais, o termo $c_{2p} e^{-i\mu_2 N_2 t}$ fica da forma

$$c_{2p} e^{-i\mu_2 N_2 t} = c_{2p} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\mu_2 N_2 t)^n.$$

Note que o operador c_{2p} não pode ser arbitrariamente comutado com a exponencial, para isso, note que

$$\begin{aligned} c_{2p} N_2 &= c_{2p} \sum_{p'} c_{2p'}^\dagger c_{2p'} = \sum_{p'} c_{2p'}^\dagger c_{2p'} c_{2p} \\ &= \sum_{p'} \delta_{pp'} c_{2p'} + \sum_{p \neq p'} c_{2p'}^\dagger c_{2p'} c_{2p} \\ &= (1 + \sum_{p'} c_{2p'}^\dagger c_{2p'}) c_{2p}. \end{aligned}$$

Temos, portanto,

$$c_{2p} N_2 = (1 + N_2) c_{2p}. \quad (\text{C.15})$$

Para o adjunto também é válido se notarmos que $[c_{2p} N_2]^\dagger = [(1 + N_2) c_{2p}]^\dagger$, que nos resulta então

$$N_2 c_{2p}^\dagger = c_{2p}^\dagger (1 + N_2). \quad (\text{C.16})$$

Fazendo isso n vezes na expressão da exponencial do operador, temos então que

$$c_{2p} e^{-i\mu_2 N_2 t} = c_{2p} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\mu_2 N_2 t)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [-i\mu_2 (1+N_2) t]^n c_{2p} = e^{-i\mu_2 (1+N_2) t} c_{2p},$$

note que para o termo $e^{i\mu_1 N_1 t} c_{1k}^\dagger$ usando o mesmo procedimento anterior e usando agora a relação para o adjunto temos

$$e^{i\mu_1 N_1 t} c_{1k}^\dagger = c_{1k}^\dagger e^{i\mu_1 (1+N_1) t}.$$

Com isso temos então que

$$\begin{aligned} e^{i(\mu_1 N_1 + \mu_2 N_2) t} c_{1k}^\dagger c_{2p} e^{-i(\mu_1 N_1 + \mu_2 N_2) t} &= e^{i\mu_1 N_1 t} c_{1k}^\dagger e^{i[\mu_2 N_2 - \mu_1 N_1] t} c_{2p} e^{-i\mu_2 N_2 t} \\ &= c_{1k}^\dagger e^{i\mu_1 (1+N_1) t} e^{i[\mu_2 N_2 - \mu_1 N_1] t} e^{-i\mu_2 (1+N_2) t} c_{2p} \\ &= e^{i(\mu_1 - \mu_2) t} c_{1k}^\dagger c_{2p}. \end{aligned}$$

Perceba que μ_1 e μ_2 são apenas escalares, logo exponenciais que dependam dos dois podem ser comutadas sem problema. Com isso temos finalmente que o Hamiltoniano de tunelamento será dado por:

$$H_T(t) = \sum_{kp} T_{kp} e^{i(\mu_1 - \mu_2) t} e^{i\mathcal{H}_0 t} c_{1k}^\dagger c_{2p} e^{-i\mathcal{H}_0 t} + T_{kp}^* e^{-i(\mu_1 - \mu_2) t} e^{i\mathcal{H}_0 t} c_{2p}^\dagger c_{1k} e^{-i\mathcal{H}_0 t}, \quad (\text{C.17})$$

ou simplesmente

$$\hat{H}_T(t) = \sum_{kp} T_{kp} e^{i(\mu_1 - \mu_2) t} \hat{c}_{1k}^\dagger(t) \hat{c}_{2p}(t) + T_{kp}^* e^{-i(\mu_1 - \mu_2) t} \hat{c}_{2p}^\dagger(t) \hat{c}_{1k}(t), \quad (\text{C.18})$$

com

$$\hat{c}_{1k}^\dagger(t) \hat{c}_{2p}(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} c_{1k}^\dagger c_{2p} e^{-i\mathcal{H}_0 t}, \quad \hat{c}_{2p}^\dagger(t) \hat{c}_{1k}(t) = e^{i\mathcal{H}_0 t} c_{2p}^\dagger c_{1k} e^{-i\mathcal{H}_0 t}. \quad (\text{C.19})$$

Podemos agora usar a formula de Kubo para determinar a corrente de tunelamento¹

¹Como vimos anteriormente a formula de Kubo é definida para a variação entre a quantidade física no equilíbrio e fora do mesmo, no presente caso $\delta \langle \hat{I}(t) \rangle = \langle \hat{I}(t) \rangle - \langle \hat{I} \rangle_0$. Mas como temos que no equilíbrio não há corrente $\langle I \rangle_0 = 0$, então

$$\langle \hat{I}(t) \rangle = -i \int_{t_0}^{\infty} dt' \theta(t-t') \langle [\hat{I}(t), \hat{H}_T(t')]_- \rangle e^{-\eta(t-t')}, \quad (\text{C.20})$$

onde temos que $I_{ej}(t) = -eI_j(t)$, $j = 1, 2$ e $I_j(t) = \dot{N}_j(t)$. Da equação de Heisenberg temos que²

$$\dot{N}_j = \frac{i}{\hbar} [H(t), N_j(t)]_-.$$

Vamos calcular para $j = 1$ e segue de forma análoga para o sistema 2. Temos então que

$$\begin{aligned} [H(t), N_1(t)]_- &= \sum_{kp} \sum_{k'} [T_{kp} c_{1k}^\dagger(t) c_{2p}(t) + T_{kp}^* c_{2p}^\dagger(t) c_{1k}(t), c_{1k'}^\dagger(t) c_{1k'}(t)]_- \\ &= \sum_{kp} \sum_{k'} T_{kp} [c_{1k}^\dagger(t) c_{2p}(t), c_{1k'}^\dagger(t) c_{1k'}(t)]_- + T_{kp}^* [c_{2p}^\dagger(t) c_{1k}(t), c_{1k'}^\dagger(t) c_{1k'}(t)]_-. \end{aligned}$$

Lembrando que os elétrons são férmions e portanto respeito as relações canônicas de anti-comutação e usando que $[a, bc]_- = [a, b]_+ c - b[a, c]_+$ temos que

$$\begin{aligned} [c_{1k}^\dagger(t) c_{2p}(t), c_{1k'}^\dagger(t) c_{1k'}(t)]_- &= [c_{1k}^\dagger(t) c_{2p}(t), c_{1k'}^\dagger(t)]_+ c_{1k'}(t) - c_{1k'}^\dagger(t) [c_{1k}^\dagger(t) c_{2p}(t),]_+ c_{1k'}(t) \\ &= -c_{1k'}^\dagger(t) c_{2p}(t) \delta_{kk'}, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} [c_{2p}^\dagger(t) c_{1k}(t), c_{1k'}^\dagger(t) c_{1k'}(t)]_- &= [c_{2p}^\dagger(t) c_{1k}(t), c_{1k'}^\dagger(t)]_+ c_{1k'}(t) - c_{1k'}^\dagger(t) [c_{2p}^\dagger(t) c_{1k}(t),]_+ c_{1k'}(t) \\ &= c_{2p}^\dagger(t) c_{1k'}(t) \delta_{kk'}. \end{aligned}$$

Com isso ficamos com

$$[H(t), N_1(t)]_- = - \sum_{kp} [T_{kp} c_{1k}^\dagger(t) c_{2p}(t) - T_{kp}^* c_{2p}^\dagger(t) c_{1k}(t)],$$

temos então que

$$\delta \langle \hat{I}(t) \rangle = \langle \hat{I}(t) \rangle.$$

²Perceba que recuperamos \hbar afim de expressar o quanta da condutância mais adiante.

$$I_1(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{kp} [T_{kp} c_{1k}^\dagger(t) c_{2p}(t) - T_{kp}^* c_{2p}^\dagger(t) c_{1k}(t)]. \quad (\text{C.21})$$

Podemos ainda escrever este resultado em termos dos operadores \hat{c}_{1k} e \hat{c}_{2p} da mesma forma que fizemos para o Hamiltoniano de tunelamento anteriormente. O resultado é direto e tem a forma

$$\hat{I}_1(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{kp} [T_{kp} e^{i(\mu_1 - \mu_2)t} \hat{c}_{1k}^\dagger(t) \hat{c}_{2p}(t) - T_{kp}^* e^{-i(\mu_1 - \mu_2)t} \hat{c}_{2p}^\dagger(t) \hat{c}_{1k}(t)]. \quad (\text{C.22})$$

A fim de simplificarmos a notação vamos definir:

$$\hat{L}(t) = \sum_{kp} \hat{c}_{1k}^\dagger(t) \hat{c}_{2p}(t), \quad \hat{L}^\dagger(t) = \sum_{kp} T_{kp}^* \hat{c}_{2p}^\dagger(t) \hat{c}_{1k}(t). \quad (\text{C.23})$$

Assim,

$$\hat{I}_1(t) = -\frac{i}{\hbar} (\hat{L}(t) e^{i(\mu_1 - \mu_2)t} - \hat{L}^\dagger(t) e^{-i(\mu_1 - \mu_2)t}), \quad \hat{H}_T(t) = \hat{L}(t) e^{i(\mu_1 - \mu_2)t} + \hat{L}^\dagger(t) e^{-i(\mu_1 - \mu_2)t}. \quad (\text{C.24})$$

Substituindo as expressões acima em

$$\langle \hat{I}_1(t) \rangle = -i \int_{t_0}^{\infty} dt' \theta(t-t') \langle [\hat{I}_1(t), \hat{H}_T(t')] \rangle e^{-\eta(t-t')},$$

e definindo $\mu_1 - \mu_2 = eV$, ou seja, a diferença de energia dos dois lados é simplesmente a voltagem aplicada para o surgimento da corrente. Obtendo

$$\langle \hat{I}_1(t) \rangle = \langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle + \langle \hat{I}_{1J}(t) \rangle, \quad (\text{C.25})$$

com

$$\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^{\infty} dt' \theta(t-t') \left[e^{-ieV(t'-t)} \langle \hat{L}^\dagger(t), \hat{L}(t') \rangle - e^{ieV(t'-t)} \langle \hat{L}(t), \hat{L}^\dagger(t') \rangle \right] e^{-\eta(t-t')} \quad (\text{C.26})$$

e

$$\langle \hat{I}_{1S}(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^{\infty} dt' \theta(t-t') \left[e^{ieV(t'+t)} \langle \hat{L}^\dagger(t), \hat{L}^\dagger(t') \rangle - e^{-ieV(t'+t)} \langle \hat{L}(t), \hat{L}(t') \rangle \right] e^{-\eta(t-t')}. \quad (\text{C.27})$$

O termo $\langle \hat{I}_{1S}(t) \rangle$ está relacionado com junções supercondutoras e dá origem a chamada corrente de Josephson, que por sua vez é proporcional ao seno da diferença de fase dos parâmetros de ordem dos supercondutores. No presente caso, sempre consideraremos o parâmetro de ordem puramente real, escolhendo a fase sempre nula e portanto não haverá corrente de Josephson. Vamos nos concentrar no termo $\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle$. Perceba que o segundo membro de (C.26) é simplesmente o complexo conjugado do primeiro, logo com isso podemos escrever:

$$\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{2}{\hbar} \text{Re} \int_{t_0}^{\infty} dt' \theta(t-t') e^{-ieV(t'-t)} \langle \hat{L}^\dagger(t), \hat{L}(t') \rangle e^{-\eta(t-t')}. \quad (\text{C.28})$$

Colocando de forma explícita $\hat{L}^\dagger(t)$ e $\hat{L}(t')$ temos que

$$\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{2}{\hbar} \text{Re} \int_{t_0}^{\infty} dt' \theta(t-t') \sum_{kp,k'p'} T_{kp}^* T_{k'p'} e^{-ieV(t'-t)} \langle [\hat{c}_{2p}^\dagger(t) \hat{c}_{1k}(t), \hat{c}_{1k'}^\dagger(t') \hat{c}_{2p'}(t')] \rangle e^{-\eta(t-t')}.$$

Como já dissemos os dois lados são independentes com exceção com o termo de tunelamento, com isso podemos então escrever

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{2}{\hbar} \text{Re} \int_{t_0}^{\infty} dt' \theta(t-t') \sum_{kp} |T_{kp}|^2 e^{-ieV(t'-t)} & \left[\langle c_{1k}(t) c_{1k}^\dagger(t') \rangle \langle c_{2p}^\dagger(t) c_{2p}(t') \rangle \right. \\ & \left. - \langle c_{1k}^\dagger(t') c_{1k}(t) \rangle \langle c_{2p}(t') c_{2p}^\dagger(t) \rangle \right] e^{-\eta(t-t')}. \end{aligned}$$

Note que na expressão acima apareceram simplesmente a definição das funções de Green maior e menor

$$G_i^>(t; t') = -i \langle c_i(t) c_i^\dagger(t') \rangle; \quad G_i^<(t; t') = i \langle c_i^\dagger(t') c_i(t) \rangle. \quad (\text{C.29})$$

Com isso temos que

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{2}{\hbar} \text{Re} \int_{t_0}^{\infty} dt' \theta(t-t') \sum_{kp} |T_{kp}|^2 e^{-ieV(t'-t)} & \left[G_{1k}^>(t-t') G_{2p}^<(t'-t) \right. \\ & \left. - G_{1k}^<(t-t') G_{2p}^>(t'-t) \right] e^{-\eta(t-t')}, \end{aligned}$$

onde já usamos o fato das funções de Green dependerem apenas da diferença dos tempos (veja seção de funções de Green). Fazendo agora a mudança $t' \rightarrow t' + t$, temos que $t - t' \rightarrow -t'$ e $t' - t \rightarrow t'$, obtemos

$$\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{2}{\hbar} \sum_{kp} |T_{kp}|^2 \operatorname{Re} \int_{t_0}^0 dt' e^{-ieVt'} \left[G_{1k}^>(-t') G_{2p}^<(t') - G_{1k}^<(-t') G_{2p}^>(t') \right] e^{\eta t'}. \quad (\text{C.30})$$

Essa importante expressão mostra o poder da fórmula de Kubo. Se não estivermos interessados no comportamento de transiente podemos fazer $t_0 = -\infty$, e com isso ficarmos com

$$\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{2}{\hbar} \sum_{kp} |T_{kp}|^2 \operatorname{Re} \int_{-\infty}^0 dt' e^{-ieVt'} \left[G_{1k}^>(-t') G_{2p}^<(t') - G_{1k}^<(-t') G_{2p}^>(t') \right] e^{\eta t'}.$$

O interessante neste caso é que podemos então realizar uma transformada de Fourier e obtermos a expressão

$$\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \sum_{kp} |T_{kp}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left[G_{1k}^>(\omega) G_{2p}^<(\omega + eV) - G_{1k}^<(\omega) G_{2p}^>(\omega + eV) \right], \quad (\text{C.31})$$

onde usamos que $\int dt e^{-i\omega t} f(t)g(-t) = \int (d\omega'/2\pi) f(\omega + \omega')g(\omega)$ e que os produtos $G_{1k}^>(-t')G_{2p}^<$ e $G_{1k}^<(-t')G_{2p}^>(t')$ são puramente reais, uma vez que as funções de Green maior e menor são puramente imaginárias. Podemos agora utilizar o teorema de dissipação-flutuação expresso por

$$G^>(\omega) = -[1 - f_+(\omega)]i\mathcal{A}(\omega); \quad G^<(\omega) = f_+(\omega)i\mathcal{A}(\omega). \quad (\text{C.32})$$

Com isso temos que

$$G_{1k}^>(\omega) G_{2p}^<(\omega + eV) = A_{1k}(\omega) A_{2p}(\omega + eV) [1 - f_+(\omega)] f_+(\omega + eV), \quad (\text{C.33})$$

$$G_{1k}^<(\omega) G_{2p}^>(\omega + eV) = A_{1k}(\omega) A_{2p}(\omega + eV) f_+(\omega) [1 - f_+(\omega + eV)]. \quad (\text{C.34})$$

Dai podemos escrever

$$G_{1k}^>(\omega) G_{2p}^<(\omega + eV) - G_{1k}^<(\omega) G_{2p}^>(\omega + eV) = A_{1k}(\omega) A_{2p}(\omega + eV) [f_+(\omega + eV) - f_+(\omega)].$$

Por fim escrevemos

$$\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \sum_{kp} |T_{kp}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} A_{1k}(\omega) A_{2p}(\omega + eV) [f_+(\omega + eV) - f_+(\omega)]. \quad (\text{C.35})$$

A expressão acima mostra uma das mais poderosas aplicações do teorema de dissipação-flutuação. Perceba que conseguimos expressar uma grandeza fora do equilíbrio ($\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle$) em função totalmente de funções definidas no equilíbrio ($A_{1k}(\omega), A_{2p}(\omega)$).

Podemos ainda expressar nossos resultados em função da densidade de estados, para isso vamos considerar $|T_{kp}|^2 = |T|^2$ e usar que

$$\sum_k A_{1k}(\omega) = 2\pi\rho_1(\omega); \quad \sum_p A_{2p}(\omega + eV) = 2\pi\rho_2(\omega + eV). \quad (\text{C.36})$$

Então temos que

$$\langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} |T|^2 4\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rho_1(\omega) \rho_2(\omega + eV) [f_+(\omega + eV) - f_+(\omega)]. \quad (\text{C.37})$$

Por outro lado, lembremos que $\langle \hat{I}_{1eN}(t) \rangle = -e \langle \hat{I}_{1N}(t) \rangle$, então temos

$$\langle \hat{I}_{1eN}(t) \rangle = -\frac{e}{\hbar} |T|^2 4\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rho_1(\omega) \rho_2(\omega + eV) [f_+(\omega + eV) - f_+(\omega)]. \quad (\text{C.38})$$

Vamos agora considerar o caso que a tensão aplicada seja muito pequena $eV \ll 1$, logo neste caso temos podemos escrever que

$$f_+(\omega + eV) \approx f_+(\omega) + \frac{\partial f_+(\omega + eV)}{\partial \omega} eV.$$

Portanto, temos que

$$\langle \hat{I}_{1eN}(t) \rangle = \frac{e^2}{\hbar} |T|^2 4\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \rho_1(\omega) \rho_2(\omega + eV) \left[-\frac{\partial f_+(\omega + eV)}{\partial \omega} \right] V.$$

Mas sabemos que em resposta linear temos $G_1 = d\langle \hat{I}_{1eN}(t) \rangle / dV$, com isso temos então a fórmula para

a condutância diferencial dada por:

$$G_1(T) = G_0|T|^2 4\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[-\frac{\partial f_+(\omega + eV, T)}{\partial \omega} \right] \rho_1(\omega) \rho_2(\omega + eV), \quad (\text{C.39})$$

onde $G_0 = e^2/h$ é o quanta de condutância. Lembrando que todos os cálculos são análogos caso escolhêssemos usar a corrente do sistema 2, e explicitamos que a função de partição depende da temperatura. Isso porque para $T = 0$ temos que

$$-\frac{\partial f_+(\omega + eV, T = 0)}{\partial \omega} = \delta(\omega + eV).$$

Com isso, obtemos simplesmente

$$G_1 = G_0|T|^2 4\pi^2 \rho_1(-eV) \rho_2(0); \quad T = 0. \quad (\text{C.40})$$

É interessante notar que, por exemplo, caso o sistema 1 seja um metal comum, de tal forma que possamos fazer $\rho_1(-eV) \approx c$, onde c é uma constante, obtemos que $G_1 \propto \rho_2(0)$. Logo, neste caso podemos usar a condutância do sistema 1 para estudar a densidade de estados do sistema 2. Imagine o caso onde o sistema 1 seja a ponta de prova do STM e o sistema 2 seja um sistema qualquer, que inclusive pode ser um sistema interagente de muitos corpos. Podemos então obter as informações da sua densidade de estados via experimentos de STM, caracterizando então uma importante aplicação do mesmo.

Quando tratamos um dos sistemas como um metal usual com densidade de estados constante ρ_0 a zero bias ($eV = 0$) e levando em conta os canais de spin, temos que a expressão (C.39) se torna uma equação do tipo Landauer dada por

$$G(T) = \pi \Gamma G_0 \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[-\frac{\partial f_+(\omega, T)}{\partial \omega} \right] \rho_{\sigma}(\omega), \quad (\text{C.41})$$

com $\Gamma = 2\pi\rho_0|T|^2$. Essa importante formula também foi deduzida de forma mais geral por Meir e Wingreen usando o formalismo de Keldish (59).

Referências Bibliográficas

- 1 H.Kamerlingh Onnes. Further experiments with liquid helium. c. on the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures etc. iv. the resistance of pure mercury at helium temperatures. In Kostas Gavroglu and Yorgos Goudaroulis, editors, *Through Measurement to Knowledge*, volume 124 of *Boston Studies in the Philosophy of Science*, pages 261–263. Springer Netherlands, 1991.
- 2 W. Meissner and R. Ochsenfeld. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*, 21:787–788, nov 1933. Provided by the SAO/NASA Astrophysics Data System.
- 3 J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, Dec 1957.
- 4 L.N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Physical Review*, 104:1189–1190, nov 1956.
- 5 P. Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 2015.
- 6 A.F. Andreev. Thermal conductivity of the intermediate state of superconductors. *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.*, Vol: 46, May 1964.
- 7 A Yu Kitaev. Unpaired majorana fermions in quantum wires. *Physics-Uspekhi*, 44(10S):131, 2001.
- 8 Jason Alicea. New directions in the pursuit of majorana fermions in solid state systems. *Reports on Progress in Physics*, 75(7):076501, 2012.
- 9 Martin Leijnse and Karsten Flensberg. Introduction to topological superconductivity and majorana fermions. *Semiconductor Science and Technology*, 27(12):124003, 2012.
- 10 Ettore Majorana. Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone. *Nuovo Cimento*, 1937.
- 11 Frank Wilczek. Majorana returns. *Nature Physics*, 5(9):614–618, 2009.
- 12 Robert F. Service. Search for majorana fermions nearing success at last? *Science*, 332(6026):193–195, 2011.
- 13 M. Z. Hasan and C. L. Kane. *Colloquium* : Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82:3045–3067, Nov 2010.
- 14 Complete list of 1 d landau's works. *Physics-Uspekhi*, 41(6):621, 1998.

- 15 G.E. Volovik. *The Universe in a Helium Droplet*. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 2003.
- 16 Jason Alicea. Majorana fermions in a tunable semiconductor device. *Phys. Rev. B*, 81:125318, Mar 2010.
- 17 Tudor D. Stanescu, Roman M. Lutchyn, and S. Das Sarma. Majorana fermions in semiconductor nanowires. *Phys. Rev. B*, 84:144522, Oct 2011.
- 18 D. Chevallier, P. Simon, and C. Bena. From andreev bound states to majorana fermions in topological wires on superconducting substrates: A story of mutation. *Phys. Rev. B*, 88:165401, Oct 2013.
- 19 Anatoly Golub. Multiple andreev reflections in *s*-wave superconductor quantum dot topological superconductor tunnel junctions and majorana bound states. *Phys. Rev. B*, 91:205105, May 2015.
- 20 A. Marcovich and T. Shinn. *Toward a New Dimension: Exploring the Nanoscale*. OUP Oxford, 2014.
- 21 Michael D Schroer and Jason R Petta. Quantum dots: time to get the nukes out. *Nature Physics*, 4(7):516–518, 2008.
- 22 Leo Kouwenhoven and Charles Marcus. Quantum dots. *Physics World*, 11(6):35, 1998.
- 23 Yoichiro Nambu. Quasi-particles and gauge invariance in the theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 117:648–663, Feb 1960.
- 24 P. W. Anderson. Plasmons, gauge invariance, and mass. *Phys. Rev.*, 130:439–442, Apr 1963.
- 25 P.G de Gennes. Boundary effects in superconductors. *Reviews of Modern Physics*, 36(1):225+, January 1964.
- 26 D N Zubarev. Double-time green functions in statistical physics. *Soviet Physics Uspekhi*, 3(3):320, 1960.
- 27 Ivar Giaever. Energy gap in superconductors measured by electron tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, 5:147–148, Aug 1960.
- 28 J. R. Schrieffer, D. J. Scalapino, and J. W. Wilkins. Effective tunneling density of states in superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 10:336–339, Apr 1963.
- 29 P.G. de Gennes. *Superconductivity of metals and alloys*. Frontiers in physics. W.A. Benjamin, 1966.
- 30 D. A. Ivanov. Non-abelian statistics of half-quantum vortices in *p*-wave superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 86:268–271, Jan 2001.
- 31 Yaakov E. Kraus, Assa Auerbach, H. A. Fertig, and Steven H. Simon. Majorana fermions of a two-dimensional $p_x + ip_y$ superconductor. *Phys. Rev. B*, 79:134515, Apr 2009.

- 32 Sankar Das Sarma, Chetan Nayak, and Sumanta Tewari. Proposal to stabilize and detect half-quantum vortices in strontium ruthenate thin films: Non-abelian braiding statistics of vortices in a $p_x + ip_y$ superconductor. *Phys. Rev. B*, 73:220502, Jun 2006.
- 33 B.A. Bernevig and T.L. Hughes. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, 2013.
- 34 Qian Niu, D. J. Thouless, and Yong-Shi Wu. Quantized hall conductance as a topological invariant. *Phys. Rev. B*, 31:3372–3377, Mar 1985.
- 35 David R. Nelson and J. M. Kosterlitz. Universal jump in the superfluid density of two-dimensional superfluids. *Phys. Rev. Lett.*, 39:1201–1205, Nov 1977.
- 36 F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015–2018, Oct 1988.
- 37 F. D. M. Haldane. Nonlinear field theory of large-spin heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis néel state. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1153–1156, Apr 1983.
- 38 D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, Aug 1982.
- 39 R. B. Laughlin. Anomalous quantum hall effect: An incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1395–1398, May 1983.
- 40 M. Nakahara. *Geometry, Topology and Physics*. Taylor & Francis, 2 edition, June 2003.
- 41 Yu A Bychkov and E I Rashba. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 17(33):6039, 1984.
- 42 Andrew C Potter and Patrick A Lee. Majorana end states in multiband microstructures with rashba spin-orbit coupling. *Physical Review B*, 83(9):094525, 2011.
- 43 Diego Rainis, Luka Trifunovic, Jelena Klinovaja, and Daniel Loss. Towards a realistic transport modeling in a superconducting nanowire with majorana fermions. *Physical Review B*, 87(2):024515, 2013.
- 44 Jie Liu, Andrew C. Potter, K. T. Law, and Patrick A. Lee. Zero-bias peaks in the tunneling conductance of spin-orbit-coupled superconducting wires with and without majorana end-states. *Phys. Rev. Lett.*, 109:267002, Dec 2012.
- 45 Annica M. Black-Schaffer. Self-consistent superconducting proximity effect at the quantum spin hall edge. *Phys. Rev. B*, 83:060504, Feb 2011.
- 46 Tudor D. Stanescu, Jay D. Sau, Roman M. Lutchyn, and S. Das Sarma. Proximity effect at the superconductor-topological insulator interface. *Phys. Rev. B*, 81:241310, Jun 2010.
- 47 Liang Fu and C. L. Kane. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 100:096407, Mar 2008.

- 48 E. Vernek, P. H. Penteado, A. C. Seridonio, and J. C. Egues. Subtle leakage of a majorana mode into a quantum dot. *Phys. Rev. B*, 89:165314, Apr 2014.
- 49 Mariana M. Odashima, Beatriz G. Prado, and E. Vernek. Pedagogical introduction to equilibrium Green's functions: condensed-matter examples with numerical implementations. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 39, 00 2017.
- 50 V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven. Signatures of majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. *Science*, 336(6084):1003–1007, 2012.
- 51 David A. Ruiz-Tijerina, E. Vernek, Luis G. G. V. Dias da Silva, and J. C. Egues. Interaction effects on a majorana zero mode leaking into a quantum dot. *Phys. Rev. B*, 91:115435, Mar 2015.
- 52 A. V. Balatsky, I. Vekhter, and Jian-Xin Zhu. Impurity-induced states in conventional and unconventional superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 78:373–433, May 2006.
- 53 Gerald D. Mahan. *Many Particle Physics*. Springer, third edition, January 2000.
- 54 D.T. Haar. *Collected Papers of L.D. Landau*. Elsevier Science, 2013.
- 55 David Pines and David Bohm. A collective description of electron interactions: II. collective vs individual particle aspects of the interactions. *Phys. Rev.*, 85:338–353, Jan 1952.
- 56 J. M. Luttinger. Fermi surface and some simple equilibrium properties of a system of interacting fermions. *Phys. Rev.*, 119:1153–1163, Aug 1960.
- 57 I. Giaever and H. R. Zeller. Superconductivity of small tin particles measured by tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, 20:1504–1507, Jun 1968.
- 58 Yigal Meir and Ned S. Wingreen. Landauer formula for the current through an interacting electron region. *Phys. Rev. Lett.*, 68:2512–2515, Apr 1992.