

UNIVERSIDADE FEDERAL DE VIÇOSA

SIDNEI FERNANDES DE SOUZA

UM PASSEIO PELOS MODOS DE MAJORANA EM
SUPERCONDUTORES QUIRAIS

VIÇOSA - MINAS GERAIS
2022

SIDNEI FERNANDES DE SOUZA

UM PASSEIO PELOS MODOS DE MAJORANA EM
SUPERCONDUTORES QUIRAIS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Jakson Miranda Fonseca

VIÇOSA - MINAS GERAIS
2022

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

T

S729p
2022 Souza, Sidnei Fernandes de, 1997-
Um passeio pelos modos de Majorana em supercondutores
quirais / Sidnei Fernandes de Souza. – Viçosa, MG, 2022.
1 dissertação eletrônica (66 f.): il.

Inclui apêndices.

Orientador: Jakson Miranda Fonseca.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Física, 2022.

Referências bibliográficas: f. 64-66.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2022.187>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Teoria quântica. 2. Supercondutores. 3. Matéria
condensada. 4. Física do estado sólido. I. Fonseca, Jakson
Miranda, 1984-. II. Universidade Federal de Viçosa.
Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física.
III. Título.

CDD 22. ed. 535.15

Bibliotecário(a) responsável: Renata de Fátima Alves CRB6/2578

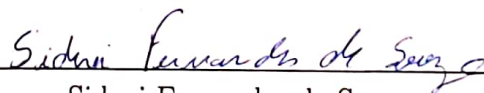
SIDNEI FERNANDES DE SOUZA

UM PASSEIO PELOS MODOS DE MAJORANA EM
SUPERCONDUTORES QUIRAIS

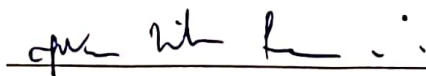
Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 24 de fevereiro de 2022.

Assentimento:



Sidnei Fernandes de Souza
Autor



Jakson Miranda Fonseca
Orientador

Agradecimentos

Agradeço primeiramente aos meus pais, Sônia e Daniel, e a minha família por tudo o que fizeram por mim. Agradeço a minha noiva, amor da minha vida, meu raio de Sol, minha estrela da manhã, Kerollen, por ter sido uma companheira fantástica ao longo desses dois anos de mestrado. Agradeço aos meus Professores de ensino fundamental e médio da Escola Professor Cícero Torres Galindo pela formação básica, e, em especial, Professores Flávio e Maurício por servirem de inspiração. Agradeço também aos Professores do Departamento de Matemática, Física e Estatística do IF Sudeste-MG (Poliana, Marcos Barros, Dênis, Paula, Rodrigo, Liliane, Marcelo, Damião, Alberto, Cristina, Fernando, Ruy e Roberto) pela minha formação em Matemática. Em especial, agradeço ao Professor Damião, pelos trabalhos que desenvolvemos juntos e por me reaproximar da Física, ao professor Marcelo pela influência no modo de atacar um problema matemático ("*Matemática não é mágica, mas podemos fazer as coisas aparecerem*") e a Professora Paula por ser uma brilhante educadora e pelos conselhos dados a mim. Agradeço aos meus amigos Vitor (Carioca), Matheus, Jorge (Jim), Robson (Robinho) e Alice, pelos bons momentos juntos e pela ajuda e apoio em todos os momentos. Agradeço aos Professores Marcelo Lobato, Sérgio, Márcio, Tiago José, Winder, Silvio, Clodoaldo e Jakson do Departamento de Física da Universidade Federal de Viçosa, pela formação no Mestrado. Agradeço na figura do Professor Márcio à coordenação do Programa de Pós Graduação e Física pela oportunidade dada a mim de cursar o Mestrado. Agradeço aos meus colegas de Pós Graduação pelas colaborações durante o Mestrado. Agradeço ao Allison pela colaboração e disponibilidade todas as vezes que necessitei na presente dissertação. Agradeço ao Professor Jakson pela orientação no trabalho durante o mestrado. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

A matemática, vista corretamente, possui não apenas verdade, mas também suprema beleza - uma beleza fria e austera, como a da escultura - Bertrand Russell

Resumo

SOUZA, Sidnei Fernandes, M.Sc, Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2022. **Um passeio pelos modos de Majorana em supercondutores quirais**. Orientador: Jackson Miranda Fonseca.

A busca por sistemas que exibam Modos Zero de Majorana (MZM) têm por principal justificativa o apelo tecnológico, em especial, a computação quântica. A existência destas partículas emergentes seria formidável, pois além delas obedecerem a estatística de troca não Abelian, que é uma característica interessantíssima para uma computação quântica topológica, elas são protegidas topologicamente, o que torna possível a construção de uma computação mais estável. Modos de Majorana são em essência partículas emergentes, que possuem características análogas ao Férmion de Majorana. MZM desacoplados espacialmente podem ser encontrados em sistemas supercondutores na fase topológica, visto que eles são a sobreposição de iguais graus de liberdade entre elétrons e buracos. Assim a grande questão é caracterizar a fase trivial e topológica desses sistemas, onde tal transição é caracterizada pela mudança de um invariante topológico antes e depois do fechamento do gap. Podemos obter informações relevantes do sistema a partir de propriedades termodinâmicas como a entropia, a densidade de partículas e a energia do sistema, tanto na fase trivial como na topológica. Todas essas relações podem ser derivadas da função partição. Como estamos interessados em identificar a emergência de MZM na fase topológica do sistema, devemos tomar a Hamiltoniana na base de Majorana e obter a função partição. De posse do potencial efetivo encontramos a forma da dependência do parâmetro supercondutor com a temperatura. Outro resultado interessante é a densidade de partículas, que no estado trivial é sempre positiva (elétrons) ou negativa (buracos) enquanto no estado topológico há uma coexistência entre elétrons e buracos. Portanto, corroborando com a existência de MZM no estado topológico. Ainda calculamos o valor do parâmetro de interação g_C crítico para Sr_2RuO_4 e comparamos com os resultados experimentais, obtendo satisfatória concordância entre a teoria e a prática.

Palavras-chave: Modos de Majorana. Supercondutores Quirais. Potencial Efetivo.

Abstract

SOUZA, Sidnei Fernandes, M.Sc, Universidade Federal de Viçosa, February 2022. **A tour of Majorana modes on chiral superconductors.** Adviser: Jakson Miranda Fonseca.

The search for systems that exhibit Majorana Zero Modes (MZM) has as main justification the technological appeal, in particular, quantum computing. The existence of these emergent particles would be formidable, because in addition to obeying the non-Abelian exchange statistics, which is a very interesting feature for a topological quantum computation, they are topologically protected, which makes it possible to build a more stable computation. Majorana modes are essentially emergent particles, which have characteristics analogous to Majorana fermion. Spatially decoupled MZM can be found in superconducting systems in the topological phase, since they are the superposition of equal degrees of freedom between electrons and holes. So the big question is to characterize the trivial and topological phase of these systems, where such a transition is characterized by the change of a topological invariant before and after closing the gap. We can obtain relevant information about the system from thermodynamic properties such as entropy, particle density and energy of the system, both in the trivial and topological phases. All these relationships can be derived from the partition function. As we are interested in identifying the emergence of MZM in the topological phase of the system, we must take the Hamiltonian in the Majorana basis and obtain the partition function. In possession of the effective potential, we find the form of the dependence of the superconducting parameter on temperature. Another interesting result is the particle density, which in the trivial state is always positive (electrons) or negative (holes) while in the topological state there is a coexistence between electrons and holes. Therefore, corroborating the existence of MZM in the topological state. We also calculated the value of the critical g_C interaction parameter for Sr_2RuO_4 and compared it with the experimental results, obtaining satisfactory agreement between theory and practice.

Keywords: Majorana modes. Chiral superconductors. Effective Potential.

Lista de Figuras

1.1	Gráfico da resistividade elétrica em função da temperatura para o comportamento metálico (vermelho) e supercondutor (azul).	11
1.2	Uma caneca sendo deformada em uma rosquinha preservando o buraco (Fonte: referência [11]).	12
2.1	(a) MZM na fase trivial (b) Observe que no estado topológico MZM vizinhos encontram-se ligados deixando os das extremidades da cadeia livres (c) Diagrama da fase trivial e topológica onde a transição ocorre em $\mu = \pm 2t$ (Fonte: referência [18]).	19
2.2	Exemplos de trocas não-Abelianas (Fonte: referência [19]).	22
2.3	Modelo de Fu e Kane: um supercondutor topológico acoplado a isolante topológico (Fonte: referência [19]).	22
3.1	Curvas de magnetização para supercondutores do Tipo I e Tipo II (Fonte: referência [24]).	25
3.2	Curvas de magnetização para supercondutores (Chumbo e índio a $4,2K$ do Tipo I e com dopagem. (A) Chumbo, (B) Chumbo-2,8% índio, (C) Chumbo-8,23% índio e (D) Chumbo-20,4% índio (Fonte: referência [24]).	26
3.3	Representação da formação de pares de Cooper (Fonte: referência [6]).	30
3.4	Diagrama de Feynman para interação elétron - fônon - elétron (Fonte: referência [30]).	30
3.5	(a-c) Ilustrações das estruturas de gap supercondutores correspondentes a várias simetrias de gap. (d-f) Desenhos esquemáticos de superfícies de Fermi bidimensionais e das zonas de Brillouin, onde as linhas verdes indicam os nós no parâmetro de ordem supercondutora e os círculos azuis/vermelhos destacam os diferentes sinais do parâmetro de ordem supercondutora (Fonte: referência [62]).	32
3.6	A forma da parte orbital do parâmetro de ordem de um par de Cooper, ou gap com diferentes simetrias de pareamento. (a) A onda s isotrópica, a magnitude do intervalo é isotrópica em toda a superfície de Fermi. (b) A função gap da onda p com reversão de sinal nas duas superfícies. (c) A função gap de onda d com sinal mudando alternadamente de uma superfície para outra (Fonte: referência [61]).	32
3.7	Espectro de energia para supercondutor quiral de onda p (Gráfico adimensional).	37

3.8	(a) Energia cinética para um gás de elétrons livres 2D que exibe supercondutividade $k_x + ik_y$. Para $\mu' < 0$ temos a fase trivial (b) e para $\mu' > 0$ temos a fase topológica (c) (Fonte: referência [41]).	40
3.9	(a) Um supercondutor topológico quirral que suporta modos de Majorana na borda em seus limites interno e externo. (b) Espectro de energia versus o momento angular n para os estados interno (vermelho círculos) e estados de aresta externo (círculos azuis) na configuração de (a). Aqui n assume valores de meio inteiro porque os modos de Majorana exibem condições de contorno anti-periódicas no anel. Um fluxo de $\frac{hc}{2e}$ perfura a região central trivial como em (c) introduz um corte de ramo (linha ondulada) que, quando cruzada, leva a uma mudança de sinal para modos de Majorana na borda. O fluxo, portanto, muda as condições de contorno para periódico e muda n para valores inteiros. Isso leva ao espectro em (d), que inclui os MZM γ_1 e γ_2 localizados em as bordas internas e externas. A configuração dos dois vórtices em (e) suporta um MZM localizado em torno de cada pulso, enquanto o limite externo permanece aberto (Fonte: referência [41]).	41
4.1	(a) Diagrama de fase supercondutor, onde $ \Delta'_0 = \Delta_0 / \Delta_c $ e $T' = T/T_c$. (b) Coportamento da $ \Delta_0 _C/g$ para valores de Λ não negativo.	48
4.2	Gráfico da densidade de partículas para diversos valores de (μ, t, Δ) . Note que para (a) $(-1, 0.5, 0.5)$ e (b) $(1, 0.5, 0.5)$ temos densidade positiva e negativa coexistindo (fase topológica), enquanto para (c) $(-3, 0.5, 0.5)$ temos apenas densidade negativa e (d) $(3, 0.5, 0.5)$ densidade positiva (fase trivial).	50
4.3	Gráfico do calor específico em função da temperatura (adimensional). O gráfico em azul é o nosso resultado (4.29) e em vermelho obtido a partir da referência [23]. Ambos foram plotados considerando $ \Delta_0 = t = 1$	51
4.4	Estrutura cristalina e a primeira zona de Brillouin do Sr_2RuO_4 (Fonte: referência [63]).	52
4.5	Gráfico do parâmetro supercondutor máximo em função do parâmetro de interação elétron-elétron em unidades de eV para o Sr_2RuO_4	54

Sumário

1	Introdução e motivação	10
2	Modos de Majorana	14
2.1	Introdução	14
2.2	Modos Zero de Majorana na Física do Estado Sólido	16
2.3	Estatística de troca não-Abeliana e aplicação em computação quântica	20
3	Modelos efetivos para Supercondutores	24
3.1	Introdução	24
3.2	Teoria BCS	28
3.3	Supercondutor quirral	31
3.4	Modelo de Campo médio para supercondutor quirral $k_x \pm ik_y$	33
4	Potencial efetivo para Supercondutor quirral	42
4.1	Formalismo de integrais funcionais para Potencial efetivo	42
4.2	Diagramas de fase supercondutor, densidade de partículas, entropia e calor específico	46
4.3	Parâmetro de interação crítico g_C para o Sr_2RuO_4	51
5	Discussões, conclusões e perspectivas	55
A	Grupos de Permutação	57
A.1	A indistinguibilidade de Partículas idênticas	58
B	Formalismo de Matsubara	60
	Referência	64

Capítulo 1

Introdução e motivação

O advento da teoria quântica abriu um leque de revelações que vão desde a explicação para fenômenos como o efeito fotoelétrico até a descoberta de novas partículas fundamentais. Em especial, a formulação de Dirac da Mecânica Quântica nos revelou que além das partículas, existe também as antipartículas. De algum modo, no início do Universo a simetria de Paridade-Carga (PC) [1] foi violada e acarretou na assimetria entre matéria (formada por partículas) e antimatéria (formada por anti-partículas), com uma maior quantidade de matéria. Ettore Majorana propôs uma partícula exótica que seria a sua própria antipartícula. Tal partícula recebeu o nome de Férmion de Majorana (FM). A sua existência seria fundamental para explicar a antissimetria de matéria e antimatéria no Universo [2].

Embora FM não foram detectados até os dias atuais, a sua realização na Física do Estado Sólido como fenômeno emergente vem sendo estudado por diversos pesquisadores [3, 4, 5]. Existem hoje diversas propostas de sistemas que essas partículas emergentes podem ser observadas [7, 8, 9]. Apesar da detecção, FM emergente poder ser confundidos com estados ligados de Andreev. Porém já existem propostas para contornar o problema [10]. Existem também propostas para manipular FM emergentes em sistemas como, por exemplo, supercondutores [12, 13, 14]. Outro sistema que pode emergir FM é um supercondutor convencional onda-s bidimensional acoplado a Isolante Topológico 3D. Localizar e mover um FM emergente é muito importante para aplicações tecnológicas, em especial para a computação quântica. Férmions de Majorana emergentes são quasipartículas e recebem o nome de Modos de Majorana.

Modos Zero de Majorana (MZM) são quasipartículas de energia nula e teoricamente podem ser encontrados em alguns sistemas supercondutores [4, 11], que são materiais possuindo uma propriedade intrínseca que, quando resfriado a baixas temperaturas¹, conduzem corrente elétrica sem qualquer resistência (Figura 1.1). Um material no estado supercondutor é diferente de um condutor perfeito. No estado supercondutor, o material

¹A ordem dessa temperatura será discutida ao longo do capítulo 3.

possui um fluxo magnético que blindar, no seu interior, campos magnéticos externos até um campo crítico, enquanto em condutores perfeitos isto não acontece. Este fenômeno é conhecido como efeito Meissner.

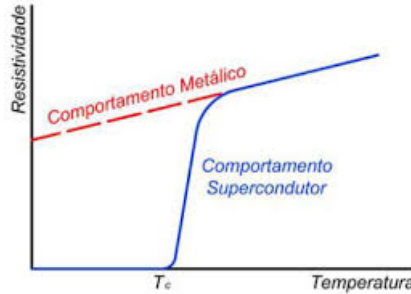


Figura 1.1: Gráfico da resistividade elétrica em função da temperatura para o comportamento metálico (vermelho) e supercondutor (azul).

Como as transições de fase usuais (sólido, líquido e gasoso), materiais podem sofrer transições de fase quanto a resistividade elétrica (se ela é nula ou não). Assim temos duas fases (ou estados): a supercondutora e a normal. Desta forma, a supercondutividade é uma fase da matéria e não uma característica do material². Essas transições de fase, como a da água, estão intimamente relacionadas à quebras de simetria do sistema, explicado pela teoria de Landau-Ginzburg. A fase supercondutora possui um maior ordenamento dos elétrons formando pares com relação a fase normal. Porém, pode existir dentro do estado supercondutor fases que não podem ser relacionadas a quebra de simetria, mas com a mudança da topologia.

A ideia de topologia aqui possui semelhanças com o conceito em matemática, cujo ramo se dedica ao estudo de características preservadas nos espaços por uma transformação contínua. Um exemplo é deformarmos uma rosquinha (toróide) em uma caneca (Figura 1.2). Nesta situação a característica preservada é a existência de um "buraco" (da alça da caneca e do centro da rosquinha). A característica preservada está relacionada ao que chamamos de invariante topológico. Quando o invariante topológico muda de um espaço para o outro por uma transformação, dizemos que os espaços são topologicamente distintos, ou seja a característica analisada mudou de um espaço para o outro. Na Física da Matéria Condensada, a topologia está relacionada, por exemplo, a mudança de um invariante topológico quando deformamos a Hamiltoniana adiabaticamente abrindo e fechando o *gap*. Se houver uma mudança de uma característica após o fechamento do *gap* dizemos que as fases são topologicamente distintas. Assim, na fase supercondutora, podemos ter a fase trivial e a fase topológica. MZM podem ser encontrados na fase topológica, desta forma é importante, sobretudo, identificar a fase trivial e supercondutora desses

²Materiais podem ter a característica na fase normal, por exemplo, de ser isolante, condutor ou semiconductor. Existem materiais cerâmicos que possuem a característica de ser isolante na fase normal e sofrer transição para a fase supercondutora

sistemas. A caracterização é feita através do *Chern Number* (CN), que é invariante se as fases são topologicamente equivalentes. A mudança do CN está intimamente ligada aos graus de liberdade entre elétrons e buracos do sistema. Supercondutores com transição de fase de ordem topológica são chamados de Supercondutores Topológicos (ST)[15].



Figura 1.2: Uma caneca sendo deformada em uma rosquinha preservando o buraco (Fonte: referência [11]).

Este trabalho tem por objetivo principal estudar a emergência de Modos Zero de Majorana em sistemas Supercondutores Quirais (SQ). No regime relativístico o comportamento da banda de energia de partículas livres é uma dispersão linear. Veremos que em supercondutores quirais bidimensionais de onda p com estado tripleto puro, no limite de baixas energias, o espectro de energia possui dispersão linear, semelhante ao que ocorre no grafeno [17]. Assim, excitações de baixa energia (quasipartículas) se comportam como partículas livres. Porém, MZM por serem excitações de energia zero são estados ligados [18]. Além disso, queremos obter as propriedades termodinâmicas do sistema na fase topológica e trivial, como entropia, densidade média de partículas e o parâmetro supercondutor em função da temperatura. Todas as propriedades citadas podem ser derivadas do potencial efetivo que, em nossa proposta, calculamos utilizando a técnica de Integral Funcional [16]. Os capítulos 2 e 3 traz uma revisão bibliográfica de conceitos e resultados já presentes na literatura. No capítulo 4, são apresentados resultados originais do trabalho desenvolvido ao longo do mestrado.

Iniciamos a discussão no Capítulo 2 com a definição e propriedades de Férmions de Majorana como partícula fundamental e, a partir daí, transportamos as ideias do modelo padrão para a Física da Matéria Condensada. Discutimos que em sistemas com iguais graus de liberdade entre elétrons e buracos podemos encontrar o análogo ao Férmion de Majorana. Discutimos também, que esses Modos de Majorana, quando possuem energia zero, obedecem a estatística de troca não Abelian, as quais são chamadas de Modos Zero de Majorana (MZM). Na última seção do Capítulo 2, trazemos uma aplicação envolvendo MZM. Tais partículas trariam uma revolução para o desenvolvimento de uma computação topológica. Discutimos de forma breve alguns aspectos interessantes do uso de MZM na computação quântica topológica.

No Capítulo 3, voltamos nossos olhares para o entendimento de sistemas supercondutores. Apresentamos a teoria BCS, que trás uma explicação de primeiros princípios

para o fenômeno da supercondutividade. Supercondutores quirais, por quebrarem espontaneamente a Simetria de Reversão Temporal (SRT), não podem ser de onda s [4]. Em seguida discutimos a Hamiltoniana de Bogoliubov–de Gennes (BdG) na base de Majorana, partindo da base eletrônica, e assim, obtemos o espectro de energia das quasipartículas. Discutimos em quais condições existem indícios de transição de fase de ordem topológica, e em seguida realizamos uma pequena discussão para calcular o CN para as diferentes fases e, assim, verificamos essas transições de fase.

No Capítulo 4 apresentamos o formalismo de integrais funcionais e o cálculo do potencial efetivo. A partir desse resultado obtemos a relação entre o parâmetro supercondutor e a temperatura. Calculamos também a densidade de partícula para corroborar nosso resultado com a previsão teórica de que no estado topológico temos a coexistência de elétrons e buracos, enquanto na fase trivial temos apenas elétrons ou apenas buracos. Trazemos o cálculo da entropia e do calor específico que, no nosso caso, interpretando o potencial efetivo como a energia livre do sistema, descontinuidades nessas funções representam respectivamente transições de fase de primeira e segunda ordem. Comparamos os resultados com os já presentes na literatura [23]. Utilizamos nossos cálculos para o *Rutenato de Estrôncio* (Sr_2RuO_4), que é um material que exibe supercondutividade de onda p quiral no plano RuO_2 [4], para verificar se a expressão obtida para o parâmetro de interação que estão em conformidade com os resultados experimentais, além de oferecer um resultado que permite dizer qual é o parâmetro de interação mínimo para que haja supercondutividade em um sistema quiral de onda- p .

Por fim, no Capítulo 5, trazemos as discussões sobre os resultados obtidos e apresentamos algumas perspectivas de trabalhos, como o estudo da manipulação de MZM em diversos sistemas supercondutores topológicos e o desenvolvimento de memórias baseadas em Modos de Majorana.

De modo a não tornar a notação muito carregada, adotaremos algumas conveniências. As matrizes de Dirac serão representadas por $\gamma^{(i)}$ com o índice na parte superior, enquanto os operadores de Majorana são representados com o índice na parte inferior γ_m . As matrizes de Pauli serão representadas por $\sigma^{(i)}$ e σ sem o índice representa o spin. O vetor de onda será denotado por apenas k , sendo assim quando houver necessidade de distinguir as componentes será usado a notação k_x . As constantes de Planck \hbar , de Boltzmann k_B e a velocidade da luz c foram tomadas como a unidade ao longo dos cálculos. As unidades de medida, quando aparecem, estão no sistema S.I.

Capítulo 2

Modos de Majorana

2.1 Introdução

Em Mecânica Quântica uma partícula é descrita por um estado $|\Psi\rangle$. Caso estivermos em um regime não relativístico podemos obter a dinâmica a partir da equação de Schrödinger:

$$H_{Schr} |\Psi\rangle = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right) |\Psi\rangle = i\hbar\partial_t |\Psi\rangle, \quad (2.1)$$

onde \mathbf{p} é o operador momento e \mathbf{x} o operador posição.

Outrora, em regime relativístico, a descrição mais correta para partículas de spin $\frac{1}{2}$ se apresenta através da equação de Dirac, dada por:

$$H_{Dirac} |\Psi\rangle = (\alpha \cdot p + \beta m) |\Psi\rangle = i\hbar\partial_t |\Psi\rangle, \quad (2.2)$$

onde α e β são matrizes que não comutam e obedecem

$$\{\alpha^i, \alpha^j\} = 2\delta_{ij}$$

e

$$\{\alpha^i, \beta\} = 0.$$

A equação de Dirac obedece a certas exigências:

1. Deve ser covariante sobre as transformações de Lorentz;
2. Deve dar a relação correta entre energia e momento dada pela equação abaixo para uma partícula livre:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4.$$

3. As derivadas temporal e espacial devem ser de primeira ordem para que a equação forneça uma densidade de probabilidade positiva;

Na forma covariante, podemos escrever a equação como:

$$(i\hbar\partial_\mu - mc)\psi = (\gamma^\mu p_\mu - mc)\psi = 0, \quad (2.3)$$

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$$

onde $p^\mu = (i\partial_t, i\vec{\nabla})$, $p_\mu = (i\partial_t, -i\vec{\nabla})$, m é a massa de repouso, ψ é o spinor de Dirac com 4 componentes, c é a velocidade da luz, $\mu = 0, 1, 2, 3$ é o índice que contempla as coordenadas espaciais e temporal e γ^μ são matrizes 4×4 , oriundas das matrizes de Pauli ($\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3$) e da matriz identidade σ^0 , dadas por:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \sigma^0 & 0 \\ 0 & -\sigma^0 \end{pmatrix}, \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Todavia esse conjunto de matrizes não é único. Em 1932, Ettore Majorana [20] encontrou um conjunto de matrizes γ^μ que forneceram soluções puramente reais para a equação de Dirac. Tal condição implica a possibilidade da existência de partículas de carga nula que são suas próprias anti partículas, batizadas de Férmions de Majorana (FM).

Aprofundado a discussão, vamos escrever o spinor de Dirac como:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_L \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

onde ψ_R é a projeção direita e ψ_L é a projeção esquerda. Substituindo a equação (2.5) na (2.3), temos duas equações acopladas:

$$\begin{cases} (i\partial_t - p \cdot \sigma)\psi_R - m\psi_L = 0 \\ (i\partial_t - p \cdot \sigma)\psi_L - m\psi_R = 0 \end{cases}. \quad (2.6)$$

Seja C o operador conjugação de carga. Note que ao tomarmos as soluções $\psi(x) = e^{(-itE)}\phi(x)$ estacionárias da equação (2.6) e impondo a simetria de conjugação de carga,

$C\psi = C\psi^*$, onde $C = i\gamma^2$ na representação de Dirac e $C = 1$ na representação de Majorana. Para cada solução ϕ com energia E existe uma solução ϕ^C com energia $-E$. Observe, também, que impondo a condição $E = -E$ na representação de Majorana, temos $E = 0$ e $\psi = \psi^{*1}$: partícula idêntica a anti-partícula, como previamente discutido.

A equação de Dirac [21, 22] previa a existência de partículas de mesma massa e spin que as partículas já conhecidas (como elétron, próton, nêutron...) associadas às soluções com energia positiva, porém com carga oposta associadas com as soluções de energia negativa. Essas partículas foram batizadas de anti-partículas. Depois da previsão teórica feita por Dirac, foram detectadas várias anti-partículas, inclusive as três mais conhecidas: pósitrons (1932), antiprótons (1955) e antinêutrons (1956). No caso da representação de Majorana partículas são idênticas as antipartículas, o que nos leva a indistinguibilidade das mesmas.

Apesar da previsão teórica, até o presente momento não se tem certeza que FM foi detectado um FM [18], porém existe evidências. Como foi motivado na introdução, as características físicas da partícula que obedece aos requisitos de FM seriam de grande importância em aplicações teóricas. Contudo dentro da Matéria Condensada podemos conceber sistemas que exibam “quasipartículas” análogas ao FM.

2.2 Modos Zero de Majorana na Física do Estado Sólido

Modos de Majorana já vem sendo estudados há décadas no contexto da Física da Matéria Condensada, em especial em supercondutores por emergirem de forma natural, além de oferecer realizações práticas factíveis. Para ser um FM em Matéria condensada, as excitações coletivas devem satisfazer duas condições: (i) que obedeça a equação de Dirac e (ii) que seja idêntica a sua antipartícula. Um elétron ordinário possui uma banda de dispersão parabólica obedecendo a equação não relativística de Schrödinger. Entretanto em um sistema que possui excitações fermiônicas, sobreposições de elétron e buraco, o cruzamento das bandas de energia em um regime descrito por um Hamiltoniano de excitações de baixas energias, possui dispersão linear. Portanto o movimento das excitações obedece a equação de Dirac sem massa. A segunda condição é satisfeita pois o elétron e o buraco são superpostos no estado supercondutor de modo que se tornam indistinguíveis.

Agora faz-se necessário introduzirmos a linguagem da segunda quantização [23]. Neste formalismo, o elétron será representado por um conjunto de operadores fermiônicos: c_j^\dagger cria um elétron com um número quântico indexado por j e c_j aniquila o elétron. Esses operadores obedecem às relações de anticomutação canônicas típicas de férmions:

¹Condição de realidade.

$$\begin{aligned} \{c_i^\dagger; c_j^\dagger\} &= \{c_i; c_j\} = 0 \\ \{c_i^\dagger; c_j\} &= \delta_{i,j} \end{aligned} \quad (2.7)$$

No contexto da matéria condensada, podemos interpretar em sistemas de muitos corpos a aniquilação de um elétron como a criação de um buraco. Mais precisamente, a criação de uma anti partícula do elétron. Essa interpretação será de suma importância para entendermos em quais sistemas devemos encontrar a emergência de FM.

A Hamiltoniana, nesse caso, é expressa em termos dos operadores eletrônicos, onde a parte cinética são termos bilineares de c 's e as interações são termos quárticos. Para nosso interesse, queremos obter a representação da Hamiltoniana na base de Majorana, com a finalidade de descrever FMs.

Devido ao objeto de nosso estudo, iremos discorrer apenas para um caso especial: Os Modos Zero de Majorana (MZM). De modo geral temos:

$$H_{BdG}\Psi = E\Psi, \quad (2.8)$$

onde Ψ é um *spinor* de Nambu que representa uma quase-partícula com energia E e H_{BdG} é a hamiltoniana de campo médio (BdG) que leva em consideração interações de primeiros vizinhos na rede, e descreve as excitações de baixa energia do supercondutor. Se tomarmos $E = 0$ a equação acima se torna:

$$H_{BdG}\Psi_0 = 0, \quad (2.9)$$

onde Ψ_0 é uma quase-partícula de energia zero ou um *Modo Zero*. Impondo que:

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix} u_{0\uparrow} \\ u_{0\downarrow} \\ v_{0\uparrow} \\ v_{0\downarrow} \end{pmatrix} = C\Psi_0^* = \begin{pmatrix} -v_{0\downarrow}^\dagger \\ v_{0\uparrow}^\dagger \\ u_{0\downarrow}^\dagger \\ -u_{0\uparrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

com C sendo a matriz conjugação de carga, u_0, v_0 são operadores componentes do spinor e u_0^\dagger é o complexo conjugado de u_0 . Queremos obter os operadores criação e aniquilação para este caso. Usando a definição de operador aniquilação e criação [18] e a equação (2.10) podemos verificar que:

$$\gamma = \int d^d r \Psi_0^* \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \\ c_\uparrow^\dagger \\ -c_\downarrow^\dagger \end{pmatrix} = \int d^d r \Psi_0 \begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \\ c_\uparrow^\dagger \\ -c_\downarrow^\dagger \end{pmatrix}^* = \gamma^\dagger, \quad (2.11)$$

ou seja, temos uma partícula de Modo Zero que é idêntica a sua anti-partícula, que por sua vez define um MZM. Podemos ainda encontrar uma relação entre os operadores eletrônicos e de Majorana[18]:

$$\begin{aligned} c_j &= \frac{1}{2} \{ \gamma_{j,1} + i \gamma_{j,2} \} \\ c_j^\dagger &= \frac{1}{2} (\gamma_{j,1} - i \gamma_{j,2}) \end{aligned}, \quad (2.12)$$

onde γ representa um FM. Desta forma um elétron (ou buraco) é composto por dois MZM. Nesse momento é interessante discutirmos alguns pontos.

1. A equação (2.9) nos leva a concluir que o custo energético é nulo para criar ou aniquilar uma partícula. Além do mais, o estado fundamental será degenerado no caso de um MZM, devido não ser possível formar um operador número ($\gamma^\dagger \gamma = \gamma^2 = 1$);
2. Os MZM estão separados dos demais estados por um gap de energia, que oferece ao mesmo uma proteção topológica. A razão é que o modo zero não pode adquirir uma energia diferente de zero por qualquer deformação contínua do Hamiltoniano que não fecha o gap². Isto é válido para qualquer Hamiltoniano e depende apenas da simetria imposta na equação (2.10);
3. Os MZM sempre aparecerão aos pares em um sistema finito, visto que existe um número inteiro de elétrons e cada elétron é uma superposição de dois Majoranas ocupando o mesmo sítio. Em certas condições, podemos obter um par de modos de Majorana separados espacialmente [11, 18]. Para elucidar esse fato, tomemos uma Hamiltoniana de campo médio na representação de Majorana que descreve uma cadeia 1D spin polarizada supercondutora de onda-s (modelo de Kitaev):

$$H = \frac{i}{2} \sum_j [\mu \gamma_{j,1} \gamma_{j,2} + (t + \Delta) \gamma_{j,2} \gamma_{j+1,1} + (-t + \Delta) \gamma_{j,1} \gamma_{j+1,2}], \quad (2.13)$$

²O gap supercondutor Δ .

sendo t parâmetro de hopping, Δ o parâmetro supercondutor e μ o potencial químico. Especificamente neste sistema, o supercondutor se encontra no estado topológico para $|\mu| \leq 2t$ e trivial para todo resto. Se tomarmos $\Delta = t$ e $\mu = 0$, temos:

$$H = it \sum_j \gamma_{j,2} \gamma_{j+1,1}. \quad (2.14)$$

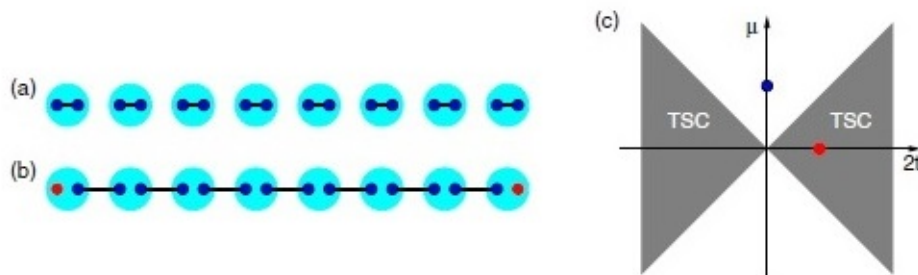


Figura 2.1: (a) MZM na fase trivial (b) Observe que no estado topológico MZM vizinhos encontram-se ligados deixando os das extremidades da cadeia livres (c) Diagrama da fase trivial e topológica onde a transição ocorre em $\mu = \pm 2t$ (Fonte: referência [18]).

Neste caso estamos criando (ou aniquilando) γ_1 e γ_2 em sítios diferentes, ou seja, espacialmente separados. Desta forma os MZM se acoplam com os vizinhos deixando os das duas extremidades livres (Figura 2.1);

- Note também que os operadores obtidos na equação (2.11) obedecem as relações de anti-comutação canônicas. Em uma análise mais detalhada podemos verificar que estes operadores obedecem a estatística de troca não-Abeliana. Esta característica é muito interessante para o desenvolvimento de uma computação topológica, visto que, por obedecerem a uma estatística de troca não-Abeliana quando movermos dois MZM um contra o outro, cada modo conserva a memória da posição anterior;

Pode parecer uma discussão um pouco frustrante, dado que não existem muitas evidências que realmente FM existem como partículas fundamentais. Todavia, na Física da matéria condensada, cuja as partículas de interesse de estudo envolve elétrons (que são férmions de Dirac) e prótons, onde em um sistema de muitos corpos o comportamento coletivo dá origem a interessantes fenômenos, em especial ao fenômeno de emergência. Trata-se do comportamento coletivo dos elétrons, prótons e nêutrons no sistema. As partículas que emergem, não são propriamente uma partícula, por isso são chamadas de quasipartículas.

Vários são os exemplos de quasipartículas, como fônons, magnons, plasmon e polarons. Fônons, por exemplo, são os quanta de vibração da rede e magnons³ os quanta de flutuação do spin. Como veremos FM podem emergir em sistemas de matéria condensada provindo da superposição entre elétrons e buracos.

Note que o elétron (ou buraco) é formado por dois Majoranas que ocupam espacialmente o mesmo lugar. Dizemos que esses dois Majorana estão acoplados espacialmente. Os operadores de Majorana obedecem a Álgebra de Clifford $\{\gamma_{i\alpha}; \gamma_{j\beta}\} = 2\delta_{ij}\delta_{\alpha,\beta}$. Reescrevendo as relações em (2.12), colocando γ em função de c e c^\dagger , temos:

$$\begin{aligned}\gamma_{j,1} &= c_j^\dagger + c_j \\ \gamma_{j,2} &= i(c_j^\dagger - c_j). \\ \gamma_j &= \gamma_j^\dagger\end{aligned}\tag{2.15}$$

Das relações dadas em (2.15), o fato de $\gamma_j = \gamma_j^\dagger$ implica que temos uma partícula que é idêntica a sua antipartícula, que define a condição de realidade (operador auto-adjunto) e por sua vez corrobora com a definição feita em (2.12). O efeito desse operador é criar ou aniquilar uma partícula no sítio j .

As transformações canônicas definidas em (2.12) mostram que qualquer sistema eletrônico pode ser descrito também usando operadores de Majorana. Porém, muitas vezes, essa transformação não é vantajosa e acaba por complicar ainda mais o problema, visto que fisicamente o que temos são duas partículas entrelaçadas no espaço.

O fato de supercondutores serem ideais para exibirem modos de Majorana [4] está intimamente ligado ao fato de que modos de Majorana podem ser descritos como superposição de iguais graus de liberdade entre elétrons e buracos, o que se verifica nas relações (2.7) e (2.12). Como será apresentado no próximo capítulo, alguns sistemas com ordem supercondutora, apresentam naturalmente da teoria de Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS) [25] iguais graus de liberdades entre elétrons e buracos, tornado assim, natural que busquemos por MZM em tais sistemas.

2.3 Estatística de troca não-Abeliana e aplicação em computação quântica

Em um sistema composto por mais de uma partícula a descrição feita pela teoria de estatística quântica é um dos grandes pilares. A estatística tem sua essência na contabilização dos estados quânticos. Imagine que estamos formando um estado com N partículas ocupando r sítios e queremos determinar de quantas formas isso pode ser feito.

³um magnon carrega uma porção fixa de energia e momentum de cristal.

Como podemos contabilizar? Bom, se a ordem importa temos da combinatória, que o número de estados pode ser dado pela comutação e que $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_r) = -\Psi(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_r)$, ou seja, a função de onda total do sistema é antissimétrica por uma permutação simples de duas partículas. Caso contrário, temos que o número de estados é dado por um arranjo e a função de onda é simétrica para uma permutação da posição de duas partículas, ou seja, $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_r) = \Psi(q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_r)$. As partículas que compõe o primeiro sistema chamamos de férmios, descrita pela estatística de Fermi-Dirac, e o segundo sistema é composto por bósons, que obedecem a estatística de Bose-Einstein.

Podemos imaginar essas trocas como um resultado de uma operação sendo feita na função de onda total do sistema, onde a função final devem diferir por apenas uma fase. Isto é sempre possível, desde que seja contínuo. Podemos realizar este processo adiabaticamente, e, pelo teorema de Block, a função de onda deve ganhar uma fase que é dado pela curvatura de Berry, ou fase de Berry [19, 18]. Assim:

$$\psi(q_1, q_2) \rightarrow e^{i\theta} \psi(q_1, q_2). \quad (2.16)$$

Porém, se realizarmos essa troca mais uma vez para levar a função de volta ao estado inicial, podemos não obter a mesma função de onda:

$$\psi(q_1, q_2) \rightarrow e^{i\theta} \psi(q_1, q_2) \rightarrow e^{i\theta} e^{i\theta} \psi(q_1, q_2) = e^{i2\theta} \psi(q_1, q_2). \quad (2.17)$$

em especial para $\theta = 0$, e $\theta = \pi$ representa bósons e férmions respectivamente. Para qualquer outra partícula cuja a fase seja um valor de $0 < \theta < \pi$, chamamos de *anyons* que possui estatística θ [19]. De forma geral, essas transformações são implementadas por operadores unitários $U(\sigma)$ no espaço $N \times N$ dimensional, onde σ é a troca entre duas partículas (ver Apêndice A), em que:

$$\psi_\alpha \rightarrow U(\sigma_i)_{\alpha,\beta} \psi_\beta. \quad (2.18)$$

Assim se $U(\sigma_i)_{\alpha\beta} U(\sigma_j)_{\beta\gamma} \neq U(\sigma_j)_{\alpha\beta} U(\sigma_i)_{\beta\gamma}, \forall i \neq j$, ou seja, não comuta, dizemos que as partículas obedecem a estatística de troca não Abelianas (Figura 2.2). Para MZM o operador unitário e a atuação é dada respectivamente por:

$$\begin{aligned}
 U_{ij} &= \gamma_i \gamma_j \\
 \gamma_k &\rightarrow U_{ij} \gamma_k U_{ij}^\dagger
 \end{aligned}
 \tag{2.19}$$

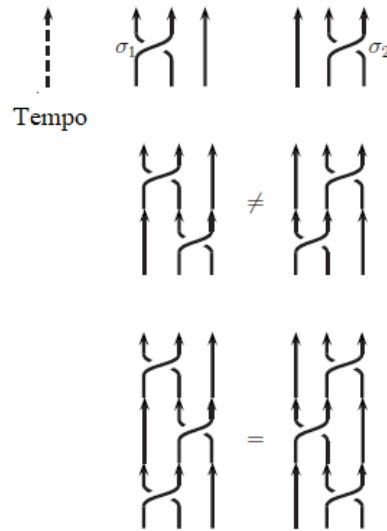


Figura 2.2: Exemplos de trocas não-Abelianas (Fonte: referência [19]).

A idealização de uma computação quântica universal (CQU) exigiria a existência de sistemas com Anyons de Fibonacci, que são quase-partículas do tipo anyons que obedecem a estatística de troca não-Abeliana. Porém podemos fazer uma computação quântica topológica (CQT) com MZM.

Em sistemas supercondutores quirais (SQ) bidimensionais de onda p , $(k_x \pm ik_y)$, as quase partículas obedecem naturalmente a estatística de troca não-Abeliana [19]. Fu e Kane [26] propuseram que ao acoplarmos um supercondutor convencional de onda s bidimensional a um Isolante Topológico 3D (ver 2.3) a interface pode-se produzir um efeito semelhante a de um SQ spin polarizado.

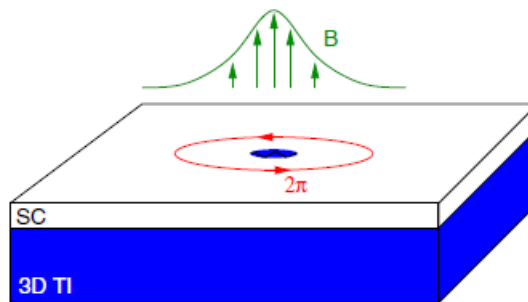


Figura 2.3: Modelo de Fu e Kane: um supercondutor topológico acoplado a isolante topológico (Fonte: referência [19]).

Podemos construir a computação quântica (CQ), a partir de um vetor de estado no espaço de Hilbert $|\Phi_{n_i}\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots, n_N\rangle$ formado por N férmions de Dirac (elétrons) e $n_j = 0, 1$ (qubit) que significa estar ocupado ou não e que são os autovalores do operador número:

$$\hat{n}_j = c_j^\dagger c_j = \frac{1}{2}(1 + \gamma_{j1}\gamma_{j2}). \quad (2.20)$$

A equação (2.20) nos revela detalhes interessantes. Note que o operador número é escrito em função de dois operadores de Majorana ocupando o mesmo sítio. Para inserir uma informação, é necessário separar os MZM espacialmente primeiro. Desta forma, a informação em termos de MZM não é armazenada localmente. Em outras palavras, não podemos ler a informação do estado quântico sem saber quais são os MZM que constituíam inicialmente cada qubit. Embora excitações de baixa energia poderiam criar um desordenamento dos estados quânticos o que tornaria impraticável utilizá-los para armazenar informação, a presença de um gap supercondutor (derivado da formação de pares de Cooper) em supercondutores protege os MZM, tornando o sistema praticamente imune a fenômenos de decoerência.

Por fim, o fato dos MZM em um sistema 2D de SQ obedecem estatística de troca não-Abeliana, permite evoluir um estado inicial $|\Phi_i\rangle$ a um estado final $|\Phi_f\rangle$ realizando operações unitárias U , permitindo uma computação sem ambiguidades. Uma observação importante, é que o operador U atua no estado, assim ele atua em todos qubit simultaneamente, diferentemente do que ocorre na computação tradicional, em que cada operação atua em um bit por vez, tornando assim a computação quântica mais rápida.

Capítulo 3

Modelos efetivos para Supercondutores

3.1 Introdução

O estudo da supercondutividade remonta ao início do século XX, quando, em 1911 o físico Heike Kamerlingh Onnes observou, em seu laboratório, que o mercúrio sofria uma queda abrupta da resistividade, indo a zero quando atingia uma temperatura da ordem da liquefação do hélio. A esse fenômeno deu-se o nome de supercondutividade. A temperatura na qual ocorre a transição de fase do estado normal para o estado supercondutor foi denominada temperatura crítica T_C , sendo diferente para cada material.

A supercondutividade é observada em muitos elementos metálicos e também em ligas, compostos intermediários e supercondutores dopados. Atualmente, a faixa de temperatura de transição do estado normal para o estado supercondutor, vai de $0,001K$, para o elemento Rh , até $138K$ para compostos cerâmicos [24]. O último caso trata-se de supercondutores de altas temperaturas, que sofrem transição de fase em temperaturas da ordem da liquefação do nitrogênio. Existem alguns férmions pesados¹ que são supercondutores e pertencem a classe dos supercondutores exóticos. Outros materiais sofrem transição de fase apenas quando submetidos a pressões elevadas. Um bom exemplo é o silício (Si), que necessita ser submetido a uma pressão de $165kBar$ e a $T_C = 8,3K$. Impurezas na amostra podem alterar T_C . Por exemplo, a adição de galidolíneo (mesmo em baixas quantidades) podem reduzir a temperatura de transição do lantânio de $5,6K$ para $0,6K$

Os físicos Karl Wather Meissner e Robert Ochsenfeld[27] descobriram em 1933 que, no estado supercondutor, as linhas de campo magnético eram expulsas do interior do material, contrariando a ideia, até então, de que supercondutores eram condutores perfeitos. Esse fenômeno ficou conhecido como efeito Meissner. Todavia, campos magnéticos externos intensos destroem a supercondutividade. O valor do campo onde há a transição entre o estado supercondutor e normal é denominado *campo crítico* $B_C(T)$, que depende da

¹Existem alguns compostos metálicos que possuem altos valores para capacidade térmica, com duas ou três ordens de grandeza acima do normal. São exemplos de férmions pesados o UBe_{13} , o $CeAl_3$ e o $CeCu_2Si_2$. Acredita-se que a massa efetiva dos elétrons nestes compostos seja da ordem de $10^3 m_e$

temperatura. Na temperatura crítica, o campo magnético crítico é zero $B_C(T_C) = 0$ dentro do supercondutor. A existência do efeito Meissner nos permite classificar os materiais em dois grupos quanto ao campo crítico: Tipo I e Tipo II.

Os materiais do tipo I, têm sua supercondutividade totalmente destruída quando o campo magnético atinge o seu valor crítico. Amostras puras de muitos materiais exibem este tipo de comportamento. Os valores de B_C nos supercondutores do tipo I são tão pequenos ($B_C = -\mu_0 M$) que estes materiais não podem ser usados em ímãs supercondutores. Já no tipo II, observamos a existência de dois campos críticos: até o campo B_{C1} o material está em um estado supercondutor puro, para valores entre B_{C1} e B_{C2} existe um fluxo magnético no interior do material exibindo os estados de vórtices e, por fim, para valores acima de B_{C2} o material transita para o estado normal (Figura 3.1). Supercondutores do tipo II são, na maioria dos casos, ligas ou metais de transição com altos valores de resistividade elétrica no estado normal. Existe, também, materiais que quando puros são do tipo I, quando dopados com impurezas passam a exibir curva de magnetização do tipo II (Figura 3.2).

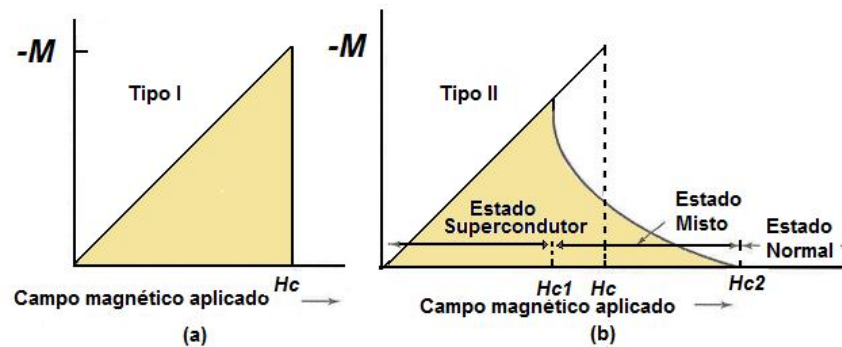


Figura 3.1: Curvas de magnetização para supercondutores do Tipo I e Tipo II (Fonte: referência [24]).

A primeira explicação para o efeito Meissner foi proposta pelos irmãos London em 1935 [28]. Partiram de uma abordagem fenomenológica e postularam que no estado supercondutor, a densidade de corrente é diretamente proporcional ao potencial vetor do campo magnético local. A teoria deles previa a existência do efeito Meissner, já que o campo magnético tende a zero dentro da amostra. A abordagem dos irmãos London utiliza da ideia de dois “fluidos”, um com elétrons comuns e outro com “super elétrons” o qual era responsável pela supercondutividade. Esta teoria por ser fenomenológica além de não conseguir explicar a origem da supercondutividade, falhava no ponto em que a supercondutividade deveria existir mesmo na ausência de campo magnético externo.

Após a teoria de London, em 1950, os físicos V.L. Ginzburg e L.D. Landau [29] propuseram uma teoria fenomenológica, usando a mesma ideia de super elétrons e o formalismo da energia livre termodinâmica, que além de explicar o efeito Meissner mostrava a exis-

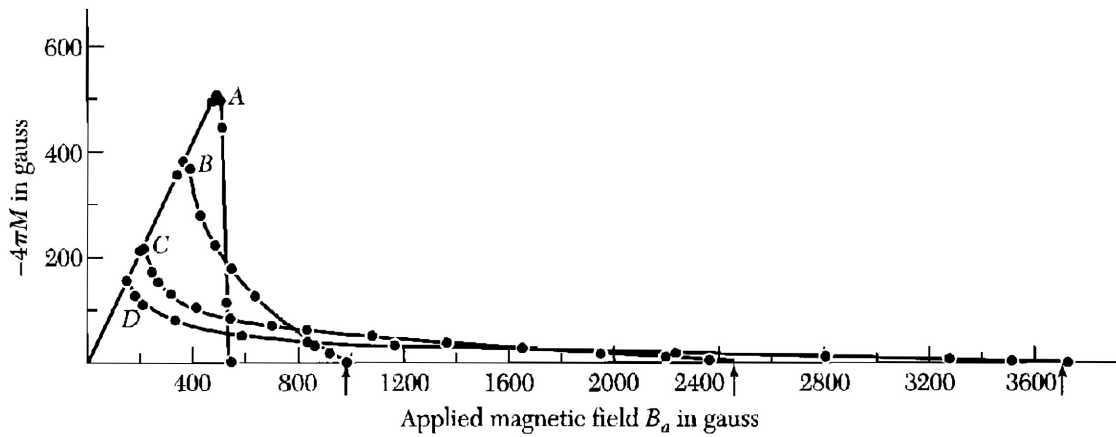


Figura 3.2: Curvas de magnetização para supercondutores (Chumbo e índio a $4,2K$ do Tipo I e com dopagem. (A) Chumbo, (B) Chumbo-2, 8% índio, (C) Chumbo-8, 23% índio e (D) Chumbo-20, 4% índio (Fonte: referência [24]).

tência de dois diferentes tipos de supercondutores: o do tipo I e o do tipo II. A diferença básica entre eles é que o campo magnético só penetrará no material no estado supercondutor do tipo I quando atingir o valor do campo crítico, enquanto no tipo II o campo começa a penetrar para um valor de campo menor que o valor do campo crítico, ou seja, $H_{C1} < H_C$.

Em 1957 os físicos J. Bardeen, L. Cooper e J. Schrieffer [25] fizeram uma teoria de primeiros princípios, que ficou conhecida como BCS (iniciais dos nomes), que descreve satisfatoriamente dados experimentais. Um dos pontos centrais da teoria é a atração dos elétrons no estado fundamental, formando pares. Esses pares se formam através da interação elétron-fônon: um primeiro elétron deforma a rede (fônon) enquanto um segundo elétron aproveita da deformação causada pelo primeiro elétron para minimizar a sua energia. Tais elétrons ligados são conhecidos como par de Cooper.

A velocidade de deriva do elétron na rede é maior que a do fônon, desta forma existe uma diferença de intervalo para que o segundo elétron seja capturado pela deformação da rede, o que faz com que os elétrons sejam correlacionados a uma grande distância. Para supercondutores do tipo I, esta distância é da ordem de $10^{-7} m$ [24], que é bem maior do que a distância de repulsão coulombiana entre os elétrons do par de Cooper.

Essa interação atrativa entre elétrons pode levar a um estado fundamental separado do primeiro estado excitado por um gap de energia supercondutor Δ . A diferença de energia no zero kelvin é:

$$\Delta(0) = 3.25k_B T_C,$$

onde k_B é a constante de Boltzmann. A formação dos pares de Cooper conduz a uma diminuição da energia no nível de Fermi ϵ_F . A largura da banda proibida² em supercondutores é da ordem de $10^{-4}\epsilon_F$. A energia necessária para romper o par de Cooper é o

²Região entre a banda de valência e de condução cuja a diferença de energia é o gap.

gap da teoria BCS, que possui uma dependência com a temperatura. Quanto menor a temperatura, maior o gap. A zero Kelvin o gap é máximo, pois não há vibrações da rede cristalina devido a flutuações térmicas.

O fato de existir uma banda proibida, significa que fótons com uma energia menor do que o gap de energia não são absorvidos. Em uma amostra metálica da ordem de $20 \times 10^{-10}m$, por exemplo, um número maior de fótons atravessa o material no estado supercondutor do que no estado normal, e, no caso de fótons com energia menor do que a largura da banda proibida, a transmitância desaparece no zero absoluto.

Um resultado muito interessante, obtido experimentalmente, é que a temperatura crítica dos supercondutores varia com a massa isotópica,

$$M^\alpha T_C = \text{constante},$$

sugerindo que as vibrações da rede cristalina e, portanto, as interações elétron-rede estão envolvidas no fenômeno da supercondutividade [32]. Assim não existe nenhuma outra razão para que T_C não dependa do número de nêutrons presentes no núcleo atômico.

A teoria BCS, apesar de apresentar uma descrição perfeita para o fenômeno da supercondutividade em materiais de baixa temperatura crítica, não consegue explicar a supercondutividade em materiais de alta temperatura crítica [33]. Porém, mesmo desconhecendo o mecanismo de formação de pares de Cooper, a supercondutividade para alta temperatura crítica depende de alguma forma dos mesmos [24, 32].

A transição de fase da fase normal para a fase supercondutora está intimamente ligada a quebra de simetrias do sistema (Um maior ordenamento dos elétrons em pares) [34]. Portanto podemos estudar estas transições a partir das funções termodinâmicas, como, por exemplo, na transição da fase líquida da água para a fase sólida.

Para um supercondutor do tipo I com um efeito Meissner completo, o campo crítico B_C é uma medida da diferença de energia livre (de Gibbs) entre os estados normal e supercondutor a uma mesma temperatura:

$$\Delta F = \frac{B_C^2}{2\mu_0}.$$

No caso supercondutor do tipo II, B_C é definido como o campo crítico termodinâmico relacionado à energia livre de estabilização, obtida a partir do valor do campo magnético aplicado que destrói o estado supercondutor. Em uma temperatura finita, as fases normais e supercondutoras estão em equilíbrio quando o campo magnético é tal que as energias livres sejam $F = U - TS$.

Dentro da classe dos supercondutores, existem os chamados supercondutores quirais que são aqueles em que a fase complexa do gap ik_y , $\Delta(k) = |\Delta|e^{-i\theta}$, gira em um sentido horário ou anti-horário conforme k se move entorno de algum eixo na superfície de Fermi

[4].

A supercondutividade quirial é um tipo de estado topológico, e carrega consigo certas assinaturas de sua topologia não trivial [7]. Um exemplo são os modos de Majorana, que, no estado de energia zero $k = 0$, têm a propriedade de ser sua própria anti-partícula. Física semelhante se aplica a núcleos de vórtice em supercondutores quirais que, devido ser de onda p , exibe um único modo zero de Majorana para o caso de férmions sem spin [35]. Esses modos de Majorana podem ser estáveis a perturbações locais, protegidos pelo *bulk*, devido a sua natureza topológica.

Neste capítulo iniciaremos com uma discussão sobre a Teoria BCS, com foco nos resultados sobre o gap de energia $\Delta(k)$ oriundo da formação de pares de Cooper, os quais, serão usados para discussões sobre a forma do gap no capítulo 4. Em seguida discutiremos sobre a classe dos supercondutores quirais. Na última seção, será apresentado um modelo efetivo de uma banda para supercondutores quirais, e utilizando as relações definidas em (2.12) obteremos o espectro de energia dos modos de Majorana. Por fim, argumentaremos as condições sobre o potencial químico, parâmetro supercondutor e parâmetro de hopping para o qual o estado supercondutor exibe a fase topológica [36].

3.2 Teoria BCS

Nesta seção faremos uma descrição da teoria BCS a partir da interação elétron-fônon. Contudo, esse não é o único mecanismo que leva a formação de pares de Cooper. O mecanismo de interação elétron-fônon explica de forma bem coerente a formação dos pares de Cooper e a existência do gap supercondutor para supercondutores ditos convencionais. Porém, dependência do efeito isotópico com a T_C , como já discutido, torna a interação elétron-fônon o principal mecanismo para a supercondutividade. Assim mostraremos como a interação elétron-fônon pode produzir uma interação atrativa entre os elétrons. Considere a Hamiltoniana $H = H_0 + H_{e-f}$, onde:

$$H_0 = \sum_q \hbar\omega_q b_q^\dagger b_q + \sum_k e_k c_k^\dagger c_k, \quad (3.1)$$

onde ω_q é a frequência de vibração da rede, c_k e b_k são respectivamente os operadores de aniquilação de elétrons e fônons e e_k a energia cinética dos elétrons. A equação (3.1) descreve a energia cinética dos fônons e a energia cinética dos elétrons na rede. Temos ainda:

$$H_{e-f} = \sum_{q,k} M_q c_{q+k} c_k (b_q + b_{-q}^\dagger), \quad (3.2)$$

onde M_q é constante de acoplamento elétron-fônon. Trataremos o problema através da teoria perturbativa. A interação elétron-fônon, como veremos, é uma correção de segunda ordem, sendo assim de energia negativa, típico de potencial atrativo. Inicialmente procuramos por uma transformação de Schieffer-Wolff, de modo que:

$$[H, S] = -H_{e-f}. \quad (3.3)$$

A transformada da Hamiltoniana é dada por:

$$\hat{H} = e^{-S} H e^S = H_0 + \frac{1}{2} [H_{e-f}, S] + \dots \quad (3.4)$$

Vamos propor que:

$$S = \sum_{q,k} (A b_{-q}^\dagger + B b_q) M_q c_{q+k}^\dagger c_k, \quad (3.5)$$

onde A e B podem ser determinados impondo a condição em (3.3). Assim a transformação unitária S é:

$$S = \sum_{k,q} \left[\frac{b_{-q}^\dagger}{(e_k - e_{k+q} - \hbar\omega_{-q})} + \frac{b_q}{(e_k - e_{k+q} + \hbar\omega_q)} \right] M_q c_{k+q}^\dagger c_k. \quad (3.6)$$

Observe que o denominador de b_{-q}^\dagger corresponde a emissão de diferentes energias de um fônon e o denominador de b_q a absorção. Vamos definir $\Delta_\pm(k, q) = e_k - e_{k+q} \pm \hbar\omega_{\pm q}$. A Hamiltoniana efetiva depende do comutador $[(b_q + b_{-q}^\dagger) c_{k+q}^\dagger c_k, b_{-q}^\dagger c_{k'+q}'^\dagger c_{q'}]$. Na avaliação deste comutador surgem termos de potencial de um corpo, que não nos interessam. Assim, levando apenas os termos da interação entre dois elétrons mediado por fônons, temos um potencial atrativo em uma estreita faixa em torno do nível de Fermi dado por:

$$V(k, q) = \frac{|M_q|^2 \hbar\omega_q}{\Delta_{k,q}^2 - (\hbar\omega_q)^2}, \quad (3.7)$$

onde $\Delta_{k,q} = e_k - e_{k-q}$. Note que o potencial será atrativo para $\Delta_{k,q} < \hbar\omega_q$, tendo seu valor máximo para $\Delta_{k,q} = \hbar\omega_q$. Portanto, a atração está condicionada a vibração da rede (ω_q) e, em outras palavras, ao movimento dos íons. A ideia física é que o primeiro elétron

polariza o meio por atrair íons positivos (Figura 3.3); esses íons positivos em excesso, por sua vez, atraem o segundo elétron, dando uma interação atrativa efetiva entre elétrons, se essa atração for suficiente para exceder a repulsão de Coulomb. Este potencial atrativo entre elétrons é a base para a teoria BCS da supercondutividade. A importância da interação elétron-rede para explicar a supercondutividade foi sugerida pela primeira vez por Frohlich em 1950. Esta sugestão foi confirmada experimentalmente com a descoberta do efeito isotrópico.



Figura 3.3: Representação da formação de pares de Cooper (Fonte: referência [6]).

Todavia ainda não justificamos como o segundo elétron é atraído. O momento do fônon devido a distorção da rede pelo primeiro elétron é q . A partir da conservação do momento, podemos ver que se um elétron é espalhado de k para k' temos, portanto, que $q = k - k'$ (Figura 3.4). Por fim, o fônon espalha o segundo elétron da mesma forma.

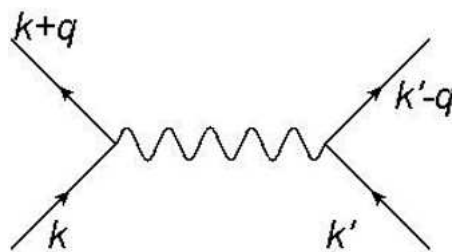


Figura 3.4: Diagrama de Feynman para interação elétron - fônon - elétron (Fonte: referência [30]).

Embora a atração mediada por fônons seja a base para a supercondutividade nos supercondutores convencionais, é importante reconhecer que o modelo BCS requer apenas uma interação atrativa dando o elemento de matriz que pode ser aproximado como $-V$ em uma faixa de energias perto da Energia de Fermi. Diferentes interações de emparelhamento, envolvendo a troca de diferentes bósons por fônons, podem muito bem ser responsáveis por alguma supercondutividade em alguns dos mais exóticos supercondutores orgânicos, férmions pesados e de alta temperatura. Nesse caso, o emparelhamento de elétrons pode ter o caráter de onda- p ou onda- d , em vez da forma de onda- s assumido aqui inicialmente. No entanto, a fenomenologia macroscópica do estado supercondutor resultante é alterada apenas por detalhes dessas diferenças. Conseqüentemente, a existência do

potencial atrativo, tratado aqui, fundamenta a compreensão de todos os supercondutores, mesmo os materiais exóticos para os quais são necessárias generalizações significativas.

3.3 Supercondutor quirral

A formação de pares Cooper podem ser dadas por emparelhamentos de onda- s , onda- p , onda- d e onda- f . Em cada caso temos diferentes possibilidades de momento angular total dos pares de Cooper. Por exemplo, os pares de Cooper dos supercondutores de onda- s têm momento angular total nulo devido a um único estado singlete. Em supercondutores de onda- p , o momento angular total dos pares de Cooper é 1. Os supercondutores mais simples são de onda- s com uma única superfície de Fermi, cuja a interação atrativa entre os elétrons é devido a interação elétron-fônon. Emparelhamentos de ordem superior ocorrem, geralmente, quando a interação elétron-elétron a curto alcance é repulsiva, mas a interação a longo alcance seja atrativa de modo que a interação global seja atrativa. O exemplo mais clássico presente na literatura é o Hélio superfluido (He_3) onde os pares de Cooper tem momento angular total igual a 1 [37]. Os Cupratos de alta temperatura são de onda- d devido à alta repulsão Coulombiana a curta distância e atrativa devido a uma gama de interações de trocas. Para mais detalhes sobre este assunto veja a referência [38].

Supercondutores quirrais se caracterizam pelo momento angular total dos pares de Cooper não nulos, assim imediatamente, eles não podem ser de onda- s . Em especial, quebram espontaneamente a simetria de reversão temporal (SRT) [4], dando origem as correntes transportadas pelos modos de borda e estados de superfície, como no Efeito Hall Quântico (HQE). No mais simples modelo supercondutor quirral de onda- p , essas correntes são substanciais, mesmo filtrado por correntes diamagnéticas com sentido contrário. Essas correntes apesar de não serem quantizadas e nem protegidas topologicamente, possuem a condutância Hall térmica quantizada. Supercondutores de onda- s quando acoplados a um campo magnético exibem correntes de superfície, porém nesse caso não se deve a uma quebra espontânea de SRT.

Uma característica marcante nos supercondutores de ordem superior como onda- s ou d é a existência de *nós* [60] (Figura 3.5) na superfície de Fermi dos materiais (Figura 3.6). Como poderemos observar ao longo dos cálculos mais adiante, a lacuna de energia do gap supercondutor é dada por $|\Delta(k)|^2$. A existência de *nós* pode ser prejudicial a supercondutividade do material, no entanto, eles podem acontecer quando há um bom ajuste entre um tipo particular de lacuna com nós e a superfície de Fermi. Por exemplo, um supercondutor quirral de onda- p do tipo $\Delta(k) = \Delta_0(k_x \pm ik_y)$, quando tomamos o módulo quadrado a lacuna do gap supercondutor é isotrópico. Em particular para uma superfície de Fermi cilíndrica, este supercondutor não possui *nós*.

Por outro lado supercondutores quirrais geralmente têm *nós*, a exemplo do He_3 que na fase A possui dois *nós* na superfície de Fermi ao longo do eixo k_z [37]. As quase-partículas

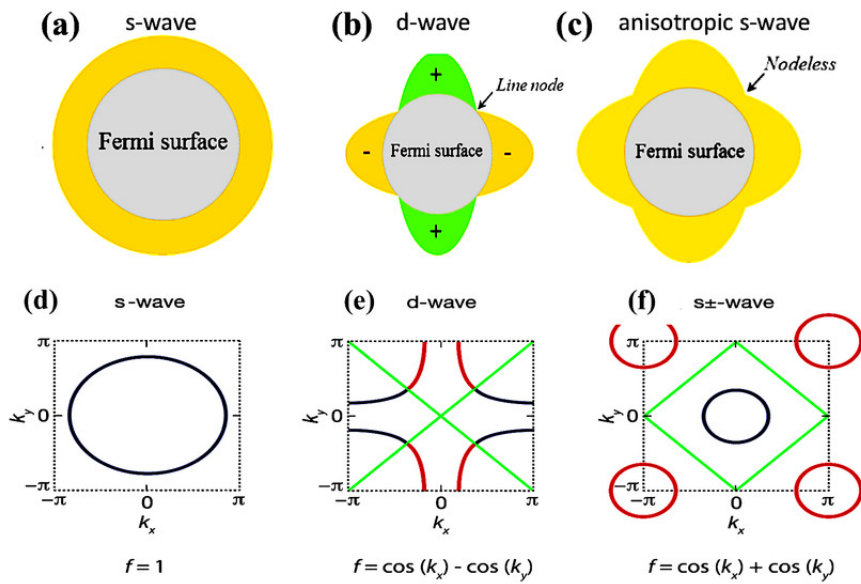


Figura 3.5: (a-c) Ilustrações das estruturas de gap supercondutores correspondentes a várias simetrias de gap. (d-f) Desenhos esquemáticos de superfícies de Fermi bidimensionais e das zonas de Brillouin, onde as linhas verdes indicam os nós no parâmetro de ordem supercondutora e os círculos azuis/vermelhos destacam os diferentes sinais do parâmetro de ordem supercondutora (Fonte: referência [62]).

perto destes *nós* são spin-degenerados e correspondem aos férmions de Weyl [39]. Quando o acoplamento spin-órbita está presente, supercondutores quirais com emparelhamento de paridade ímpar (por exemplo, onda- p), podem ter lacuna supercondutora não unitária estruturas e nós de pontos seletivos de spin. Neste caso, apesar do fato de que a superfície de Fermi é spin-degenerada, apenas estados spin polarizados nos pontos nodais são ininterruptos no estado supercondutor, ao passo que os estados da polarização de spin oposta são espaçados. Conseqüentemente, quase-partículas nodais de baixa energia surgem do emparelhamento dentro de estados do mesmo spin. Essas quase-partículas são idênticas às suas antipartículas e, portanto, são a realização em estado sólido de MZM.

Vladyslav Kozii, Jörn W. F. Venderbos e Liang Fu no artigo "Three-dimensional Ma-

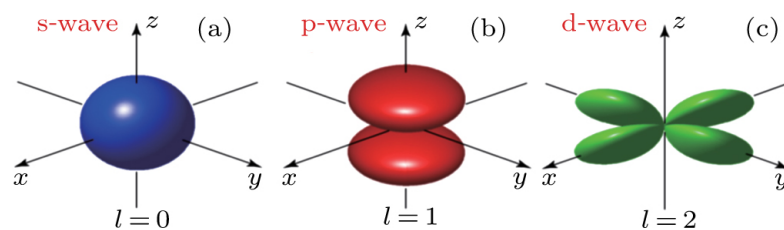


Figura 3.6: A forma da parte orbital do parâmetro de ordem de um par de Cooper, ou gap com diferentes simetrias de pareamento. (a) A onda s isotrópica, a magnitude do intervalo é isotrópica em toda a superfície de Fermi. (b) A função gap da onda p com reversão de sinal nas duas superfícies. (c) A função gap de onda d com sinal mudando alternadamente de uma superfície para outra (Fonte: referência [61]).

forana fermions in chiral superconductors "[31] em uma análise sistemática mostraram que supercondutores quirais tridimensionais com forte acoplamento spin - órbita e paridade ímpar podem exibir MZM nos pontos nodais. O estado em que um supercondutor exibe quase-partículas é denominado topológico, enquanto os estados que não exibem são denominados triviais. Portanto, supercondutores como examinados pelos autores são topológicos. Eles mostram também que existe uma conexão bem íntima entre a emergência entre os MZM e a natureza não unitária do gap supercondutor quiral. Como possível candidato a supercondutor quiral que podem exibir MZM, propõem o férmion pesado $PrOs_4Sb_{12}$.

3.4 Modelo de Campo médio para supercondutor quiral $k_x \pm ik_y$

Nesta seção temos como proposta descrever a construção do modelo BdG, que descreve sistemas de partículas interagentes com aproximações de campo médio. Em geral, os sistemas de interesse, são compostos por elétrons que interagem com o potencial da rede e com outros elétrons do sistema. Como já visto, elétrons podem interagir atrativamente mesmo que possuam uma repulsão coulombiana, formando pares de Cooper. Assim, devemos levar em conta, de forma geral, alguns ingredientes: (1) parâmetro de *hopping* (t) que descrevem a movimentação de férmions na rede, (2) parâmetro supercondutor (Δ), (3) energia de ocupação (μ) em multi orbitais e (4) acoplamento spin-orbita.

Introduzimos a hamiltoniana BdG escrevendo como $H = H_0 + H_\Delta$. No espaço dos momentos, temos:

$$H_0 = \sum_k \sum_{b,\nu} \epsilon_{b,\nu}(k) c_{b,\nu}^\dagger(k) c_{b,\nu}(k), \quad (3.8)$$

onde $\epsilon_{b,\nu}(k)$ é a energia das contribuições de *hopping*, potencial químico e acoplamento spin-orbita. Além disso b é indexado como o índice de banda e ν é o *pseudospin*. A parte com respeito ao parâmetro supercondutor pode ser escrita como:

$$H_\Delta = \sum_k \sum_{a,b} \sum_{\lambda,\nu} \Delta_{a,b}^{\lambda,\nu}(k) c_{b,\lambda}^\dagger(k) c_{b,\nu}^\dagger(-k) + H.C.. \quad (3.9)$$

A equação acima descreve genericamente os casos de pareamento tripleto e singleto. Outra forma é descrever $\Delta_{a,b}^{\lambda,\nu}(k)$ em função de uma matriz, assim definindo como os índices de pseudo spin $+(\uparrow)$, $-(\downarrow)$ e $\hat{\Delta}$ como:

$$\hat{\Delta} = \begin{pmatrix} \Delta^{++} & \Delta^{+-} \\ \Delta^{-+} & \Delta^{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -d_x + id_y & d_z + \Delta_s \\ d_z - \Delta_s & d_x + id_y \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

onde:

$$\Delta_s = \frac{1}{2}(\Delta^{+-} - \Delta^{-+}) \quad (3.11)$$

$$\vec{d} = \frac{1}{2}(\Delta^{--} - \Delta^{++}, -i(\Delta^{--} + \Delta^{++}), \Delta^{+-} + \Delta^{-+}). \quad (3.12)$$

Note que se $\vec{d} = 0$ temos o caso singleto e no caso tripleto temos que $\Delta_s = 0$. Para um estado quiral tripleto, por exemplo, $\vec{d} = \frac{\Delta_0(k_x + ik_y)}{k_F} \hat{z}$ onde temos a condição $\vec{d} \times \vec{d} = \vec{0}$ sendo satisfeita, \vec{d} é um vetor real. A menos do fator de fase a direção de \vec{d} define a direção na qual o par de Copper têm a projeção do momento angular total de spin nula.

Características interessantes da supercondutividade quiral podem ser obtidas a partir de um modelo levando em conta apenas uma banda [4]. O Rutenato de Estrôncio (Sr_2RuO_4) [31, 4], material candidato a SQ, possui no plano xy a estrutura responsável pela supercondutividade quiral. Sendo assim, tal modelo torna-se muito relevante. Ignorando o acoplamento spin-orbita, e, para o caso tripleto vamos escolher os eixos de quantização de tal forma que $\Delta_{i,j}^{+,-} = 0$. Desta forma, podemos separar a Hamiltoniana (3.9) em duas contribuições [36] uma para os estados $(++)$ e outra para os estados $(--)$. Daí, temos:

$$H = \sum_{k,\sigma} (\epsilon(k) - \mu) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + [\Delta(k) c_{k,\sigma}^\dagger c_{-k,\sigma}^\dagger + H.C.], \quad (3.13)$$

onde:

$$\epsilon(k) = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)), \quad (3.14)$$

$$\Delta(k) = \Delta_0(\sin(k_x) + f(\sigma)i \sin(k_y)), \quad (3.15)$$

onde definimos:

$$f(\sigma) = \begin{cases} +1, \sigma = \uparrow \\ -1, \sigma = \downarrow \end{cases}.$$

Como nosso interesse é estudar as funções termodinâmicas dos modos de Majorana emergente através do cálculo do potencial efetivo V_{eff} , devemos levar a Hamiltoniana da base eletrônica para a base de Majorana. Realizando uma transformada de Fourier nas relações definidas em (2.15),

$$\begin{aligned} c_{k,\sigma} &= \frac{1}{2} (\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} + i\tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}) \\ c_{k,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{2} (\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger - i\tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger), \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde $\tilde{\gamma}$ é o operador de majorana no espaço dos momentos, e:

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_{m,k,\sigma}^\dagger &= \sum_j e^{-ik \cdot x_j} \gamma_{j,m,\sigma}^\dagger \\ \tilde{\gamma}_{m,k,\sigma} &= \sum_j e^{ik \cdot x_j} \gamma_{j,m,\sigma} \\ c_{k,\sigma}^\dagger &= \sum_j e^{-ik \cdot x_j} c_{j,\sigma}^\dagger \\ c_{k,\sigma} &= \sum_j e^{ik \cdot x_j} c_{j,\sigma}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

com $m = 1, 2$ e substituindo na equação (3.13), temos:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{4} \sum_{k,\sigma} (\epsilon(k) - \mu) (\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} + i\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma} - i\tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} + \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}) \\ &\quad + \Delta(k) (\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} - i\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma} - i\tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} - \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}) \\ &\quad + \Delta^*(k) (\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} + i\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma} + i\tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} - \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Observe que $(\epsilon(k) - \mu)$ é uma função par. Logo temos:

$$\sum_k \tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k} = \frac{1}{2} \sum_k \tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k} + \tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k} = \frac{1}{2} \sum_k \tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k} + \tilde{\gamma}_{1,-k} \tilde{\gamma}_{1,-k}^\dagger = g(k)I. \quad (3.19)$$

De forma análoga $\sum_k (\epsilon(k) - \mu) \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} = h(k)I$, onde I é a identidade. Ou seja, quando realizamos a soma dos produtos dos operadores o resultado é um múltiplo da identidade. Além disso, para nossos interesses futuros, os termos do tipo $g(k)I$ são constantes nas variáveis de interesse (parâmetro supercondutor, temperatura e potencial químico).

Como as propriedades termodinâmicas do sistema são obtidas através de derivações destas variáveis, podemos suprimir os termos do tipo $g(k)I$. Logo temos:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{4} \sum_{k,\sigma} (\Delta(k) + \Delta^*(k)) \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} \\
&+ i(\epsilon(k) - \mu - \Delta(k) + \Delta^*(k)) \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma} \\
&+ i(-\epsilon(k) + \mu - \Delta(k) + \Delta^*(k)) \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} .
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Definindo $D \equiv i(\epsilon(k) - \mu - \Delta(k) + \Delta^*(k))$ e $A \equiv \Delta(k) + \Delta^*(k)$ e os campos de Majorana como:

$$\begin{aligned}
\hat{\psi}_{k,\sigma} &= \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma} \\ \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma} \end{pmatrix}, \\
\hat{\psi}_{k,\sigma}^* &= \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger & \tilde{\gamma}_{2,k,\sigma}^\dagger \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

temos:

$$H = \frac{1}{4} \sum_{k,\sigma} \hat{\psi}_{k,\sigma}^* \begin{pmatrix} A & D \\ -D^* & -A \end{pmatrix} \hat{\psi}_{k,\sigma} . \tag{3.21}$$

Observe que a matriz possui termos antissimétricos na diagonal secundária, decorrente dos termos emparelhados $\tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}^\dagger \tilde{\gamma}_{1,k,\sigma}$ terem sinais opostos, que por sua vez proveem do fato dos férmions anticomutarem.

As auto energias das quasipartículas, portanto, são:

$$E = \pm \hbar v_f \sqrt{(\epsilon(k) - \mu)^2 + 4 |\Delta(k)|^2} . \tag{3.22}$$

onde v_f é a velocidade de fermi.

Fazendo $\epsilon(k) = \mu$, e, tomando o limite de baixas energias $k_x, k_y \ll 1$, chegamos a uma dispersão linear (Figura 3.7) que assemelha ao espectro de energia do grafeno próximo aos pontos de Dirac [17], comportando-se como um sistema de partículas livres no regime relativístico:

$$E = \pm 2\hbar v_f |k| . \tag{3.23}$$

Tomando a transformada de Fourier dos operadores eletrônicos em (3.13) , temos:

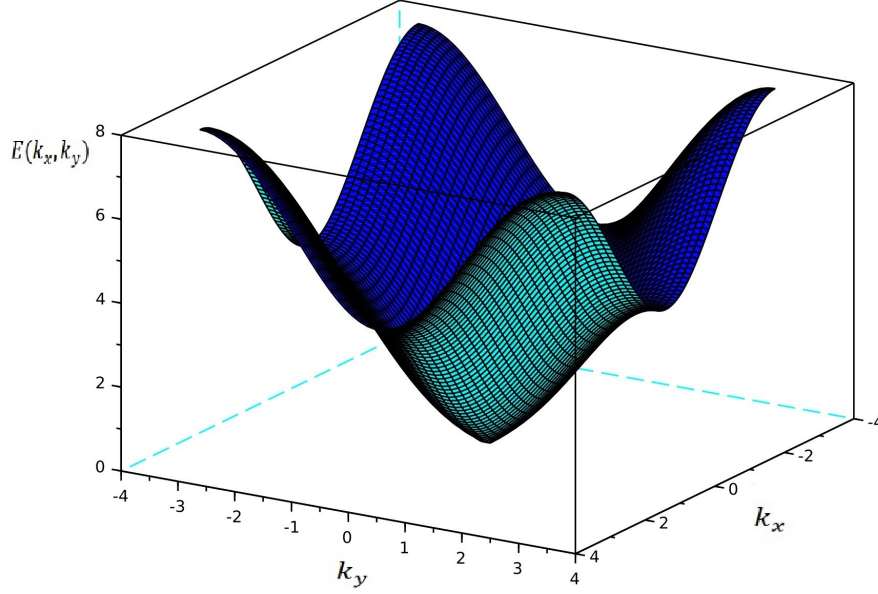


Figura 3.7: Espectro de energia para supercondutor quiral de onda p (Gráfico adimensional).

$$\begin{aligned}
 H_{BdG} = \sum_{i,j,\sigma} & -t(c_{i+1,j,\sigma}^\dagger c_{i,j,\sigma} + h.c.) - t(c_{i,j+1,\sigma}^\dagger c_{i,j,\sigma} + h.c.) - \mu c_{i,j,\sigma}^\dagger c_{i,j,\sigma} \\
 & + (\Delta c_{i+1,j,\sigma}^\dagger c_{i,j}^\dagger + h.c.) + (i\Delta c_{i,j+1,\sigma}^\dagger c_{i,j}^\dagger + h.c.). \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

Os operadores fermiônicos, neste caso, atuam em um ponto (i, j) em uma rede bidimensional discretizada, criando $c_{i,j}^\dagger$ e aniquilando $c_{i,j}$ elétrons nesta rede. Por simplicidade iremos considerar apenas o caso $f(\sigma) = 1$. Note que existe uma anisotropia entre o emparelhamento na direção y , devido a unidade imaginária com relação a direção x , isto provém da quiralidade do parâmetro supercondutor em função do momento. O mesmo fato não é observado para o caso supercondutor de onda p 1D.

Nosso objetivo a partir desse momento é caracterizar as transições de fase topológica da Hamiltoniana (3.22) no estado supercondutor em função do potencial químico. A escolha desta variável é bem sugestiva. A fase topológica está ligada aos iguais graus de liberdade entre elétrons e buracos, sendo assim, é interessante analisar seus níveis de ocupação. Para tanto, seguiremos de perto a proposta adotada no capítulo 16 do livro “Topological Insulators and Topological Superconductors” [36]. A fim de facilitar os cálculos, iremos realizar uma transformação no termo de potencial químico $\mu \rightarrow \mu' - 4t$. Observe que esta transformação apenas irá realizar um deslocamento no nível de energia, sem causar nenhum efeito no comportamento da mesma.

Note que a Hamiltoniana é invariante para uma transformação de calibre $c_k \rightarrow \exp(i\theta/2) c_k$, $c_k^\dagger \rightarrow \exp(-i\theta/2) c_k^\dagger$, $\Delta(k) = |\Delta| \exp i\theta$. Assim podemos escrever a Hamiltoniana de Bloch do sistema como:

$$H_{BdG} = \left((4t - \mu' - 2t[\cos(k_x) - \cos(k_y)]) \sigma^3 - 2|\Delta| \sin(k_x) \sigma^2 - 2|\Delta| \sin(k_y) \sigma^1 \right), \quad (3.25)$$

onde podemos definir o termo de massa de Wilson $M(k) = 4t - \mu' - 2t[\cos(k_x) - \cos(k_y)]$. O espectro de energia das quase-partículas nesse caso é dado por:

$$E = \pm \sqrt{(M(k))^2 + 4|\Delta|^2 (\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y))}.$$

Note que o gap não se fecha a menos que $M(k)$, $\sin(k_x)$ e $\sin(k_y)$ se anulem simultaneamente. Examinando restritamente a metade positiva da primeira zona de Brillouin, portanto, cada termo em função dos pontos (k_x, k_y, μ') , o gap se fechará em $(0, 0, 0)$, $(\pi, 0, 4t)$, $(0, \pi, 4t)$ e $(\pi, \pi, 8t)$. Veremos adiante que para $\mu' < 0$ e $\mu' > 8t$ temos a fase supercondutora trivial e para $0 < \mu' < 4t$ e $4t < \mu' < 8t$ a fase supercondutora topológica, cada qual com quiralidade oposta. Esta caracterização pode ser feita utilizando o *Chern number* (CN) definido a partir do operador projetor. Porém como a carga não é uma grandeza conservada nesse caso, não podemos estabelecer uma conexão com a condutância do efeito Hall Quântico (EHQ)[17]. Antes de realizar o cálculo do CN faremos uma argumentação física sobre a natureza das fases para o caso $\mu' = 0$. Para as análises feitas adiante assumamos $t = \frac{1}{2}$ para simplificações.

Em um regime de baixas energias estamos olhando para as transições em torno do ponto $(k_x, k_y, \mu') = (0, 0, 0)$. A ideia por trás do método adotado é realizar uma deformação adiabática na Hamiltoniana onde o gap de energia se fecha em $\mu' = 0$, criando duas interfaces: $\mu' < 0$ e $\mu' > 0$. Se existir uma interpolação contínua na interface, os dois intervalos possuem a mesma fase topológica. Caso contrário, se a interpolação for descontínua, possui fases topológicas distintas. Tomemos um simples exemplo em que:

$$\mu'(x) = \begin{cases} -\mu'_0, & x < 0 \\ \mu'_0, & x > 0 \end{cases},$$

onde μ'_0 é constante. Como a interface não varia ao longo da componente y , podemos tomar k_y como um bom número quântico a fim de simplificar cálculos, sendo assim ele é tratado como um valor constante e não um operador. Queremos mostrar que existe uma solução na interface das regiões $\mu' < 0$ e $\mu' > 0$, o que impede conectar de forma contínua as duas fases. Tomando a Hamiltoniana da equação (3.24) e definindo o campo eletrônico como $\hat{\Psi} = (c_k, c_{-k}^\dagger)$, em 1D para uma única partícula temos [36]:

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\mu'(x) & 2i|\Delta|(-i\frac{d}{dx} + ik_y) \\ -2i|\Delta|(-i\frac{d}{dx} - ik_y) & \mu'(x) \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

cujo o auto estado da interface é dado por:

$$|\Psi_{k_y}(x, y)\rangle = e^{ik_y y} \exp\left(-\frac{1}{2|\Delta|} \int_0^x \mu'(x') dx'\right) |\phi_0\rangle, \quad (3.27)$$

onde $|\phi_0\rangle$ é um *spinor* normalizado.

Como já mencionado anteriormente, nosso interesse é no ponto em que $k_y = 0$ onde o gap se fecha ($E = 0$). Portanto a Hamiltoniana se reduz a:

$$H |\Psi_0(x, y)\rangle = \begin{pmatrix} -\mu'(x) & \mu'(x) \\ -\mu'(x) & \mu'(x) \end{pmatrix} |\phi_0\rangle = 0, \quad (3.28)$$

donde podemos concluir que $|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Note que o termo proporcional k_y na equação (3.24) é $-2|\Delta|k_y\sigma_1$. Observe também $\sigma_1 |\phi_0\rangle = +1 |\phi_0\rangle$, ou seja, o spinor $|\phi_0\rangle$ é auto estado de σ_1 , conseqüentemente $|\Psi_{k_y}(x, y)\rangle$ é um auto estado de H com energia $E(k_y) = -2|\Delta|k_y$. Assim, encontramos uma solução na interface das regiões $\mu' < 0$ e $\mu' > 0$, para estes estados ligados. O conjunto de estados ligados, parametrizados pelo número quântico k_y , possui gap nulo na interface. Resta, portanto, caracterizar as duas fases: trivial e topológica. A ideia é utilizar o fato que no estado topológico o sistema deve exibir quasi partículas, que em sistemas 2D, aparecem desacopladas espacialmente nas bordas do sistema. Esses estados de bordas são caracterizados pelo CN como já foi mencionado anteriormente. Considere assim uma Hamiltoniana na forma:

$$\mathcal{H} = h(k) \cdot \sigma, \quad (3.29)$$

onde $h(k)$ é uma função suave não nula para todo k onde o gap não é nulo no *bulk*. Podemos definir um vetor unitário $\hat{h}(k)$ que mapeia o espaço dos momentos 2D em uma esfera unitária. Assumiremos agora que $\hat{h}(k)$ converge quando $|k| \rightarrow \infty$, assim o número de vezes que o mapeamento cobre toda a esfera unitária define um invariante topológico CN:

$$\mathcal{C} = \int \frac{d^2k}{4\pi} \left[\partial_{k_x} \hat{h} \times \partial_{k_y} \hat{h} \right]. \quad (3.30)$$

O integrando define um ângulo sólido, que pode ser positivo ou negativo, enquanto $\hat{h}(k)$ varre a esfera unitária. A integral sobre todos os k produz um inteiro que é invariante por pequenas deformações da função $\hat{h}(k)$, sendo que este número só muda quando o gap de energia se fecha, o que faz com que \hat{h} não seja bem definido no fechamento.

Para a Hamiltoniana em (3.23), temos que $h_x = \text{Re}[\Delta(k)] = \Delta_0 \cos(k_x)$, $h_y = \text{Im}[\Delta(k)] = \pm \Delta_0 \sin(k_y)$ e $h_z = M(k)$. Assim, note que para $|k|$ fixo, as componentes x e y de \hat{h} varrem um círculo na esfera em uma altura h_z . Para $\mu' < 0$ como $|k| > 0$, na fase trivial, h_z começa a varrer a esfera no polo norte, decresce até o equador e retorna ao polo norte, fazendo com que a contribuição adquirida na primeira etapa seja totalmente debitada logo em seguida, na segunda etapa. Deste modo, o CN é nulo na fase trivial. Para $\mu' > 0$, a fase topológica, h_z varre a esfera de norte a sul uma única vez, sem retornar ao norte, de modo que, nesse caso, o CN é -1 para quiralidade $k_x + ik_y$ e $+1$ para quiralidade $k_x - ik_y$ (Figura 3.8).

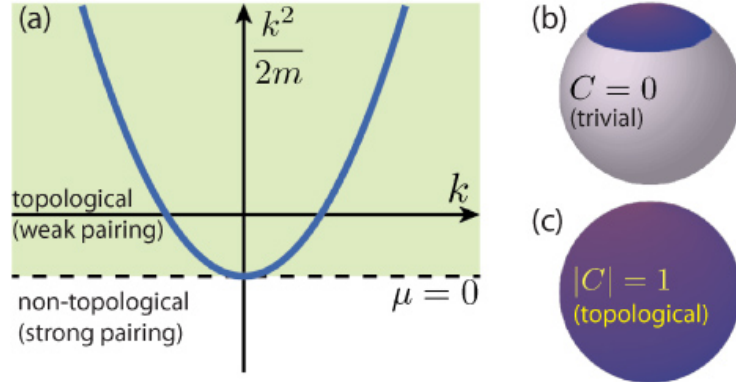


Figura 3.8: (a) Energia cinética para um gás de elétrons livres 2D que exibe supercondutividade $k_x + ik_y$. Para $\mu' < 0$ temos a fase trivial (b) e para $\mu' > 0$ temos a fase topológica (c) (Fonte: referência [41]).

A consequência da existência do CN não trivial, como já mencionado, é a existência de MZM desacoplados espacialmente, cada qual descrevendo um vórtice no centro e nas bordas cujo fluxo de cada é $\Phi = \frac{\hbar c}{4\pi e}$ (Figura 3.9), para um sistema supercondutor quiral.

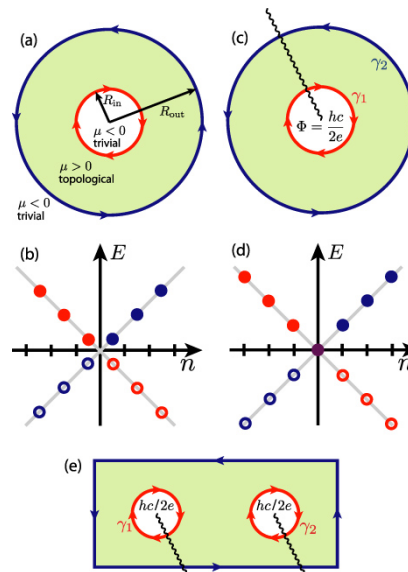


Figura 3.9: (a) Um supercondutor topológico quiral que suporta modos de Majorana na borda em seus limites interno e externo. (b) Espectro de energia versus o momento angular n para os estados interno (vermelho círculos) e estados de aresta externo (círculos azuis) na configuração de (a). Aqui n assume valores de meio inteiro porque os modos de Majorana exibem condições de contorno anti-periódicas no anel. Um fluxo de $\frac{hc}{2e}$ perfura a região central trivial como em (c) introduz um corte de ramo (linha ondulada) que, quando cruzada, leva a uma mudança de sinal para modos de Majorana na borda. O fluxo, portanto, muda as condições de contorno para periódico e muda n para valores inteiros. Isso leva ao espectro em (d), que inclui os MZM γ_1 e γ_2 localizados em as bordas internas e externas. A configuração dos dois vórtices em (e) suporta um MZM localizado em torno de cada pulso, enquanto o limite externo permanece aberto (Fonte: referência [41]).

Capítulo 4

Potencial efetivo para Supercondutor quiral

4.1 Formalismo de integrais funcionais para Potencial efetivo

Nesta primeira seção será discutido, com o enfoque em partículas fermiônicas, a obtenção da função partição Z de um sistema de muitos corpos e, conseqüentemente, o potencial efetivo,

$$V_{eff} = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \quad (4.1)$$

através do formalismo de integrais funcionais [40, 42, 43]. Diversas propriedades termodinâmicas importantes do sistema podem ser derivadas a partir do potencial efetivo, como a entropia (S) e a energia termodinâmica ($E = -PV + TS + \mu_i N_i$) [44, 45] por exemplo, via mecânica estatística de equilíbrio. Para tanto existem três tipos de ensemble. O ensemble microcanônico é usado para descrever um sistema isolado com a energia E , o número de partículas e o volume fixados. No ensemble canônico descreve-se um sistema em contato com um reservatório de calor a uma temperatura T , trocando energia livremente. Neste caso o número de partículas e o volume são fixos. No ensemble grande canônico é permitido a troca de partículas e energia com o reservatório de modo que a temperatura, o volume V e o potencial químico são mantidos fixos. Essas grandezas são, respectivamente, multiplicadores de Lagrange do potencial efetivo, da pressão e do número de partículas.

Focaremos neste trabalho em obter a dependência do gap supercondutor em função da temperatura, o diagrama de fase supercondutor, a densidade de partículas nos regimes onde o sistema sofre transição de fase de ordem topológica [36], a entropia e o calor específico. De forma geral [11, 16]:

$$Z = \int [d\psi_i^*][d\psi_i] e^{-\int_0^\beta \mathcal{L} d\tau}, \quad (4.2)$$

sendo $\tau = it$ o tempo imaginário,

$$\mathcal{L} = \psi^* \gamma^0 \left(\gamma^0 \frac{\partial}{\partial \tau} + i\gamma \cdot \nabla + m \right) \psi = \sum_j \psi_j^* \partial_\tau \psi_j - \mathcal{H}, \quad (4.3)$$

a Lagrangeana do sistema, ψ o campo de Nambu para férmions e $\mathcal{H} = H_{BdG} + \frac{|\Delta(k)|^2}{g}$. O último termo da equação (4.3), além da Hamiltoniana de campo médio, aparece um termo que provém de uma aproximação de campo médio no termo quártico original que descreve sistemas supercondutores. Este termo é independente dos campos, por isso não levamos ele em consideração até então nos nossos cálculos. Note que a integral da Lagrangeana é realizada sobre o tempo imaginário, porém, os limites de integração têm dimensão do inverso da temperatura. Isso pode trazer alguma estranheza, mas a conexão entre os dois se dá pelas frequências de Matsubara para férmions $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$, com n inteiro, (ver o Apêndice B) quando, em particular, realizamos uma transformada de Fourier nos operadores de Majorana, dada por:

$$\begin{aligned} \gamma_{j,m}^\dagger &= \sum_k \sum_n e^{i(k \cdot x_j + \omega_n \tau)} \tilde{\gamma}_{m,n,k}^\dagger \\ \gamma_{j,m} &= \sum_k \sum_n e^{i(k \cdot x_j + \omega_n \tau)} \tilde{\gamma}_{m,-n,-k} \end{aligned}, \quad (4.4)$$

onde para férmions é dado por $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$, $m = 1, 2$. Note também que, das relações em (4.3), $\tilde{\gamma}_{m,n,k}^\dagger = \tilde{\gamma}_{m,-n,-k}$. Além disso, realizando uma transformada de Fourier em ambos os lados das equações em 2.8 e o fato de que $\{c_k^\dagger; c_l\} = \delta_{k,l}$, temos:

$$\{c_k^\dagger, c_l\} = \{\tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{1,l}^\dagger\} + \{\tilde{\gamma}_{2,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{2,l}^\dagger\} + i\{\tilde{\gamma}_{1,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{2,l}^\dagger\} - i\{\tilde{\gamma}_{2,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{1,l}^\dagger\} = 4\delta_{k,l}. \quad (4.5)$$

Como as relações de anticomutação não podem mudar por uma troca dos índices 1, 2, o terceiro e o quarto termo da expressão (4.5) devem ter resultados iguais. Indo mais além, como possuem sinais opostos, a única solução possível é se ambos forem iguais a zero, restando assim apenas os dois primeiros termos. De modo geral temos a relação de anticomutação que será muito útil mais adiante:

$$\{\tilde{\gamma}_{m,n,k}^\dagger, \tilde{\gamma}_{m',n',k'}^\dagger\} = 2\delta_{m,m'}\delta_{n,n'}\delta_{k,k'}. \quad (4.6)$$

Para o cálculo da integral em (4.2), no caso dos férmions, podemos recorrer a resultados sobre variáveis de Grassmann. Define-se uma variável de Grassmann η que obedece a Álgebra $\{\eta_i; \eta_j\} = \{\eta_i; \eta_j^\dagger\} = \{\eta_i^\dagger; \eta_j^\dagger\} = 0$ [46, 47]. O resultado desta Álgebra que nos interessa segue a seguir.

Teorema da integral de Grassmann: Seja η uma variável de Grassmann, então:

$$Z = \int [d\eta_i^\dagger][d\eta_i] e^{\eta^\dagger M \eta} = \det M. \quad (4.7)$$

Além disso, vamos definir os campos de Nambu dos operadores de Majorana (Campo de Majorana) no espaço dos momentos, com a frequência de Matsubara, como:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{n,k,\sigma} &= \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_{1,k,n,\sigma} \\ \tilde{\gamma}_{2,k,n,\sigma} \end{pmatrix}, \\ \hat{\psi}_{n,k,\sigma}^* &= \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_{1,k,n,\sigma}^\dagger & \tilde{\gamma}_{2,k,n,\sigma}^\dagger \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Comparando a equação (4.7) com a equação (4.8), e como os campos de Nambu para Majoranas no espaço de nambu são variáveis de Grassmann independentes, observe que a matriz M é a matriz da densidade Langrangeana justaposta por $\hat{\psi}_{n,k,\sigma}^*$ e $\hat{\psi}_{n,k,\sigma}$ e integrada em τ de 0 a β . Nossa proposta é calcular o potencial efetivo para o modelo discutido na seção 3.4. Assim, note que na equação (3.21), a Hamiltoniana não leva o fator $e^{i\omega_n\tau}$ em consideração na transformada de Fourier dos campos. Fazendo esta correção, temos:

$$H_{BdG} = \frac{1}{4} \sum_{n,n'} \sum_{k,\sigma} \hat{\psi}_{n,k,\sigma}^* \begin{pmatrix} A & D \\ -D^* & -A \end{pmatrix} \hat{\psi}_{n',k,\sigma} e^{i(\omega_n - \omega_{n'})\tau}. \quad (4.9)$$

O efeito do termo multiplicativo em (4.9), quando realizamos a integral em τ definida de 0 a β , é aparecer um fator β multiplicando a Hamiltoniana obtida em (3.21). Desta forma, temos:

$$\int_0^\beta H_{BdG} = \frac{\beta}{4} \sum_{n,k,\sigma} \hat{\psi}_{n,k,\sigma}^* \begin{pmatrix} A & D \\ -D^* & -A \end{pmatrix} \hat{\psi}_{n,k,\sigma}. \quad (4.10)$$

Por fim, resta calcular as contribuições de $\hat{\psi}^* \partial_\tau \hat{\psi}$ e $\frac{|\Delta(k)|^2}{g}$ no espaço dos momentos quando integramos no tempo imaginário no intervalo de 0 a β . A última contribuição é trivial, enquanto a primeira é dada calculando a transformada de Fourier do termo, que é:

$$\sum_{(j,\sigma)} \int_0^\beta \hat{\psi}_{j,\sigma}^* \partial_\tau \psi_{j,\sigma} = i \sum_{n,k,\sigma} \hat{\psi}_{n,k,\sigma}^* \omega_n I_2 \hat{\psi}_{n,k,\sigma}. \quad (4.11)$$

Desta forma, podemos reescrever a integral da Lagrangeana como:

$$\int_0^\beta \mathcal{L} d\tau = - \sum_{n,k,\sigma} \hat{\psi}_{n,k,\sigma}^* \beta \begin{pmatrix} \omega_n - \frac{A}{4} & -\frac{D}{4} \\ \frac{D^*}{4} & \omega_n + \frac{A}{4} \end{pmatrix} \hat{\psi}_{n,k,\sigma} - \sum_{k,\sigma} \beta \frac{|\Delta(k)|^2}{g}. \quad (4.12)$$

Note que o termo $\sum_{n,k,\sigma} \beta \frac{|\Delta(k)|^2}{g}$ não depende dos campos de Majorana, desta forma, do teorema das variáveis de Grassmann, temos imediatamente:

$$M = \sum_{n,k,\sigma} \beta \begin{pmatrix} \omega_n - \frac{A}{4} & -\frac{D}{4} \\ \frac{D^*}{4} & \omega_n + \frac{A}{4} \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Portanto:

$$V_{eff} = -\frac{1}{\beta} \sum_{n,k,\sigma} \ln \left[\beta^2 \left(\omega_n^2 + \frac{(|D|^2 - A^2)}{16} \right) \right] - \sum_{k,\sigma} \beta \frac{|\Delta(k)|^2}{g}. \quad (4.14)$$

Definido $|b| \equiv \sqrt{\frac{(|D|^2 - A^2)}{16}}$, vamos realizar a soma sobre as frequências de Matsubara. Observe que:

$$\sum_n \ln[\beta^2(\omega_n^2 + |b|^2)] = \sum_n \left(\int_1^{\beta|b|} \frac{2x}{x^2 + (2n+1)^2\pi^2} dx + \ln[1 + (2n+1)^2\pi^2] \right). \quad (4.15)$$

A série que aparece, quando realizamos o somatório em n , é bem conhecida a sua convergência [36]. Assim, temos:

$$\int_1^{e^{\beta|b|}} 1 - \frac{2}{e^x + 1} dx + \sum_n \ln[1 + (2n+1)^2 \pi^2] = \beta|b| + 2 \ln(1 + e^{-\beta|b|}) + \sum_n \ln[1 + (2n+1)^2 \pi^2]. \quad (4.16)$$

Podemos ignorar o último termo da equação (4.16), pois ele é constante nas variáveis de interesse. Além disso, note que na equação (4.14) o termo dentro do somatório não depende de σ , portanto, o potencial efetivo será duas vezes o valor para uma cadeia sem spin. Para não deixar a notação carregada, optamos por realizar uma transformada de Fourier discreta. Na realidade esta transformada deve ser contínua. Assim:

$$\sum_k \longrightarrow \frac{1}{V^{\frac{d}{2}}} \int d^d k. \quad (4.17)$$

onde $d = 2$ é a dimensão do espaço e V têm dimensão de área. A expressão geral para o potencial efetivo é:

$$V_{eff} = -2 \times \frac{1}{V\beta} \int \left[\beta|b| + 2 \ln(1 + e^{-\beta|b|}) - \frac{\beta|\Delta(k)|^2}{g} \right] d^2 k. \quad (4.18)$$

O fator multiplicativo 2 na expressão do potencial efetivo provem da natureza do spin $\frac{1}{2}$ dos férmions. Note, também, que não é claro a contribuição de μ (partícula) e $-\mu$ (antipartícula) individualmente, que é explicado pelo fato do módulo do potencial químico ser relevante para o estado topológico. Assim torna-se natural o fator multiplicativo 2 no logaritmo neperiano. Isto ficará mais claro quando analisarmos a densidade de partículas e antipartículas, que no estado topológico, deve exibir uma mistura de elétrons e buracos.

4.2 Diagramas de fase supercondutor, densidade de partículas, entropia e calor específico

Podemos derivar diversas propriedades termodinâmicas do potencial efetivo. Porém, não é possível encontrar assinaturas de MZM a partir do formalismo das funções termodinâmicas, pois a transição de fase entre o estado supercondutor trivial e topológico não é devido a uma quebra de simetria do sistema, assim como ocorre no Efeito Hall Quântico. Todavia, é possível obter a dependência do gap com as demais variáveis do sistema a partir do mínimo do potencial efetivo com respeito ao parâmetro do supercondutor. Assim:

$$\frac{\partial V_{eff}}{\partial |\Delta_0|} = 0.$$

$$\int (\sin^2 k_x + \sin^2 k_y) \left[-\frac{2}{g} + \frac{\tanh\left(\frac{\beta|b|}{2}\right)}{|b|} \right] d^2k = 0. \quad (4.19)$$

Conseguimos obter uma representação gráfica do parâmetro supercondutor em função da temperatura $|\Delta_0|(T)$ para a equação (4.19) na vizinhança dos pontos onde o gap de energia das quasi- partículas se fecha. Em torno desses pontos, como já discutido na seção 3.4, a dispersão da energia tem comportamento linear, típico de partículas livres relativística. Assim, torna-se razoável nosso interesse apenas nesses pontos. Note que $|b| = E/4$, daí tomando a mesma aproximação linear para a energia e definimos Λ o *cutoff* de energia na primeira zona de Brillouin tomando uma circunferência como uma boa aproximação e levando em conta o estado topológico $t = |\Delta_0|$ e $\mu = 0$, usando uma integração em coordenadas polares temos:

$$\int_0^\Lambda \left[-\frac{2k^2}{g} + \frac{k \tanh\left(\frac{\beta|\Delta_0|k\sqrt{4+k^2}}{8}\right)}{|\Delta_0|\sqrt{4+k^2}} \right] kdk = 0. \quad (4.20)$$

Podemos obter explicitamente o valor do parâmetro supercondutor máximo $|\Delta_0|_c$ tomando o limite em que a temperatura é nula $\beta \rightarrow \infty$. Assim, da equação (4.20), temos no estado topológico $\mu = 0$ e $t = \Delta_0$:

$$|\Delta_0|_c = \frac{g}{8\Lambda^4} \left(2\Lambda\sqrt{1+4\Lambda} - \operatorname{arcsinh} 2\Lambda \right). \quad (4.21)$$

Vamos analisar aqui a derivada de $|\Delta_0|$ em relação a temperatura T . Podemos obter de forma implícita a partir da equação equação (4.20)::

$$\int_0^\Lambda \frac{d|\Delta_0|(T)}{dT} kdk = \frac{1}{T^2} \int_0^\Lambda \left[\frac{\frac{k}{8} \operatorname{sech}^2(\theta)}{\frac{k}{8T|\Delta_0|} \operatorname{sech}^2(\theta) - \frac{1}{|\Delta_0|\sqrt{4+k^2}} \tanh(\theta)} \right] kdk \quad (4.22)$$

onde $\theta = \frac{|\Delta_0|k\sqrt{4+k^2}}{8T}$. Observando o comportamento do segundo membro da igualdade, quando $T \rightarrow 0$, o itegrando é sempre negativo (nesse limite $\operatorname{sech}^2(\theta) < \tanh(\theta)$). Assim o primeiro membro da igualdade também será. Mais que isso, a função será decrescente.

Como a função $|\Delta_0|(T)$ está definida apenas para $T > 0$, o valor $|\Delta_0|_C$ será o máximo da função. Além disso o comportamento da curva $|\Delta_0|(T)$ como todo será côncava para baixo.

Estudando o comportamento da função $|\Delta_0|(T)$ quando o parâmetro supercondutor se anula, obtemos:

$$\beta_c = \frac{12\Lambda}{g}. \quad (4.23)$$

Note que o parâmetro supercondutor possui valor máximo quando a temperatura vai a zero, o que está em perfeito acordo com o previsto pela teoria BCS, e que diminui a medida que a temperatura aumenta até atingir o valor zero em T_C quando a supercondutividade desaparece totalmente. Note que da equação (4.20), apesar do potencial efetivo depender do volume do sistema, o parâmetro supercondutor não depende do volume, como esperado. Tomando os valores normalizados em (4.21) e (4.23) e diante da informações exposta podemos construir o gráfico da curva $|\Delta_0|(T)$ (Figura 4.1 a).

Observe ainda, que tanto $\frac{|\Delta_0|_C}{g} = \frac{1}{\Lambda^4} (\Lambda\sqrt{1+4\Lambda} - \operatorname{arcsinh} 2\Lambda)$ (Figura 4.1 b) é sempre positivo para todo $\Lambda \geq 0$, quanto a função do integrando. Assim, o parâmetro supercondutor deve ser positivo e finito para qualquer valor de g positivo.

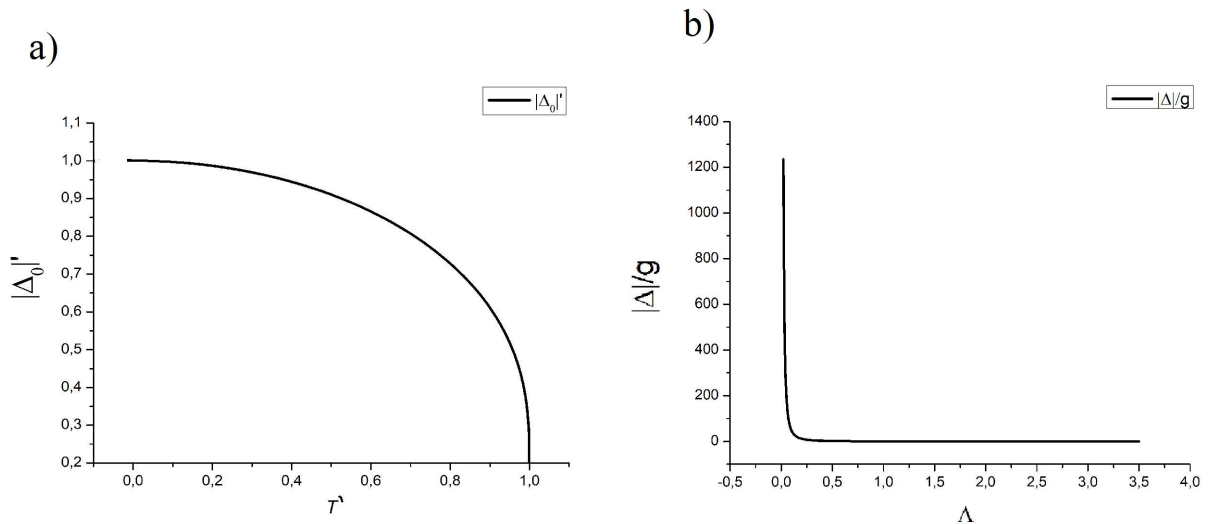


Figura 4.1: (a) Diagrama de fase supercondutor, onde $|\Delta_0'| = |\Delta_0|/|\Delta_c|$ e $T' = T/T_c$. (b) Comportamento da $|\Delta_0|_C/g$ para valores de Λ não negativo.

Outra maneira de obter informações do sistema é através de uma análise da densidade de partículas, que no caso, é a densidade de elétrons (ou buracos) pois o potencial químico no estado topológico é o mesmo para ambos. Podemos obter através da equação [16, 45]:

$$N_e = -\frac{\partial V_{eff}}{\partial \mu}. \quad (4.24)$$

Logo:

$$N_e = \frac{1}{8V} \int \left[\frac{\mu + 2t(\cos k_x + \cos k_y)}{|b|} \right] \tanh\left(\frac{\beta|b|}{2}\right) dk. \quad (4.25)$$

A função que aparece dentro do integrando é a densidade de partículas. Observe que o domínio da função $\tanh(\beta|b|/2)$ é $[0, 1[$, onde deve ter valor máximo quando $\beta \rightarrow \infty$, ou seja, quando estamos em um limite de temperaturas nulas e, portanto, a densidade de partículas será máxima. Assim temos:

$$n_e = \frac{\mu + 2t(\cos k_x + \cos k_y)}{|b|}. \quad (4.26)$$

Na seção 3.4 discutimos que tomando $\mu = \mu' - 4t$ as transições de fase ocorrem em $\mu' = 0$ e $\mu' = 8t$ em que para $0 < \mu' < 8t$ temos a fase topológica, enquanto para todo resto temos a fase trivial. Assim, em termos de μ , observe que a densidade para $|\mu| < 4t$ na equação (4.26) varia desde valores negativos a valores positivos, coincidindo com o intervalo onde o sistema está na fase topológica, enquanto para $\mu < -4t$ e $\mu > 4t$, temos apenas ou densidade positiva ou negativa (Figura 4.2), onde o sistema está na fase trivial. Portanto, como esperado, MZM emergem na fase topológica, onde temos iguais graus de liberdade entre elétrons e buracos, visto que MZM é a sobreposição dos mesmos, enquanto na fase trivial esta condição não se verifica.

Como a entropia é uma função homogênea de primeiro grau da energia, volume e número de partículas, podemos definir a entropia por unidade de volume $s(T, N) = \frac{S(T, V, N)}{V}$. A entropia termodinâmica em função da temperatura por unidade de volume pode ser obtida através da relação [45]:

$$s(T) = -\left(\frac{\partial V_{eff}}{\partial T}\right)_N = -\left[\left(\frac{\partial V_{eff}}{\partial T}\right)_{|\Delta_0|} + \left(\frac{\partial V_{eff}}{\partial |\Delta_0|(T)}\right)\left(\frac{\partial |\Delta_0|(T)}{\partial T}\right)\right] \quad (4.27)$$

onde, da equação (4.18), $V_{eff} = V_{eff}(T, |\Delta_0|(T))$. Assim, se consideramos o limite de baixas temperaturas, ou seja, em um regime cuja a variação do parâmetro supercondutor com relação à temperatura é muito pequena ou até mesmo irrelevante, podemos tomar $\frac{\partial |\Delta_0|(T)}{\partial T} = 0$. Portanto, temos:

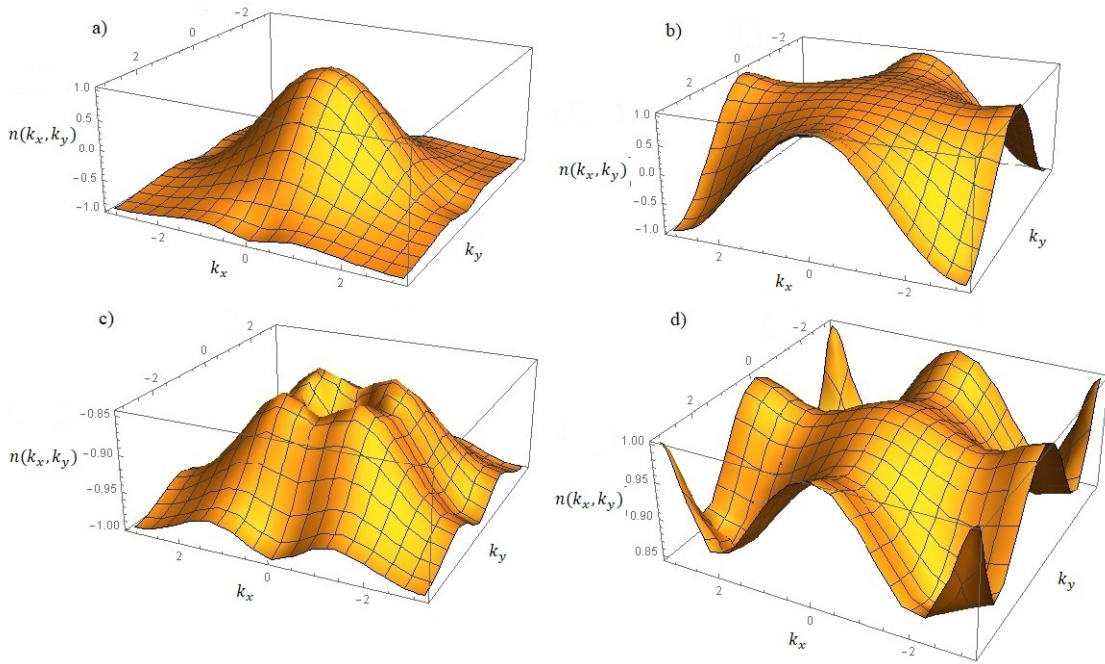


Figura 4.2: Gráfico da densidade de partículas para diversos valores de (μ, t, Δ) . Note que para (a) $(-1, 0.5, 0.5)$ e (b) $(1, 0.5, 0.5)$ temos densidade positiva e negativa coexistindo (fase topológica), enquanto para (c) $(-3, 0.5, 0.5)$ temos apenas densidade negativa e (d) $(3, 0.5, 0.5)$ densidade positiva (fase trivial).

$$s(T) = \frac{2|b| \exp[-|b|/T]}{(1 + \exp[-|b|/T]) T} + 2 \ln(1 + \exp[-|b|/T]), \quad (4.28)$$

Levando em conta o mesmo regime de baixas temperaturas, o calor específico por unidade de volume (Figura 4.3 (b)) é dado por [45]:

$$c_V^{(1)}(T) = \frac{-2|b|^2 \exp[-2|b|/T]}{(1 + \exp[-|b|/T])^2 T^3} + \frac{2|b|^2 \exp[-|b|/T]}{(1 + \exp[-|b|/T]) T^3}. \quad (4.29)$$

No livro *Introduction to Condensed Matter Physics* [23] é obtido uma expressão para o c_V de um sistema supercondutor convencional:

$$\frac{C_V}{V} = c_V^{(2)} = 2N(0)|\Delta_0| \sqrt{\frac{2\pi|\Delta_0|^3}{T^3}} \exp\left(\frac{-|\Delta_0|}{T}\right) \quad (4.30)$$

onde $N(0)$ é a densidade de estados a temperatura nula.

Esta expressão, foi obtida usando uma representação na base eletrônica e considerando o limite de baixas temperaturas para um supercondutor convencional. Observe que o calor específico na equação (4.30), se anula quando $T \rightarrow 0$ e quando $T \rightarrow \infty$. O comportamento assintótico é semelhante obtido nos nossos cálculos (equação (4.29)) usando uma representação na base de Majorana(Figura 4.3).

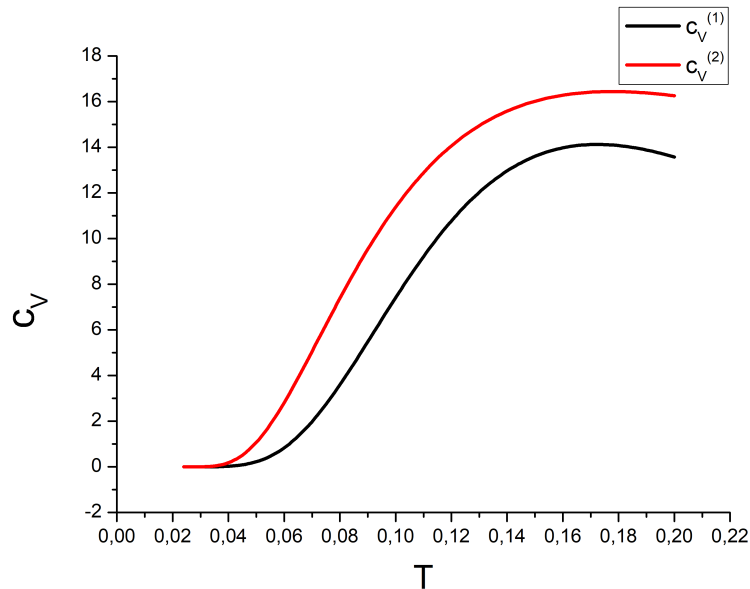


Figura 4.3: Gráfico do calor específico em função da temperatura (adimensional). O gráfico em azul é o nosso resultado (4.29) e em vermelho obtido a partir da referência [23]. Ambos foram plotados considerando $|\Delta_0| = t = 1$.

4.3 Parâmetro de interação crítico g_C para o Sr_2RuO_4

Em 1994 foi descoberto a supercondutividade no *Rutenato de Estrôncio* Sr_2RuO_4 por Yoshi Maeno e seus colaboradores e, posteriormente, trabalhos teóricos propunham que o material era de onda- p quiral em analogia ao He_3 [48, 49]. Além disso, outros trabalhos apontam para o pareamento tripleto [50] e para a quebra de SRT [51]. Sendo assim, o modelo simples discutido na seção 3.4 pode ser aplicado aqui, fornecendo um comparativo dos nossos cálculos teóricos com resultados experimentais. Contudo, ainda existem questões em aberto como a caracterização completa da estrutura do gap supercondutor.

O Sr_2RuO_4 possui uma estrutura cristalina tetragonal semelhante aos cupratos (Figura 4.4). O material é composto por camadas de RuO_2 , plano ab , hibridizadas com camadas de estrôncio e O_2 [4]. A resistividade é maior na direção c , tornado o plano ab responsável pela supercondutividade não convencional. Os parâmetros de rede são $a = b = 0,39 \text{ nm}$ e $c = 1,27 \text{ nm}$ [56]. A temperatura crítica de transição $T_C = 1,5 \text{ K}$ [52, 53, 63, 60] e o parâmetro de *hopping* no plano é da ordem de $0,4 \text{ eV}$ [54] enquanto o

$$cutoff \text{ é } \Lambda = \frac{\hbar v_f \pi}{a} = 0,23 \text{ eV} .$$

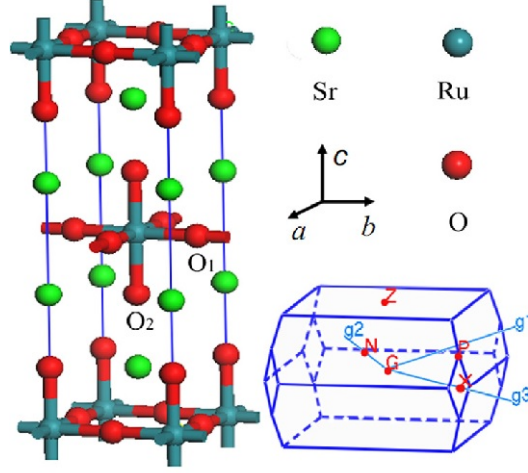


Figura 4.4: Estrutura cristalina e a primeira zona de Brillouin do Sr_2RuO_4 (Fonte: referência [63]).

O parâmetro de interação elétron-elétron para um supercondutor é dado pela lei experimental [57]:

$$g_{SC} = -\frac{1}{N(0) \ln\left(\frac{T_C}{\Theta}\right)} \quad (4.31)$$

onde $N(0)$ é a densidade de estados a nível de energia zero e Θ é temperatura de Debye. Em metais, a densidade de estados a energia zero é aproximadamente a densidade de estados ao nível de Fermi. Assim para Sr_2RuO_4 temos que $N(0) \approx N(\varepsilon_F) = 0,5$ estados por eV [58] e $\Theta = 475,0 K$ [58, 63]. Logo:

$$g_{SC} \approx 0,4 \text{ eV} . \quad (4.32)$$

Com este resultado podemos, por exemplo, comparar com o valor do parâmetro de interação crítica g_C usando a equação (4.18). Considere o limite $k \rightarrow 0$, o potencial químico nulo a temperatura nula, então o termo dependente do logaritmo Neperiano se anula, restando apenas os outros dois termos. Em uma aproximação, podemos também considerar que a primeira ZB seja uma circunferência de raio Λ . Assim utilizando coordenadas polares, temos:

$$V_{eff} = \frac{4\pi}{V} \int_0^\Lambda \left[-|b| + \frac{\beta |\Delta(k)|^2}{g} \right] k dk \quad (4.33)$$

$$|b| = \frac{k\sqrt{t^2k^2 + 4|\Delta|^2}}{4}. \quad (4.34)$$

Agora tomando o mínimo do potencial efetivo com relação ao parâmetro supercondutor, temos:

$$\frac{\partial V_{eff}}{\partial |\Delta_0|} = \frac{4\pi|\Delta_0|}{V} \left(\int_0^\Lambda k^3 \left[\frac{2}{g} - \frac{1}{k\sqrt{t^2k^2 + |\Delta_0|^2}} \right] dk \right) = 0. \quad (4.35)$$

Note que a equação acima, uma possível solução é $|\Delta_0| = 0$. A outra solução é o termo entre parênteses se anular também. Resolvendo a integral, obtemos a expressão:

$$\frac{\Lambda^4}{2g} - \left(\frac{t\Lambda\sqrt{t^2\Lambda^2 + 4|\Delta_0|^2} - 4|\Delta_0|^2 \ln \left[\frac{2|\Delta_0|}{t\Lambda + \sqrt{t^2\Lambda^2 + 4|\Delta_0|^2}} \right]}{2t^3} \right) = 0 \quad (4.36)$$

Observe que $|\Delta_0| \geq 0$, isto significa que se escrevermos $|\Delta_0|$ em função de g ela só será válida a partir de um g_C que é a raiz da função. Este resultado é esperado, como g é um parâmetro de interação entre elétrons, a supercondutividade só aparecerá no material se for suficiente para a formação de pares de Cooper. Embora a equação (4.36) não permita obter uma solução analítica para o problema, escrever $|\Delta_0|$ em função de g , podemos utilizar de métodos computacionais para procurar raízes. O gráfico abaixo (Figura 4.5) foi plotado utilizando como parâmetros $t = \Lambda = 1$. Note ainda que para esse caso $g_C = 1$. Assim, neste caso, $0 < g < 1$ o sistema não será supercondutor e para valores acima de g_C o sistema exhibe a supercondutividade. A equação (4.36) fornece, portanto, um limite inferior que para um dado sistema conhecendo o parâmetro de *hopping* e o *cutoff* de um dado material. Usando os parâmetros do *Rutenato de Estrôncio* (parâmetro de *hopping* e *cutoff*) podemos verificar que $g_C \approx 1,4 eV$, ou seja, o parâmetro de interação crítico é menor do que do material ($g_c < g_{SC}$), deste modo o *Rutenato de Estrôncio* deve exhibir supercondutividade como já é de conhecimento [51, 53, 64, 4].

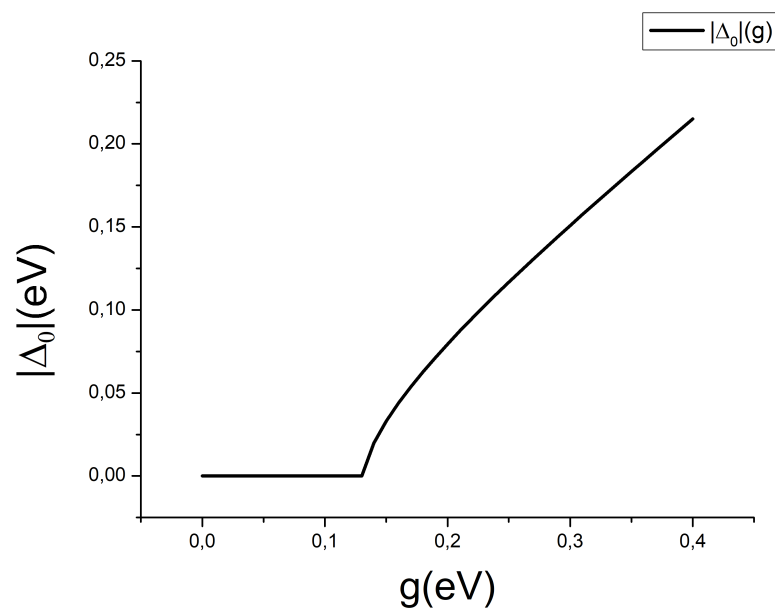


Figura 4.5: Gráfico do parâmetro supercondutor máximo em função do parâmetro de interação elétron-elétron em unidades de eV para o Sr_2RuO_4 .

Capítulo 5

Discussões, conclusões e perspectivas

Começamos discutindo sobre FM como partícula fundamental e assim, a partir da sua característica fundamental discutimos o análogo na Física da Matéria Condensada. Discutimos que estados do sistema de energia zero são Modos Zero de Majorana, cuja a representação em linguagem de segunda quantização obedece a seguinte igualdade $\gamma = \gamma^\dagger$, conhecida como condição de realidade. MZM obedecem a estatística de troca não Abelianas, que como discutiremos, são vistas com bons olhos para a realização de uma computação quântica topológica.

Estamos interessados em estudar a emergência de MZM em sistemas supercondutores topológicos, em especial supercondutores quirais. Vimos que existem sistemas supercondutores que exibem transições de fase de ordem topológica. Os MZMs emergem naturalmente na fase topológica visto que, neste caso, o sistema possui iguais graus de liberdade entre elétrons (partículas) e buracos (antipartículas). Está é uma condição necessária para a emergência de MZM. Vimos, também, que supercondutores de onda- p quirais possuem a fase trivial e a topológica.

Tomando um modelo simples sem spin, ou seja, não levando em consideração a interação entre os spins e realizando uma transformação na Hamiltoniana de uma base eletrônica para uma base de Majorana, obtemos a banda de energia para as quase-partículas. Discutimos que se tomarmos o limite de baixas energias a forma da dispersão próximos aos pontos de fechamento do gap possuem dispersão linear, ou seja, nesse regime as quasipartículas se comportam como partículas livres semelhantes ao que acontece com os elétrons no grafeno, enquanto MZM que por definição possuem energia zero, se comportam como estados ligados. Também discutiremos com relação a como caracterizar a transição de fase de ordem topológica, que pode ser feito calculando o CN.

Como resultados originais, calculamos o potencial efetivo dos MZM em sistema supercondutor quiral de onda- p . Foi aqui considerado um ensemble gran canônico e foi utilizada a técnica de integrais funcionais para temperaturas finitas. Tomando o mínimo do potencial efetivo com relação ao parâmetro supercondutor, obtemos a forma do gap em função da temperatura. Observamos que quando $T \rightarrow 0$ o gap possui valor máximo, por outro

lado ele se anula quando atinge um valor de T_C . Tanto o gap máximo quanto a temperatura crítica dependem das características do material. Esse resultado está de acordo com o que é previsto pela teoria. Em seguida calculamos o número médio de partículas e por consequência a densidade de partículas. Observamos que na fase topológica $|\mu| < 4t$ temos a coexistência de elétrons e buracos, assinalando assim que de fato temos a condição necessária para a emergência de MZM. Enquanto na fase trivial temos ou elétrons ou buracos. Calculamos a entropia por unidade de volume e o calor específico e comparamos o resultado para um supercondutor não topológico presente na literatura. Chegamos, também, a uma expressão que relaciona o parâmetro supercondutor e o parâmetro de interação, cujo os valores dependem das características do material (t e Λ), a qual fornece um limitante inferior na energia de interação entre os elétrons para que haja supercondutividade no caso de um supercondutor quiral de onda- p . Aplicamos nossos cálculos para o Sr_2RuO_4 e verificamos que estão de acordo com os resultados experimentais.

As perspectivas deste trabalho miram o estudo da interação dos MZM com fontes externas (Campo eletromagnético [12] e respostas ópticas [55]) visando a manipulação dos mesmos em sistemas 2D, como foco no desenvolvimento de processadores para computadores quânticos. Seguindo a proposta deste trabalho, podemos estudar as interações entre MZM e campos eletromagnéticos, adicionado termos de interação no potencial efetivo da equação (4.18). Além disso, queremos aprofundar este estudo para diversos sistemas supercondutores ou isolantes topológicos visando a detecção de MZM, levando em conta outros tipos de interação como o acoplamento spin-órbita.

Apêndice A

Grupos de Permutação

Grupo é uma estrutura algébrica que possui grandes aplicações na Física e, em especial, na Teoria Quântica de Campos em Matéria Condensada. Neste apêndice serão apresentados algumas definições e resultados sobre a Álgebra de Grupos que são fundamentais para a compreensão do que foi exposto ao longo desta dissertação. Começamos definindo um grupo

Definição: Um conjunto G é dito um grupo para uma dada operação $*$ se satisfazem as seguintes propriedades:

1. $\forall a, b \in G$, temos que $a * b \in G$ (Propriedade de fechamento);
2. $\forall a, b, c \in G$, temos que $(a * b) * c = a * (b * c)$ (Propriedade de associatividade);
3. $\exists e \in G$ tal que $\forall a \in G$, temos $a * e = e * a = a$ (Existência do identidade);
4. $\forall a \in G$, existe a^{-1} tal que $a * a^{-1} = a^{-1} * a = e$ (Existência do inverso);

Assim quando dissermos que um dado elemento γ_i pertence a um grupo temos a garantia de que as propriedades acima podem ser utilizadas. Dizemos que um grupo é Abeliano se dado $a, b \in G$ temos que $a * b = b * a$, ou seja, os elementos comutam. Ainda podemos escrever usando a notação para comutadores $[a, b] = 0$.

Exemplo: Pelo foco desta dissertação, discutiremos apenas o *Grupo das Permutações Cíclicas*.

Definição: Sejam N elementos numerados com os números inteiros $1, 2, 3, \dots, n$. Com eles podemos formar $n!$ permutações, cuja uma delas é:

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ P_1 & P_2 & P_3 & \cdots & P_n \end{pmatrix} \equiv (P_1, P_2, P_3, \dots, P_n) \quad (\text{A.1})$$

De forma mais simples, significa que o elemento que está na posição ou ordem indicada por P_j vai para posição $j + 1$ e, para a posição indicada por P_n vai para a posição 1. A

permutação inversa é denominada por σ^{-1} , que é a operação que significa fazer com que o primeiro elemento da permutação fundamental ocupe a ordem ou posição indicada por P_1 , o segundo elemento da permutação fundamental ocupe a ordem ou a posição indicada por P_2 , e assim sucessivamente. Como as permutações cíclicas formam um grupo deve existir a permutação identidade I que cada elemento é substituído por ele próprio. Podemos compor permutações $\sigma_1\sigma_2$, que geralmente não comutam. Sendo assim deve ser aplicado primeiro a permutação σ_2 e em seguida a σ_1 . Além disso, se a permutação é cíclica significa que existe um número finito de permutações $S_n = \{I, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_n\}$ capaz de gerar todas as configurações possíveis de permutação.

A.1 A indistinguibilidade de Partículas idênticas

Dizemos que duas ou mais partículas são idênticas se todas as propriedades inerentes a cada uma delas sejam as mesmas. Em mecânica Clássica, mesmo as partículas sendo idênticas podemos em um dado instante dizer a posição e o momento de cada partícula, sendo assim são distinguidas uma das outras. Todavia, devido ao princípio da incerteza de Heisenberg, não conseguimos dizer a posição e o momento de cada partícula com precisão absoluta (Sempre existe um erro associado a medida!), tornado, portanto, cada partícula indistinguível uma da outra. Este fato é conhecido como *Princípio da Indistinguibilidade de partículas idênticas*.

Considerando um sistema isolado com energia E e composto por N partículas idênticas governado pelas leis da Mecânica Quântica. Seja H o operador Hamiltoniano deste sistema e Ψ a autofunção total do sistema, ambas funções das posições x_i e dos momentos k_i de cada partícula, então temos:

$$H\Psi = E\Psi. \quad (\text{A.2})$$

Denotaremos aqui (x_i, k_i) por um único índice i correspondente a i -ésima partícula e denominemos $1, 2, 3, \dots, N$ de configuração da partícula. O conjunto de todas as configurações possíveis é chamado de espaço das configurações $\epsilon^{(N)}$. Assim temos simplesmente $H = H(1, 2, 3, \dots, N)$ e $\Psi = \Psi(1, 2, 3, \dots, N)$. Estes estados formam um espaço de Hilbert $L_2(\epsilon^{(N)})$ de todas as funções de quadrado integrável em $\epsilon^{(N)}$. Podemos pensar em todas as configurações possíveis como permutações das funções de onda de cada partícula. Assim podemos tratar esse problema com o auxílio do grupo de Permutações Cíclicas Simétricas, visto que as propriedades físicas do sistema devem ser invariantes por uma permutação.

Em um sistema com N partículas, e definindo σ_j o operador permutação com $j = 1, 2, 3, \dots, N!$ que gera todas as permutações possíveis das N partículas no espaço $\epsilon^{(N)}$.

As permutações σ_j constituem um grupo de simetria S_n , o grupo de Weyl, de ordem $n = N!$. Devido a identidade das partículas obtidos meramente permutando as partículas, devem ser fisicamente equivalentes, isto é, $[\sigma_j, H]$ e $|\sigma_j\Psi|^2 = |\Psi_j|^2 = |\Psi|^2$. Isto nos leva a concluir que o operador permutação é uma transformação unitária e que o espectro de energia E é $N!$ degenerado.

Apêndice B

Formalismo de Matsubara

O estudo do comportamento estatístico de um sistema quântico no equilíbrio termodinâmico pode ser feito após uma escolha apropriada de um ensemble apropriado às características desse sistema. De forma geral podemos definir o operador densidade de estado como:

$$\rho(\beta) = e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (\text{B.1})$$

onde \mathcal{H} corresponde o Hamiltoniano apropriado para o ensemble escolhido. Por exemplo, no caso do ensemble gran canônico, temos:

$$\mathcal{H} = H - \mu N, \quad (\text{B.2})$$

onde N é o operador número. Todavia as propriedades qualitativas de um sistema a temperatura finita independem da escolha do ensemble. Assim, para a presente discussão, será tomado um ensemble de natureza arbitrária.

A função partição de um sistema e valor esperado de qualquer observável A , são definidos respectivamente como:

$$Z(\beta) = \text{Tr}\rho(\beta) = \text{Tr}e^{-\beta\mathcal{H}}. \quad (\text{B.3})$$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}} A). \quad (\text{B.4})$$

Iremos agora definir operadores numa formulação de Heisenberg um tanto modificada, a partir de um ensemble dado e um conjunto de operadores de Schrödinger, da seguinte

forma: dizemos que, para um operador de Schrödinger arbitrário A , o operador de Heisenberg correspondente será dado por:

$$A_H(t) = e^{it\beta\mathcal{H}} A e^{-it\beta\mathcal{H}}. \quad (\text{B.5})$$

Aplicando seguidamente esta definição, assim como as propriedades cíclicas do traço, podemos obter a seguinte expressão, válida para média do produto de dois observáveis (conhecida como função correlação térmica) na representação de Heisenberg $A_H(t)$ e $B_H(t)$:

$$\langle A_H(t) B_H(t') \rangle = \langle B_H(t') A_H(t + i\beta) \rangle. \quad (\text{B.6})$$

A equação resultante, no caso em que exprime a lei de permutação dos valores esperados no vácuo de dois operadores, reproduz as conhecidas condições KMS, ou condições de Kubo-Martin-Schwinger, de grande utilidade no estudo de estados quânticos em equilíbrio térmico. É importante observar que essa equação é válida, independentemente das paridades grassmannianas dos operadores A e B ; isto é, vale tanto para operadores bosônicos como para fermiônicos. Em particular, podemos verificar que:

$$\langle A_H(t) A_H(t') \rangle = \langle A_H(t') A_H(t + i\beta) \rangle. \quad (\text{B.7})$$

Esta última relação acarreta a periodicidade, ou antiperiodicidade, de várias funções de Green de dois pontos a temperatura finita. As condições KMS são também extremamente úteis no estudo do comportamento assintótico de vários elementos de matriz, assim como de relações de dispersão a temperatura finita. Vale ressaltar que a propriedade cíclica do traço pode deixar de ser válida quando o traço diverge – como no caso de uma quebra espontânea de simetria, por exemplo, e nestas condições o resultado acima não se aplica. Sendo assim, como veremos, o formalismo de integrais funcionais por ter uma íntima relação com a periodicidade dos campos, este não é válido para estudar transição de fases.

De modo geral, a função partição de um sistema estatístico não pode ser calculada exatamente. O formalismo de Matsubara fornece uma maneira de cálculo perturbativo da função partição, usando um método diagramático análogo aquele empregado nas teorias quânticas de campos usuais a temperatura zero. Existe mais de uma forma de introduzir o formalismo de Matsubara, sendo que a mais comum é pelo método de integrais funcionais. Precisamos, porém, estar seguros das propriedades das funções de Green de dois pontos que serão usadas nos funcionais analíticos correspondentes aos diagramas.

Podemos definir uma função de Green de dois pontos na representação de Heisenberg como:

$$G_\beta(\tau, \tau') = \left\langle T_r[\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau')] \right\rangle_\beta = \frac{1}{Z} Tr \left((e^{-\beta \mathcal{H}} T_r[\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau')]) \right), \quad (\text{B.8})$$

onde T_r é ordenamento temporal. Em primeiro lugar, mostra-se com facilidade que, a partir da definição acima e da relação entre as representações de Heisenberg e de Schrödinger, as funções de Green de dois pontos dependem somente da diferença $\tau - \tau'$. Em segundo lugar, cada uma dessas variáveis tem valores em intervalos definidos, $\tau \geq 0$ e $\tau' \leq \beta$, e, conseqüentemente, o argumento das funções de dois pontos pertencerá ao intervalo $-\beta \leq \tau - \tau' \leq \beta$. Finalmente, considerando as propriedades cíclicas do traço e a definição de ordenamento temporal T_r , podemos mostrar que:

$$G_\beta(\tau \leq 0) = \pm G_\beta(\tau + \beta). \quad (\text{B.9})$$

Para $\tau > 0$ e usando a relação B.6, temos:

$$G_\beta(0, \tau) = \pm G_\beta(\beta, \tau). \quad (\text{B.10})$$

O sinal positivo corresponde as funções de Green bosônicas (periodicidade) e o negativo as funções de Green fermiônicas (anti periodicidade). Como as funções estão definidas em um intervalo de tempo finito, a transformada de Fourier correspondente só admitirá frequências discretas. Assim:

$$G_\beta(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} G_\beta(\omega_n) \quad (\text{B.11})$$

$$G_\beta(\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} G_\beta(\tau) \quad (\text{B.12})$$

onde $\omega_n = n\pi/\beta$, com $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Porém, para que obedecem as condições de periodicidade e anti periodicidade na relação B.10, apenas números inteiros pares contribuem para as funções de Green bosônicas e que apenas números inteiros ímpares contribuem para as funções fermiônicas. Daí $\omega_n = 2n\pi/\beta$, para bósons e $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$, para férmions.

Estas são as chamadas frequências de Matsubara. As coordenadas espaciais, por sua vez, têm as mesmas características de continuidade do que na teoria a temperatura zero, e, portanto, nada há de especial com a transformada de Fourier. Usando os mesmos valores acima para as frequências, podemos escrever, no caso quadridimensional:

$$G_\beta(x, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i(\omega_n \tau - k \cdot x)} G_\beta(k, \omega_n) \quad (\text{B.13})$$

$$G_\beta(k, \omega_n) = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int_{-\beta}^\beta d^3x e^{i(\omega_n \tau - k \cdot x)} G_\beta(x, \tau). \quad (\text{B.14})$$

Referências Bibliográficas

- [1] B. I. Abelev, *Physical Review C*, **81**(5), 2010.
- [2] A. D. Sakharov, *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*,**5**(392), 1967.
- [3] L. H. Qing, *Science*, **357**(6348), 2017.
- [4] K. Catherine and B. John, *Reports on Progress in Physics*, **79**, 2016.
- [5] K. Vladyslav, PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2019.
- [6] A. M. S. Daniel, Tese, Unesp, 2019.
- [7] A. P. Schnyder, *Physical Review B*, **78**, 2008.
- [8] S. Nadj-Perge, *Physical Review B*, **88**, 2013.
- [9] S. B. Chung, *Physical Review B*, **83**, 2011.
- [10] M. Sato, *Physical Review B*, **83**, 2011.
- [11] A.W.Teixeira, V.L.Carvalho-Santos, and J.M.Fonseca, *Physics Letters A*, **384**, 2020.
- [12] R. G. Pereira and R. Egger, *Physical Review Letters*, **125**, 2020.
- [13] D. Aasen, *Physical Review X*, **10**, 2020.
- [14] B. Maissam, B. Erez, and K. Steven, *Science*, **346**(6210), 2014.
- [15] M. Sato and Y. Ando, *Reports on Progress in Physics*, **80**(7), 2017.
- [16] I. K. Joseph and G. Charles, *Finite-Temperature Field Theory: Principles and Applications*. Cambridge University Press, 1 edition, 2006.
- [17] M. F. Jakson, Tese, Universidade Federal de Viçosa, 2012.
- [18] R. E. Steven and F. Marcel, *Reviews of Modern Physics*, **87**, 2015.
- [19] N. Chetan, *Reviews of Modern Physics*, **80**, 2008.

- [20] M. Ettore, *Il Nuovo Cimento*, **14**(171), 1937.
- [21] J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*. 1 edition, 1967.
- [22] T. Bernd, *The Dirac Equation*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1992.
- [23] H. C. N. Antonio, *Introduction to Condensed Matter Physics*, volume **1**. Department of Physics, Boston University, 1 edition, 2005.
- [24] K. Charles, *Introdução à Física do Estado Sólido*. LTC, 8 edition, 2016.
- [25] B. J., C. L. N., and S. J. R., *Physical Review*, **108**(5), 1957.
- [26] L. Fu and C. L. Kane, *Physical Review Letters*, **100**, 2008.
- [27] W. Meissner and R. Ochsenfeld, *Naturwissenschaften*, 1933.
- [28] H. London and F. London, *Proceedings of the Royal Society A*, **149**(71), 1935.
- [29] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, *Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki*, **20**, 1950.
- [30] J. Pimenta, L. Belussi, E. Natti, and P. L. Natti, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, **35**(2), 2013.
- [31] K. Vladyslav, *Science Advances*, **2**(2), 2016.
- [32] H. Philip, *Solid State Physics*. Wiley-VCH, 2 edition, 2015.
- [33] B. H. Bernhard and J. R. Iglesias, *Physical Review B*, **50**(9522), 1994.
- [34] P. Philip, *Advanced Solid State Physics*. Cambridge University Press, 2 edition, 2012.
- [35] N. Read and D. Green, *Physical Review B*, **61**(10267), 2000.
- [36] B. Andrei, *Topological Insulators and Topological Superconductors*, volume **1**. Princeton University Press, 1 edition, 2013.
- [37] A. Leggett, *Quantum Liquids: Bose condensation and Cooper pairing in condensed-matter systems*. Oxford University Press, 1 edition, 2006.
- [38] J. R. Kirtley, *Nature*, **373**, 1995.
- [39] G. E. Volovik, *JETP Letters*, **103**(2), 2016.
- [40] R. Shankar, *Quantum Field Theory and Condensed Matter*. Cambridge University Press, 2017.
- [41] A. Jason, *Reviews of Modern Physics*, **75**(076501), 2012.

- [42] C. F. Lukong, *Quantum Field Theory: Feynman Path Integrals and Diagrammatic Techniques in Condensed Matter*. CRC Press, 1 edition, 2020.
- [43] M. S. Leonard, *Advanced Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 1 edition, 2009.
- [44] L. B. Michel, M. Fabrice, and B. George, *Equilibrium and Non-equilibrium Statistical Thermodynamics*. Cambridge University Press, 1 edition, 2004.
- [45] S. Silvio, *Introdução à Física Estatística*. LTC, 2 edition, 2016.
- [46] J. Cornwell, *Group Theory in Physics*. Academic Press Limited, 1 edition, 1997.
- [47] M. B. José and S. C. Mauro, *Teoria de Grupos*. Livraria da Física, 1 edition, 2008.
- [48] R. T, M and S. M., *Journal of Physics: Condensed Matter*, **7**(47), 1995.
- [49] G. Baskaran, *Physica B: Condensed Matter*, **223**, 1996.
- [50] A. P. Mackenzie and Y. Maeno, *Review Modern Physical*, **75**, 2003.
- [51] Y. Maeno, *Physical Review Letters*, **80**, 1998.
- [52] K. Deguchi, Z. Q. Mao, and Y. Maeno, *Journal of the Physical Society of Japan*, **73**(5), 2004.
- [53] Y. Maeno, H. Hashimoto, and K. e. a. Yoshida, *Nature*, **372**, 1994.
- [54] C. N. Veenstra and Zhu, *Physical Review Letters*, **112**, 2014.
- [55] H. James, Jun, T. Yukio, and N. Naoto, *Physical Review Letters*, **126**(237002), 2021.
- [56] J. J. Neumeier and Hundley, *Physical Review B*, **50**, 1994.
- [57] K. Takashi and A. Ryotaro, *Computer Physics Communications*, **220**, 2017.
- [58] N. Shuji and M. Yoshiteru, *Journal of the Physical Society of Japan*, **67**(2), 1998.
- [59] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Physical Review B*, **13**, 1976.
- [60] H Suderow and V Crespo, *New Journal of Physics*, **11**(9), 2009.
- [61] W. Hai-Hu, *Chinese Physics B*, **29**(1), 2020.
- [62] A. Bhattacharyya, D. Adroja, M. Smidman, and V. Anand, *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, **61**, 2018.
- [63] X.-P. Hao, *Physica B: Condensed Matter*, **441**, 2014.
- [64] G. Luke, *Physica B: Condensed Matter*, **289**, 2000.