

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIAS NATURAIS

Edgar Paulino Mamani Lopez

ESTADOS FUNDAMENTAIS DE UMA CADEIA
UNIDIMENSIONAL DIMERIZADA SUPERCONDUTORA

São João del-Rei - MG
18/Dezembro/2019

Edgar Paulino Mamani Lopez

ESTADOS FUNDAMENTAIS DE UMA CADEIA
UNIDIMENSIONAL DIMERIZADA SUPERCONDUTORA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei, em associação ampla com as Universidades Federais de Alfenas e Lavras, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Orientador: Herón Carlos de Godoy Caldas

Co-orientador: Griffith Rufo

São João del-Rei – MG
Departamento de Ciências Naturais - UFSJ
18/Dezembro/2019

Ficha catalográfica elaborada pela Divisão de Biblioteca (DIBIB)
e Núcleo de Tecnologia da Informação (NTINF) da UFSJ,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

M263e Mamani Lopez, Edgar Paulino.
Estados Fundamentais de Uma Cadeia Unidimensional
Dimerizada Supercondutora / Edgar Paulino Mamani
Lopez ; orientador Heron Carlos de Godoy Caldas;
coorientador Griffith Rufo. -- São João del-Rei,
2019.
83 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em
Física) -- Universidade Federal de São João del-Rei,
2019.

1. Supercondutor. 2. Estados com Energia Zero. 3.
Simetrias Discretas: quiral, reversão temporal,
partícula buraco. 4. Diagrama de Fases . 5. Estados
Ligados Não Locais de Majorana. I. de Godoy Caldas,
Heron Carlos, orient. II. Rufo, Griffith , co
orient. III. Título.



Universidade Federal
de São João del-Rei



ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

CANDIDATO (A): EDGAR PAULINO MAMANI LOPEZ

NÍVEL: () Especialização (X) Mestrado () Doutorado

DATA DA DEFESA: 11 DE DEZEMBRO DE 2019

HORÁRIO DE INÍCIO: 10h LOCAL: SALA C-3.14, DCNAT

MEMBROS DA BANCA

| NOME COMPLETO | CPF | FUNÇÃO | TÍTULO | INSTITUIÇÃO DE ORIGEM |
|------------------------------|----------------|------------|--------|-----------------------|
| HERON CARLOS DE GODOY CALDAS | 643.648.876-68 | PRESIDENTE | DR. | UFSJ |
| GEORGE BALSTER MARTINS | 119.239.658-83 | M. EXTERNO | DR. | UFU |
| EDSON WANDER DIAS | 012.594.106-41 | M. INTERNO | DR. | UFSJ |

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Estudos Fundamentais de uma Cadeia Unidimensional Dimerizada Supercondutora.

Em sessão pública após exposição de 54 min. O candidato foi arguido oralmente pelos membros da banca durante o período de 80 min., tendo a banca chegado ao seguinte resultado:

Aprovação por unanimidade.

Aprovação somente após satisfazer as exigências que constam na folha de modificações, no prazo fixado pela banca (não superior a quarenta e cinco dias).

Reprovação.

Na forma regulamentar, foi lavrada a presente ata, que é abaixo assinada pelos membros da banca, na ordem acima relacionada e pelo candidato.

Local e data: São João del Rei, 11 de dezembro de 2019

Presidente: Heron C. P. Caldas Membro 1: George Balster Martins

Membro 2: Edson Wander Dias Candidato: Edgar Paulino Mamani Lopez

Obs.: O aluno deverá encaminhar à coordenação do curso, no prazo máximo de 45 dias os exemplares definitivos da dissertação ou tese.

Programa de Pós-Graduação em Física - UFSJ

Praça Dom Helvécio, 74, Fábricas, SJDR/MG – CEP: 36301-160. Tel.: (32) 3379-5143 email:
ppgf@ufs.edu.br url: <http://www.ufsj.edu.br/ppgf/>, 2º Andar - Sala 2.17 Bloco A, DNCAT

Agradecimentos

Este trabalho, a dissertação de mestrado nunca poderia ter sido alcançada sem alguma das pessoas mencionadas abaixo. Para todas essas pessoas, para cada uma delas tenho um carinho especial e, graças a todos eles, consegui realizar um dos meus grandes sonhos.

Quero agradecer aos meus pais Donato e Victoria que sempre me apoiaram e confiaram em mim, aos meus irmãos Cristina, Mayra e Edwin com quem eu sempre podia contar. Eu nunca teria conseguido nada sem vocês. Graças querida família, nos bons e maus momentos, vocês sempre me apoiaram.

Também quero agradecer aos meus amigos, que sempre ouviram meus problemas e sempre estavam comigo, e que a seguir vou nomeá-los: Vanessa, Amauri, Leonor, Carolina, Rosangela, Lisangela, Leonora, Sidney, Fagundes. Vocês são o máximo como pessoas. Eu também tenho que agradecer as moças que trabalham no restaurante universitario da UFSJ, graças a vocês por me alimentar no almoço e a janta; e não vou esquecer de agradecer às moças faxineiras da UFSJ que sempre mantinham limpa minha sala.

Não posso deixar de agradecer às políticas sociais do ex-presidente Evo Morales, agora isolado no México por causa do golpe de Estado na Bolívia. Obrigado a você, por teu exemplo, para progredir tendo sangue e ascendência indígena.

Tambem quero agradecer o meu orientador Prof. Heron Caldas porque confiou em mim e na minha capacidade, à Prof. Maria Aline por ter me aconselhado em muitas coisas. E tenho que agradecer muito mais que tudo ao meu co-orientador Griffit Mendonça, a ele tenho que agradecer por tudo o que ele me ensinou e me motivo por todo esse período em que desenvolvi este trabalho, Obrigado por toda a paciência que você teve comigo.

Resumo

Estados Fundamentais de Uma Cadeia Unidimensional Dimerizada Supercondutora

Neste trabalho, primeiramente estudamos dois modelos físicos unidimensionais, um para um material isolante como o poliacetileno chamado modelo SSH e o outro para um supercondutor p-wave chamado modelo de Kitaev. Também estudamos os estados fundamentais de um modelo alternativo dos dois anteriores, ou seja, um modelo físico que contém uma parte isolante e uma parte supercondutora. O modelo supercondutor híbrido que estudamos para condições-limite como μ igual a zero e Δ igual a zero, torna-se o modelo SSH conforme o esperado. Os espectros de energia obtidos para este modelo não convencional mostram a semelhança com os dois modelos convencionais mencionados, ou seja, apresentam a existência de um gap de energia, que fecha ou abre à medida que nos aproximamos dos pontos de transição de fase. Além disso, descobrimos que as fases topológicas em certos limites do modelo híbrido parecem as mesmas, então usamos outros argumentos para discernir as fases.

Uma maneira de diferenciar as fases dos modelos SSH e Kitaev é através do winding number, que também usamos para o modelo híbrido. Através do winding number, podemos diferenciar as fases e/ou regiões topológicas que encontramos para diferentes valores dos parâmetros de hopping e outros (e.g. correlações supercondutoras, potencial químico e hopping). Além disso, encontramos fases topológicas não triviais em certos limites do modelo híbrido. Caracterizamos as transições de fase topológicas através do fechamento do gap e um invariante topológico chamado de winding number. Através do winding number, podemos diferenciar as fases topológicas ou regiões topológicas que encontramos para diferentes valores dos parâmetros e das correlações de hopping e supercondutor.

Além disso, encontramos as simetrias dos dois modelos convencionais e do modelo alternativo, que por sua forma estabelecida, os três modelos têm três simetrias discretas: quiral, reversão temporal e de partícula-buraco. Com essas simetrias, encontramos a classe topológica à qual elas pertencem.

Abstract

In this work, firstly, we study two one dimensional physics models, one for an insulating material such as polyacetylene called SSH model and the other of a p-wave superconductor called Kitaev. We also study the fundamental states of an alternative model from the previous two, that is, a physical model that contains an insulating part and a superconducting part. The hybrid superconducting model that we study for limit conditions such as μ is equal to zero and Δ is equal to zero, becomes the SSH model as expected. The energy spectra obtained for this unconventional model show the similarity it has with the two conventional models mentioned, that is, it presents the existence of an energy gap, which closes or opens as we vary "k" and others parameters (e.g. superconducting correlations, chemical potential and hopping). Also, we find non-trivial topological phases in certain limits of the hybrid model. We characterized the topological phase transitions through the gap closing and a topological invariant called winding number. Through the winding number, we can differentiate the topological phases or topological regions that we find for different values of hopping and superconducting correlations parameters.

One way to be able to differentiate the phases for both the SSH and Kitaev models, is through the winding number, which we also use for the hybrid model. Through the winding number we can differentiate the phases or topological regions that we find for different values of the hopping parameters. We also find the symmetries of the two conventional models and the alternative model, which by their established form the three models have three discrete symmetries, Chiral, Reversal Time and Particle-hole. With these symmetries we find the topological class to which they belong.

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | Desenho esquemático que mostra a aproximação do modelo Tight Binding. a) Modelo de átomos clássicos juntos, que formam um sólido, onde a função de onda associada aos orbitais atômicos adjacentes formam um overlap. b) Se consideramos o overlap pequeno, os elétrons ainda estão nos orbitais originais. No entanto, eles têm uma probabilidade de tunelar para as órbitas adjuntas, criando desta forma uma banda de energia. | 22 |
| 2.1 | Representação esquemática da Molécula do Poliacetileno. Aqui os átomos de carbono são representados pela letra C, enquanto os átomos do Hidrogênio são representados pela letra H. Podemos ver a ligação simples (representado por um traço) do Carbono e Carbono, a ligação dupla entre carbonos (representado por dois traços na figura) e a ligação simples entre Carbono e Hidrogênio | 24 |
| 2.2 | Modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) para descrever as propriedades eletrônicas da molécula do Poliacetileno. Aqui, A e B são as duas sub-redes da cadeia, e em cada subrede temos um átomo de carbono. t_1 são os hoppings entre as subredes dentro da célula unitária, e t_2 é o termo de hopping entre células unitárias . . . | 24 |
| 2.3 | Espectro de energia para o modelo SSH com $t_1 = 1$. (a) Energia como função de k para $t_2/t_1 = 0.5$, b) $t_2/t_1 = 1$ e c) $t_2/t_1 = 1.5$. Aqui E_F é o nível de Fermi e μ o potencial químico. Consideramos a energia de Fermi e o potencial químico iguais a zero, onde a linha verde na figura representa o nível zero de energia. Podemos ver o gap Δ nas fases isolantes, ver as partes a) e c) da figura. Na parte b) temos uma transição de fase quântica caracterizada pela ausência de gap(Δ) no espectro de energia. | 27 |
| 2.4 | Transição de fase clássica ordem-desordem induzida pela temperatura. Fase ferromagnética (à esquerda) e fase paramagnética (direita). Na fase ferromagnética, temos magnetização (m) diferente de zero, enquanto na fase paramagnética a magnetização é igual zero. | 28 |
| 2.5 | Tabela de isolantes topológicos, onde Θ, Ξ, Π são os operadores de simetria discreta de reversão temporal, Partícula-buraco e Quiral, respectivamente. Na primeira coluna temos as classes topológicas (dez), e na segunda, terceira e quarta colunas temos os valores de Θ^2, Ξ^2, Π^2 . Da quinta à décima segunda coluna temos a dimensão espacial do modelo. Na tabela o símbolo \mathbb{Z} representa um invariante topológico que pode assumir valores inteiros (i.e winding number na classe BDI). O símbolo \mathbb{Z}_2 é um invariante topológico que assume dois valores, 0 ou 1. Marcamos em vermelho a classe BDI, a qual o modelo SSH pertence. | 32 |

| | | |
|-----|---|----|
| 2.6 | Diagrama de fases do modelo SSH, onde o eixo x é o hopping t_1 e o eixo y é o hopping t_2 . A fase topologicamente trivial ($\omega = 0$) ocorre quando $t_2 < t_1$, ver a região azul do diagrama de fases. A fase topológica não trivial ($\omega = 1$) ocorre na região $t_2 > t_1$ do diagrama de fases, ver região verde. A linha branca do diagrama representa os ponto de transição de fase onde o gap Δ se anula. | 33 |
| 2.7 | Espectro de energia como como função do hopping t_2 (com $t_1 = 1$) para uma cadeia finita com 50 células unitárias . As linha azuis são os estados de bulk, e as linhas tracejadas vermelhas e verdes são os estados de borda com energia zero. Os estados de energia zero surgem na fase isolante topológica para $t_2 > 1$ | 34 |
| 2.8 | Densidade de probabilidade($ \psi ^2$) dos estados de energia zero como função da posição dos sítios da cadeia. O estado vermelho esta localizado em torno do primeiro sítio da cadeia, enquanto o estado verde esta localizado no ultimo sítio. | 35 |
| 3.1 | Cadeia supercondutora de Kitaev, onde os sítios foram numerados de 1 ate N . t é o termo de hopping entre os sítios de primeiros vizinhos, e Δ é o parametro supercondutor antisimetrico ($\Delta_{ij} = -\Delta_{ji}$) | 39 |
| 3.2 | Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k . Pode-se ver o gap δ no espectro de energia. A presença do gap δ e do parâmetro supercondutor $\Delta \neq 0$ nos indica um estado fundamental supercondutor($\frac{\mu}{2t} = 1$ e $\Delta = 1$) | 42 |
| 3.3 | Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k para $\Delta = 1$. a) Fase Topológica não trivial, onde fixamos os valores de $\frac{\mu}{2t} = 1/2$. b) Transição de fase topológica, onde fixamos os valores de $\frac{\mu}{2t} = 1$. c) Fase topológica não trivial, onde fixamos os valores de $\frac{\mu}{t} = 3/2$ | 42 |
| 3.4 | Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k para $\Delta = 0$ e $\frac{\mu}{2t} = 1/2$ | 43 |
| 3.5 | Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k para $\Delta = 0$ e $\frac{\mu}{2t} = 0.9$ | 43 |
| 3.6 | Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k para $\Delta = 1$. a) $\frac{\mu}{2t} = 1/2$. b) $\frac{\mu}{2t} = 3/2$. Aqui δ e δ' sao gap no espectro de energia das fases supercondutoras. | 44 |
| 3.7 | Diagrama de fases do modelo de Kitaev, onde o eixo x é o potencial químico μ e o eixo y é o hopping t . A fase topologicamente não trivial ($\omega = 1$ e $\omega = -1$) ocorre quando $ \mu < 2t $, ver as regiões azul e vermelha do diagrama de fases. A fase topológica trivial ($\omega = 0$) ocorre na região $ \mu > 2t $ do diagrama de fases, ver região branca. A linha preta do diagrama representa os pontos de transição de fase onde o gap δ se anula. | 47 |

- 3.8 a) Espectro de energia como função da razão $\mu/2t$ (com $\Delta = 1$) para uma cadeia finita com 100 sítios. As linhas azuis são os estados de bulk, e as linhas tracejadas vermelhas e verdes são os estados com energia zero (localizados nas bordas da cadeia, ver figura b)). Os estados de energia zero surgem na fase supercondutora topológica não trivial para $|\mu/t| < 1$. b) Densidade de probabilidade dos estados de energia zero (representadas pelas linhas verde e vermelha na parte a)) como função dos sítios da cadeia de Kitaev. c) Densidade de probabilidade dos estado do bulk (representados por linhas azuis da parte a)) como função dos sítios da cadeia de Kitaev. 49
- 3.9 Estados fundamentais da cadeia de Kitaev e o surgimento do estado ligado de Majorana com energia zero. a) Para $|\mu| < |t|$, notamos que sobram dois majoranas $\gamma_{1,1}$ e $\gamma_{2,N}$ desacoplados do bulk da cadeia. Esses Majoranas possuem energia zero e estão localizados na borda da cadeia. Os operadores de Majorana $\gamma_{1,1}$ e $\gamma_{2,N}$ se combinam para formar um modo fermiônico não-local $d = (\gamma_{1,1} + i\gamma_{2,N})/2$. b) Para $|\mu| > |t|$ todos os Majoranas estão acoplados ao bulk da cadeia. 51
- 4.1 (Cor em linha) O modelo híbrido com primeiros vizinhos t_1 e t_2 são hopping, e Δ_1 e Δ_2 são parâmetros supercondutores. Cada célula unitária i contém uma, as esferas vermelha e azul, respectivamente. Os termos de hopping e os parâmetros supercondutores funcionam para diferentes sub-redes, t_1 e Δ_1 dentro da célula unitária, enquanto t_2 e Δ_2 fora da célula unitária. 54
- 4.2 Espectro de energia como função do momento k para o modelo híbrido com $\mu/t_1 = 0.9$, $t_2/t_1 = 0.2$, $\Delta_1/t_1 = 0$. a) $\Delta_2/t_1 = -2$. b) $\Delta_2/t_1 = -1.5$. c) $\Delta_2/t_1 = -0.83$ 56
- 4.3 Espectro de energia como função do momento k para o modelo híbrido com $\mu/t_1 = 0.9$, $t_2/t_1 = 0.2$, $\Delta_1/t_1 = 0$. a) $\Delta_2/t_1 = -0.5$. b) $\Delta_2/t_1 = 0$. c) $\Delta_2/t_1 = 0.5$. 56
- 4.4 Espectro de energia como função do momento k para o modelo híbrido com $\mu/t_1 = 0.9$, $t_2/t_1 = 0.2$, $\Delta_1/t_1 = 0$. a) $\Delta_2/t_1 = 0.83$. b) $\Delta_2/t_1 = 1.5$. c) $\Delta_2/t_1 = 2$ 57
- 4.5 (Color online) Diagramas de fases topológicas em relação a W_1 com $\mu = 0$. Os números nas figuras (a), (b), (c) e (d) denota os valores possíveis W_1 . (a) Diagrama de fase topológico do modelo SSH puro com $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$. A região topológica trivial é indicada pela cor azul ($W_1 = 0$), enquanto a região vermelha é a fase topológica não-trivial com $W_1 = 1$. Nas figuras (b), (c) e (d), consideramos os efeitos das correlações Δ_i para valores fixos da relação t_2/t_1 . (b) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 0.2$, (c) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1$ e (d) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$. Uma nova fase topológica com $W_1 = 2$ (regiões brancas) surge no sistema híbrido supercondutor. 64

4.6 (Color online) Espectro de energia no espaço real e diagramas de fases topológicas em relação a W_2 com $\mu = 0$. As regiões verde, vermelha e azul correspondem a $W_2 = -1$, $W_2 = 1$ e $W_2 = 0$, respectivamente. Os números nas figuras (b), (c) e (d) denotam os valores de W_2 . (a) Espectro de energia em função de $\frac{t_2}{t_1}$ para o ponto particular $\frac{\Delta_1}{t_1} = 0$ e $\frac{\Delta_2}{t_1} = 2$ dos diagramas de fases (b), (c) e (d). Aqui, as linhas sólidas pretas são a energia dos estados de bulk, enquanto as linhas azul e verde são a energia dos estados de borda. O círculo (amarelo), quadrado (laranja) e triângulo (laranja) no espectro de energia (a) indica o valor da razão t_2/t_1 . (b) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 0.2$, onde o círculo indica o ponto (0,2). (c) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1$, onde o quadrado indica o ponto (0,2). (d) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$, onde o triângulo indica o ponto (0,2). 65

4.7 (Color online) Diagramas de fases topológicas em relação a W_1 no plano $\frac{\Delta}{t} - \eta_1$ com $\mu = 0$. Parametrização $t_1 = -t(1 + \eta_1)$, $t_2 = -t(1 - \eta_1)$, $\Delta_1 = \Delta(1 + \eta_1)$ e $\Delta_2 = \Delta(1 - \eta_2)$, (11). Os números nas figuras indicam W_1 . As regiões vermelhas exibem fase com $W_1 = 1$, regiões azuis exibem uma fase com $W_1 = 0$ e as regiões brancas $W_1 = 2$. (a) Caso $\eta_2 = \eta_1$. (b) Caso $\eta_2 = 1.5\eta_1$. Todos os pontos que pertencem à linha tracejada em $\frac{\Delta}{t} = 0$ e $\eta_1 < 0$ estão em uma fase topologicamente não-trivial do modelo SSH puro, já que nesses pontos, o winding number é $W^{SSH} = 1$. A linha topologica traçada para $\eta_1 < 0$ separa duas regiões topológicas com o mesmo invariante topológico $W_1 = 2$ (região branca). 66

4.8 (Color online) Espectro de energia da cadeia finita em função de $\frac{t_2}{t_1}$ e diagramas de fase topológica em relação a W_2 com $\mu = 0.9$. Os números nas figuras (b), (c) and (d) denotam W_2 . (a) Espectro de energia em função $\frac{t_2}{t_1}$ com $\frac{\Delta_1}{t_1} = 0.0$, $\frac{\Delta_2}{t_1} = 2.0$ e $\mu = 0.9$. Aqui, as linhas sólidas pretas são os estados de energia do bulk, enquanto as linhas verdes são as energias dos estados da borda da cadeia. Nesse caso, podemos ver estados ligados a Majorana com energia zero apenas para $1.2 < t_2 < 2.0$ (linhas verdes sólidas em $E = 0$). O círculo, quadrado e triângulo no espectro de energia (a) indica o ponto $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = 2$ nos diagramas de fases (b), (c) e (d). (b) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 0.2$, (c) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1.0$ e (d) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$. O ponto (0,2) dos diagramas de fase em (b), (c) e (d) são indicados por círculo (amarelo), quadrado (amarelo) e triângulo (laranja). Aqui, a cor verde corresponde a $W_2 = -1$, red $W_2 = 1$ e azul $W_2 = 0$ 67

| | | |
|-----|---|----|
| 4.9 | (Color online) Espectro de energia da cadeia finita e diagrama de fase topológica em relação a W_2 no plano $\frac{\mu}{t_1} - r$. Aqui $r = \frac{\Delta_2}{\Delta_1}$. Os números nas figuras (b), (c) e (d) denotam os valores de W_2 . (a) Espectro de energia em função de $\frac{\mu}{t_1}$ com $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$ e $r = -1$. (b) Diagrama de fase topológico para $\frac{t_2}{t_1} = 0.2$ (c) Diagrama de fase topológico para $\frac{t_2}{t_1} = 1.0$ e (d) Diagrama de fase topológico para $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$ | 68 |
| A.1 | Razoamento para o calculo do winding number. a) Se $\frac{ t_1 }{ t_2 } > 1$. b) Se $\frac{ t_2 }{ t_1 } > 1$ | 77 |
| A.2 | Representação esquemática do winding number | 78 |
| A.3 | Winding Number para valores diferentes de t_1 e t_2 . a) quando $ t_2 > t_1 $ o winding number é 1 e no espectro de energia apresenta um gap. b) quando $ t_2 = t_1 $ é uma transição de fase. c) quando $ t_2 < t_1 $ o winding number é zero e apresenta um gap no espectro de energia | 79 |

1

Introdução

1.1 Transições de Fase Topológicas

Nos últimos anos, o estudo de modelos físicos realísticos que exibem transições de fases topológicas cresceu de maneira assustadora em toda a comunidade científica do mundo. Em particular, em matéria condensada existe um número grande de trabalhos teóricos e experimentais (17)-(44) dedicados ao estudo das fases topológicas da matéria. Esse grande interesse nas transições de fase topológicas é justificado pelo fato de que esse tipo de transição de fase não segue o paradigma de Landau, o qual se aplica aos casos onde é possível definir um parâmetro de ordem que vai a zero na transição de fase. Não existe um parâmetro de ordem bem definido associado a uma transição de fase topológica, pois as fases antes e depois da transição topológica possuem as mesmas simetrias discretas. Portanto, uma transição de fase topológica não pode ser explicada segundo a teoria de Landau de quebra de simetria (17; 36). Notemos que, nas transições de fase convencionais, ou seja, aquelas descritas pela teoria de transições de fase de Landau, a quebra de simetria está intimamente associada a um parâmetro de ordem finito, como no caso das fases magnéticas ordenadas, cujo parâmetro de ordem é a magnetização.

O fato de não existir um parâmetro de ordem bem definido para uma transição de fase topológica não inviabiliza o seu estudo segundo a teoria de fenômenos críticos, pois ainda é possível associar um comprimento de correlação espacial e temporal que diverge na transição e obedece às leis de escala e expoentes críticos (Ref. (19)).

Uma transição de fase topológica é caracterizada por um invariante topológico ou número topológico que diferencia uma fase topológica trivial de uma não-trivial. O número topológico que deve ser calculado depende das simetrias discretas (reversão temporal, partícula-buraco e quiral) e da dimensão do modelo considerado (37). De fato, o termo "topológico" surge porque o invariante topológico pode identificar diferentes topologias entre os estados eletrônicos de Bloch das fases "topologicamente trivial" e "topologicamente não-trivial". Nessa dissertação de Mestrado, dedicaremos-nos exclusivamente ao estudo das fases topológicas com gap no espectro de energia.

Enquanto a fase topológica trivial não possui propriedades físicas relevantes, a fase com topologia não-trivial é capaz de exibir estados de superfície sem gap e com energia zero cuja

existência é protegida e garantida pela topologia não-trivial dos estados eletrônicos do bulk, ou "*bulk states*", que significa estados do volume (em oposição aos estados de superfície ou de borda). Por simplicidade, usaremos o termo *bulk* ao longo da dissertação. Em outras palavras, a fase não-trivial garante estados metálicos de borda ou superficiais insensíveis à desordem ou operações no material que preservem as simetrias discretas do bulk.

Um isolante topológico é um material que possui o interior isolante ao mesmo tempo que conduz eletricidade somente pela sua superfície (17; 37; 38). A natureza do estado de superfície depende do modelo considerado, i. e., os estados metálicos de superfície do isolante topológico são insensíveis com relação aos processos de espalhamento do tipo retro espalhamento, enquanto que um supercondutor topológico exibe modos de excitação com energia nula do tipo Majorana (39)-(2).

É importante salientar que as propriedades não-locais superficiais das fases topológicas não-triviais são importantes para diversos ramos da física, como transporte e informação quântica (39).

Até agora discutimos as características gerais das fases topológicas. Nessa dissertação de mestrado, estudaremos dois modelos unidimensionais que apresentam transições de fase topológicas discutidas acima.

No capítulo 1, estudaremos o modelo desenvolvido pelos cientistas Su, Schrieffer e Heeger (SSH (38)). Esse modelo foi proposto para estudar a cadeia dimerizada unidimensional da molécula do poliacetileno (Fig. 2.1). Trata-se de um isolante de banda unidimensional, que pode sofrer uma transição de fase topológica e se tornar um isolante topológico, o qual exibe estados metálicos de borda protegidos pela simetria quiral do bulk.

No capítulo 2, estudaremos a cadeia de Kitaev que descreve um supercondutor topológico do tipo *p-wave* sem spin (Usaremos novamente, por simplicidade o termo em inglês *spinless* que é capaz de exibir modos de excitação de estados ligados não-locais de Majorana nas extremidades da cadeia (39; 40). Os modos dos estados ligados não-locais de Majorana possuem energia zero e estão no meio do gap supercondutor. Esses modos de excitação são chamados também de estados ligados não-locais de Majorana, e descrevem modos fermiônicos cuja quasi antipartícula é igual à sua quasi partícula, semelhante ao que acontece com o férmion de Majorana proposto pelo físico Ettore Majorana.

Fisicamente, podemos obter um modelo efetivo do tipo Kitaev que exibe estados ligados não-locais de Majoranas nas extremidades utilizando uma heteroestrutura composta por um fio semicondutor (InAs) com forte interação spin-órbita e um supercondutor padrão do tipo BCS (2)-(43). Para obter o cenário físico descrito pelo modelo de Kitaev, devemos colocar o fio em contato com a superfície do supercondutor e em seguida aplicar um campo magnético externo a fim de gerar um fio *spinless*. O efeito de proximidade com o supercondutor induz uma supercondutividade do tipo *spinless* no fio.

Finalizaremos a dissertação investigando um modelo híbrido entre o modelo SSH e a cadeia de Kitaev, recentemente introduzido na literatura (44). Esse novo modelo considera um

termo de interação eletrônica diretamente na cadeia dimerizada do modelo SSH. Dessa forma, podemos gerar um acoplamento supercondutor do tipo p-wave. Exploraremos as diversas fases que podem surgir da junção desses dois modelos (SSH e Kitaev) e as propriedades físicas que podem ser diretamente relacionadas com materiais reais.

1.2 Aproximação Tight Binding

O modelo *Tight Binding* descreve a estrutura de bandas de elétrons em sólidos. Um desenho esquemático é mostrado na Fig. 1.1.a), que mostra a formação de uma rede ou conjunto de átomos deste modelo. Na mecânica quântica, consideramos um elétron orbitando ao redor do núcleo com uma interação coulombiana e , com base nisso, encontramos a energia discreta para os orbitais atômicos, como $E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 n^2 a_0}$, onde a_0 é o radio de Bohr ($a_0 = 0.529\text{Å}$) e n é um número inteiro. A diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado é $E_2 - E_1 = -10.2eV$. Como essa energia é bastante grande em relação ao sólido, é bom considerar o estado fundamental do elétron em baixas temperaturas. Consequentemente, os átomos estão muito próximos entre os primeiros vizinhos, as órbitas dos elétrons de diferentes átomos podem se sobrepor; e, portanto, um elétron tem a probabilidade de saltar para a órbita de outro átomo. No entanto, como o elétron está ao redor do núcleo, a probabilidade de tunelamento é bem pequena. Sendo essa superposição (chamada também de "overlap ") de orbitais muito pequena, eles formam bandas de energia, como mostrado na Fig. 1.1b). Portanto, sendo o *overlap* muito pequeno, podemos dizer que os elétrons estão fortemente ligados ao núcleo, por isso é chamado de uma ligação forte ou *Tight Binding*. O hamiltoniano do modelo *Tight Binding* na segunda quantização pode ser escrita como:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.); \quad (1.1)$$

onde i, j são índices para a soma de todos os sítios da rede unidimensional, σ representa o spin para cima ou para baixo do elétron, $h.c.$ é o termo hermitiano conjugado, t é a amplitude de *hopping* e $c_{i,\sigma}^\dagger, c_{j,\sigma}$ são os operadores de criação e destruição, respectivamente. É bom destacar que o *hopping* é a probabilidade de salto entre orbitais atômicos, uma definição desse parâmetro é dada pela seguinte expressão:

$$t = \langle \phi(\vec{r} - \vec{R}) | V - U | \phi(\vec{r}) \rangle \quad (1.2)$$

onde V é potencial do elétron na rede cristalina, U é potencial do elétron em átomos isolados, $\phi(\vec{r})$ e $\phi(\vec{r} - \vec{R})$ são as funções dos orbitais atômicos.

Nos capítulos 1 e 2, todos os hamiltonianos seguem o modelo de aproximação *Tight Binding*.

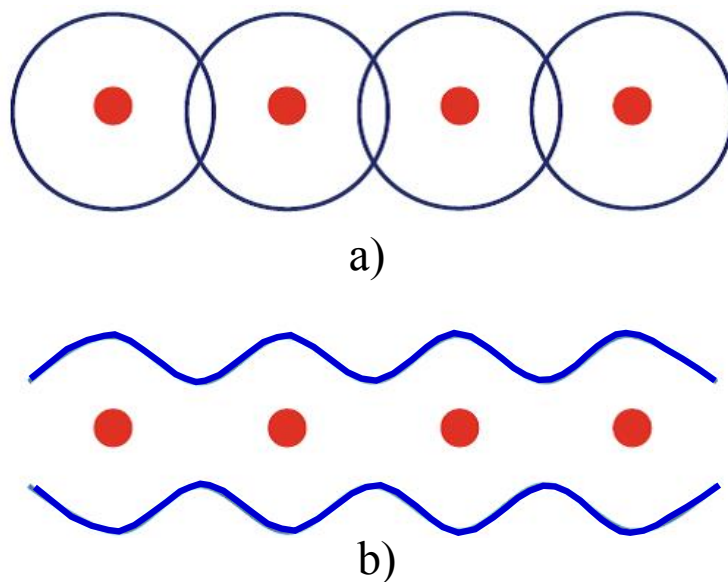


Figura 1.1: Desenho esquemático que mostra a aproximação do modelo Tight Binding. a) Modelo de átomos clássicos juntos, que formam um sólido, onde a função de onda associada aos orbitais atômicos adjacentes formam um overlap. b) Se consideramos o overlap pequeno, os elétrons ainda estão nos orbitais originais. No entanto, eles têm uma probabilidade de tunelar para as órbitas adjuntas, criando desta forma uma banda de energia.

2

O Modelo SSH

2.1 Introdução

Neste capítulo, apresentaremos o modelo "Tight binding" proposto por Su-Schrieffer-Huger (SSH) para descrever as propriedades de transporte de elétrons na molécula de poliacetileno. Escrevemos o modelo no formalismo da segunda quantização, calculamos os autovalores e autovetores, e também identificamos a transição de fase quântica entre duas fases isolantes. A transição de fase é induzida pela variação dos parâmetros de hopping do modelo. Na última parte deste capítulo, calculamos o invariante topológico, "Winding Number", e os estados de borda ou "Edge States" da cadeia; também mostramos que o modelo SSH apresenta uma transição de fase topológica.

2.2 O Hamiltoniano do Modelo SSH

Como se pode ver, a figura 2.1 mostra um desenho esquemático da molécula do poliacetileno. Nesta figura podemos ver as ligações duplas do Carbono e as ligações simples do Carbono e Hidrogênio. A figura 2.2 descreve o modelo matemático usado para estabelecer matematicamente a molécula do poliacetileno em forma de uma cadeia finita. Nesta figura, identificamos os hoppings t_1 dentro da célula unitária, composta por átomos de Carbono A e B. Podemos também identificar os hoppings t_2 entre células unitárias. É bom apontar que os termos de hopping t_1 e t_2 conectam subredes diferentes. Além disso é importante mencionar que os termos do *hopping* representam a probabilidade de pular, de um orbital para outro para formar uma banda de energia no modelo *Tight – Binding*. Usando a figura 2.2, podemos escrever o Hamiltoniano para o modelo SSH como

$$H = t_1 \sum_{i=1}^{N/2} (c_{A,i}^\dagger c_{B,i} + c_{B,i}^\dagger c_{A,i}) + t_2 \sum_{i=1}^{N/2} (c_{A,i+1}^\dagger c_{B,i} + c_{B,i}^\dagger c_{A,i+1}), \quad (2.1)$$

onde c^\dagger e c são os operadores de criação e destruição, tanto para A como para B. Aqui t_1 é o termo de hopping entre subredes e t_2 o termo de hopping entre células unitárias adjacentes. Para o modelo SSH, a energia potencial é nula, então temos um modelo de elétrons livres, e o potencial químico μ é zero. O modelo SSH é derivado do modelo Tight-Binding, que significa

ligação forte. Neste modelo, Eq. 2.1, os átomos são descritos como fortemente ligados uns aos outros, com um "overlap"pequeno.

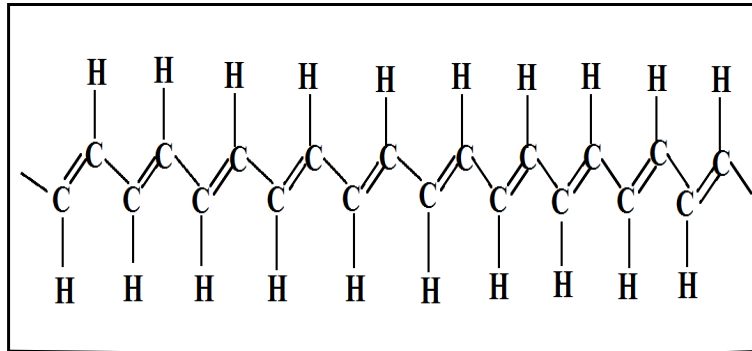


Figura 2.1: Representação esquemática da Molécula do Poliacetileno. Aqui os átomos de carbono são representados pela letra C, enquanto os átomos do Hidrogênio são representados pela letra H. Podemos ver a ligação simples (representado por um traço) do Carbono e Carbono, a ligação dupla entre carbonos (representado por dois traços na figura) e a ligação simples entre Carbono e Hidrogênio

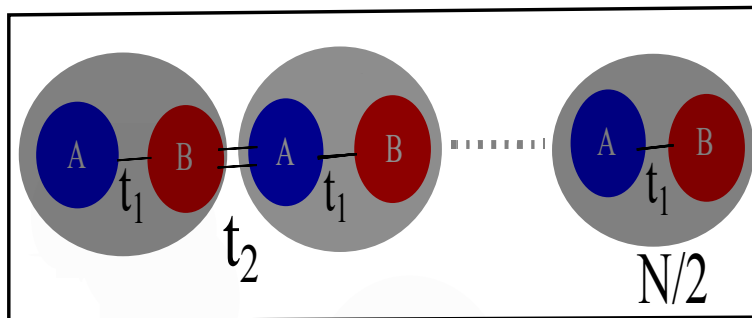


Figura 2.2: Modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) para descrever as propriedades eletrônicas da molécula do Poliacetileno. Aqui, A e B são as duas sub-redes da cadeia, e em cada subrede temos um átomo de carbono. t_1 são os hoppings entre as subredes dentro da célula unitária, e t_2 é o termo de hopping entre células unitárias

2.3 Modelo SSH no espaço dos Momentos

Nesta parte, faremos uso da representação de Fourier, nos operadores do Hamiltoniano do modelo SSH. Considerando que o modelo possui simetria translacional, conforme estabelecido pelas funções de Bloch, podemos definir a transformada de Fourier para os operadores $c_{A,i}$ e $c_{B,i}$ como:

$$c_{A,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} c_{A,k} \quad (2.2)$$

$$c_{B,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} c_{B,k} \quad (2.3)$$

onde $c_{A,k}$ e $c_{B,k}$ são os operadores no espaço de momentos, k é o vetor de onda e r_i a posição de cada átomo na célula unitária i . Substituindo as equações (Eq. 2.2, e Eq 2.3) no modelo SSH(Eq 2.1), obtemos a seguinte expressão para os operadores de criação e destruição do hamiltoniano SSH no espaço dos momentos:

$$\sum_i c_{A,i}^\dagger c_{B,i} = \frac{1}{N} \sum_{k'} \sum_k c_{A,k'}^\dagger c_{B,k} \quad (2.4)$$

$$\sum_i c_{B,i}^\dagger c_{A,i+1} = \frac{1}{N} \sum_{k'} \sum_k c_{B,k'}^\dagger c_{A,k} e^{ika}, \quad (2.5)$$

onde a é a constante de rede nas equações (2.5 e 2.4), e $r_{i+1} = \vec{r}_i + \vec{a}$ para o operador $c_{A,i+1}$. Portanto, o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$H_k = t_1 \sum_{k=1} (c_{A,k}^\dagger c_{B,k} + h.c.) + t_2 \sum_{k=1} (c_{B,k}^\dagger c_{A,k} e^{ika} + h.c.), \quad (2.6)$$

Definindo um vetor base da seguinte forma $\psi_k^\dagger = \begin{pmatrix} c_{A,k}^\dagger & c_{B,k}^\dagger \end{pmatrix}$, reescrevemos o hamiltoniano na notação de Dirac da seguinte forma:

$$H = \sum_k \psi_k^\dagger H_k \psi_k, \quad (2.7)$$

ou ainda

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} c_{A,k}^\dagger & c_{B,k}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{A,k} \\ c_{B,k} \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

onde H_k é o Kernel ou núcleo do hamiltoniano H . Agora, usando a fórmula de Euler para o exponencial complexo e definindo $h_1 = t_1 + t_2 \cos(ka)$ e $h_2 = t_2 \sin(ka)$ podemos reescrever H_k como:

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & h_1 - ih_2 \\ h_1 + ih_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

2.4 Cálculo do Espectro de Energia

O espectro de energia do modelo SSH (Eq 2.6) no espaço dos momentos pode ser obtido pelo cálculo dos autovalores do Kernel (H_k) do hamiltoniano H . Definindo E como autovalor de H_k esses autovalores são obtidos através da equação de Schrödinger:

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad (2.10)$$

onde:

$$|\varphi\rangle = \varphi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

ou ainda:

$$H\varphi - E\varphi = 0 \quad (2.12)$$

$$(H - E\mathbb{I})\varphi = 0 \quad (2.13)$$

que é chamado de equação característica e que admite soluções não triviais apenas se seu determinante for igual a zero. Logo tínhamos que:

$$\varphi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

e fazemos:

$$\begin{pmatrix} -E & h_1 - ih_2 \\ h_1 + ih_2 & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

onde χ_1, χ_2 são as componentes dos autovetores (ver Apêndice*). Para evitar soluções triviais de χ_1, χ_2 , somos forçados a exigir que:

$$\det \begin{pmatrix} -E & h_1 - ih_2 \\ h_1 + ih_2 & -E \end{pmatrix} = 0 \quad (2.16)$$

Resolvendo o determinante anterior (Eq 2.16) e isolando a variável E encontramos que as autoenergias do modelo SSH são:

$$E = \pm \sqrt{h_1^2 + h_2^2} \quad (2.17)$$

onde $h_1 = t_1 + t_2 \cos(ka)$ e $h_2 = t_2 \sin(ka)$. Reescrevendo a equação anterior em termos de t_1 e t_2 temos:

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(ka)} \quad (2.18)$$

Portanto, o espectro de energia do modelo SSH é dado por E_+ e E_- . Substituindo os autovalores E_+ e E_- na Eq 2.15 encontramos que:

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{h_1 - ih_2}{E} \\ \pm 1 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

a seguir tomaremos o valor de $a = 1$.

2.5 Estados Fundamentais do Modelo SSH

Nessa seção vamos recorrer a soluções gráficas para o espectro de energia para entender o que é o "gap" e como ele muda como função de t_1 e t_2 . As figuras (2.3) são gráficos da energia em função dos momentos das quase-partículas:

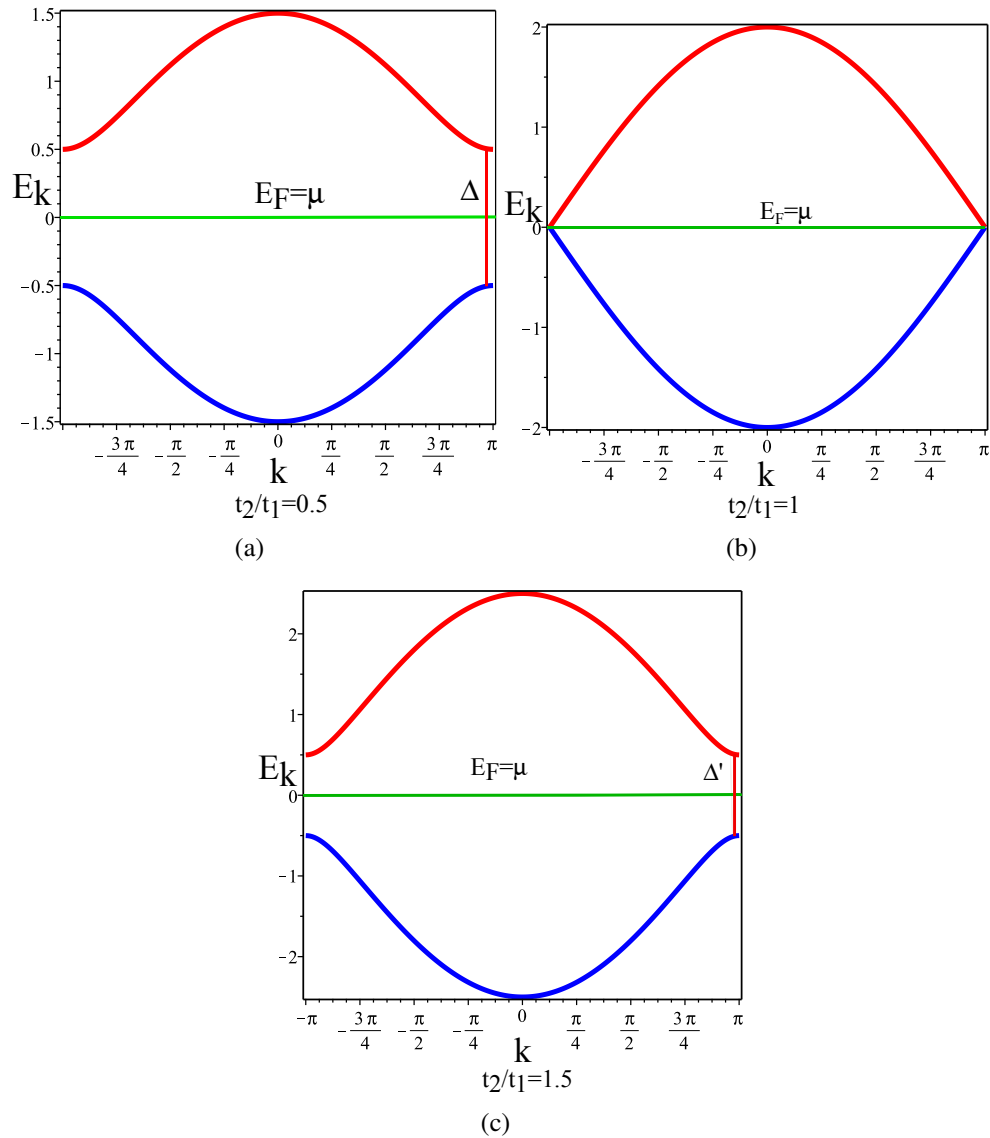


Figura 2.3: Espectro de energia para o modelo SSH com $t_1 = 1$. (a) Energia como função de k para $t_2/t_1 = 0.5$, b) $t_2/t_1 = 1$ e c) $t_2/t_1 = 1.5$. Aqui E_F é o nível de Fermi e μ o potencial químico. Consideramos a energia de Fermi e o potencial químico iguais a zero, onde a linha verde na figura representa o nível zero de energia. Podemos ver o gap Δ nas fases isolantes, ver as partes a) e c) da figura. Na parte b) temos uma transição de fase quântica caracterizada pela ausência de gap(Δ) no espectro de energia.

Podemos ver na figura (2.3(a)) o espectro da energia para o caso $t_1 = 1$ e $t_2/t_1 = 0.5$. Neste caso, existe um gap Δ entre o máximo valor de E_- e o mínimo valor de E_+ . No gráfico, Δ representa a região proibida entre as bandas de valência e de condução. Nós fixamos que o potencial químico seja igual à energia de Fermi (E_F) em $T = 0$, com isto garantimos que a banda de valência (E_-) está na sua totalidade preenchida de elétrons. Portanto para excitar os elétrons

para a banda de condução (E_+) é necessário fornecer uma energia $E \geq \Delta$. Neste caso o espectro de energia do tipo *a*) descreve um material isolante de banda, sendo assim não é possível gerar correntes eletrônicas no material fornecendo valores de energia para o elétron menores que Δ .

Fazendo $\frac{t_2}{t_1} = 1$ obtemos o gráfico da Fig. 2.3(b). Neste caso, pode-se observar que o espectro de energia não possui gap entre E_- e E_+ . Agora, é possível excitar os elétrons com energia arbitrária do nível de Fermi ($E_F = 0$) para estados com energia maior que zero. Portanto, o espectro da Fig. 2.3(b) descreve um material condutor. Além de descrever o espectro de energia de um metal, esta figura apresenta uma transição de fase quântica, já que o gap do sistema se anula em $|t_1| = |t_2|$. A transição de fase ocorre entre as fases $|t_1| > |t_2|$ e $|t_2| > |t_1|$. O gráfico da Fig. 2.3(c) mostra o caso quando $t_2/t_1 = 1.5$, logo $|t_2| > |t_1|$. Ambas fases, $|t_2| > |t_1|$ e $|t_2| < |t_1|$ apresentam um gap no espectro de energia e portanto são isolantes de banda. Podemos realizar o seguinte questionamento: as fases isolantes dos gráficos 2.3(a) e 2.3(c) são iguais? Possuem as mesmas propriedades físicas? Vale a pena ressaltar que segundo a teoria de Landau para transições de fase, ambas as fases isolantes, possuem as mesmas simetrias, conservando o número de partículas, as fases deveriam ser fisicamente iguais. Para Landau, uma transição de fase quântica ou clássica ocorre quando o parâmetro de ordem da fase se anula, existindo assim uma quebra de simetria entre as fases envolvidas na transição. Como exemplo, temos a transição de fase de uma fase ferromagnética ordenada para uma paramagnética desordenada quando a temperatura T é maior que a temperatura crítica ($T > T_C$), como se ilustra na Fig. 2.4. Nas

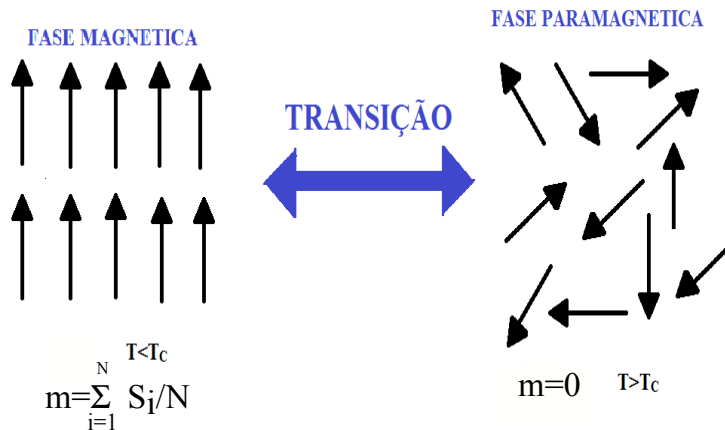


Figura 2.4: Transição de fase clássica ordem-desordem induzida pela temperatura. Fase ferromagnética (à esquerda) e fase paramagnética (direita). Na fase ferromagnética, temos magnetização (m) diferente de zero, enquanto na fase paramagnética a magnetização é igual zero.

próximas seções, mostraremos que a transição de fase da figura 2.3 não obedece o paradigma de Landau. A transição de fase da figura 2.3(b) é um exemplo de fase topológica. Ela separa duas fases isolantes com as mesmas simetrias discretas, mas com diferentes propriedades físicas e estados eletrônicos de Bloch com propriedades topológicas diferentes. Discutiremos essas propriedades nas próximas seções.

2.6 Simetrias do Modelo SSH

Nessa seção, introduziremos as seguintes operações discretas: Reversão Temporal, Quiral, e Partícula-Buraco. Como vimos na seção anterior, o Hamiltoniano Eq 2.9 pode ser escrito da seguinte maneira:

$$H_k(k) = \begin{pmatrix} 0 & h_1 - ih_2 \\ h_1 + ih_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

sendo: $h_1 = t_1 + t_2 \cos(k)$ e $h_2 = t_2 \sin(k)$. Logo, identificando as matrizes de Pauli podemos reescrever o Kernel do Hamiltoniano do modelo SSH como:

$$h_k(k) = h_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + h_2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

$$h_k(k) = h_1 \sigma_x + h_2 \sigma_y \quad (2.22)$$

onde: $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ e $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$.

2.6.1 Simetria Quiral

Agora, lembrando uma das propriedades de anticomutação das matrizes de Pauli:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij}. \quad (2.23)$$

A simetria quiral é definida pela seguinte equação:

$$\{h_k, \sigma_z\} = 0, \quad (2.24)$$

onde σ_z é a matriz de Pauli e nosso operador quiral que anticomuta com o hamiltoniano. Sabemos que equação de Schrodinger em qualquer base para o Hamiltoniano do modelo SSH pode ser escrito da seguinte maneira:

$$H |V_m\rangle = E|V_m\rangle \quad (2.25)$$

Considerando a equação Eq.(2.25) e a simetria quiral, segue que:

$$h_k \sigma_z |V_k\rangle = -\sigma_z h_k |V_k\rangle \quad (2.26)$$

$$h_k \sigma_z |V_k\rangle = -E(\sigma_z |V_k\rangle) \quad (2.27)$$

$$h_k |V'_k\rangle = -E|V'_k\rangle \quad (2.28)$$

Então teremos que:

$$|V'_k\rangle = \sigma_z |V_k\rangle \quad (2.29)$$

Portanto, mostramos que para cada estado $|V_k\rangle$ com energia E , existe um estado $\sigma_z|V_k\rangle$ com energia $-E$. O operador de simetria quiral atua na base ψ da equação 2.8 da seguinte forma:

$$\sigma_z|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

$$\sigma_z|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_A \\ -c_B \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Concluimos que o operador quiral para o modelo SSH é:

$$\Pi = \sigma_z, \quad (2.32)$$

com $\Pi^2 = 1$.

2.6.2 Simetria de Reversão Temporal

Para um sistema "spinless", esperamos que $H_k(k) = H_k^*(-k)$ (onde H_k^* é o conjugado do hamiltoniano), quando o sistema tem reversão temporal. Sabemos que para esse tipo de simetria a energia em k é igual a energia em $-k$. Para mostrar esse resultado, começamos definindo o operador de reversão temporal da seguinte forma:

$$|u\rangle \longrightarrow T|u\rangle \quad (2.33)$$

onde $|u\rangle$ é o estado de tempo invertido, portanto esperamos que se: $|u\rangle = |k\rangle \longrightarrow T|k\rangle = |-k\rangle$. Então, para que haja uma reversão temporal, precisamos exigir que $H = THT^{-1}$. A seguir continuamos com a simetria de reversão temporal para o modelo SSH da seguinte maneira:

$$h_k(k)|u(k)\rangle = E(k)|u(k)\rangle \quad (2.34)$$

Como $h_k(-k) = \Theta h_k(k) \Theta^{-1}$, (Θ é um operador anti unitário) segue que:

$$\Theta h_k(-k) \Theta^{-1} |u(k)\rangle = E(k) |u(k)\rangle \quad (2.35)$$

Fazendo $\Theta = TK$, sendo T um operador anti unitário e K um operador de conjugação complexo, e Θ é um operador antiunitario:

$$TKh_k(-k)T^{-1}K^{-1}|u(k)\rangle = E(k)|u(k)\rangle \quad (2.36)$$

Multiplicando por T^{-1} obtemos:

$$Kh_k(-k)T^{-1}K^{-1}|u(k)\rangle = T^{-1}E(k)|u(k)\rangle \quad (2.37)$$

Portanto, podemos estabelecê-lo como:

$$h_k^*(-k)(T^t|u(k)\rangle) = E(k)(T^t|u(k)\rangle) \quad (2.38)$$

onde T^t é a transposta do operador T . Logo temos:

$$h_k^*(-k)(T|u(k)\rangle)^* = E(k)(T|u(k)\rangle)^* \quad (2.39)$$

ou ainda:

$$h_k(-k)[|u(-k)\rangle] = E(k)[|u(-k)\rangle] \quad (2.40)$$

Logo, lembrando que podemos trocar k por $-k$ na equação 2.34 temos:

$$h_k(k)|u(k)\rangle = E(-k)|u(k)\rangle \quad (2.41)$$

Logo comparando as equações 2.34 e 2.41 encontramos:

$$E(k) = E(-k) \quad (2.42)$$

Portanto, o modelo SSH apresenta simetria de Reversão temporal $\Theta = TK$ (onde T é igual a matriz identidade), por não sofrer mudanças na energia, com a propriedade $\Theta^2 = 1$.

2.6.3 Simetria Partícula-Buraco

Finalmente, a última simetria do modelo SSH pode ser obtida com:

$$\Xi = \Theta\Pi \quad (2.43)$$

$$\Xi = K\sigma_z \quad (2.44)$$

com a propriedade de:

$$\Xi^2 = 1; \quad (2.45)$$

onde σ_z é a matriz de Pauli e K é o operador de conjugação complexa. O que nos leva a concluir que, para o modelo SSH, o produto das duas simetrias discretas anteriores é diferente de zero, pois tem simetria Chiral e Reversão Temporal, portanto apresenta simetria Partícula-Buraco Ξ .

2.7 Transição de Fase Topológica e Diagrama de Fases

Na seção anterior, mostramos que o Hamiltoniano do modelo SSH apresenta as três simetrias discretas: Reversão temporal $\Theta^2 = 1$, Quiral $\Pi^2 = 1$ e Partícula-Buraco $\Xi^2 = 1$. O sistema apresenta essas simetrias em ambas as fases isolantes ($t_1 > t_2$ e $t_1 < t_2$), figuras 2.3a) e 2.3c) respectivamente. Com base na tabela de classificação de isolantes topológicos (Ver

Fig. 2.5), o modelo SSH pertence a classe BDI ($\Xi^2 = 1, \Theta^2 = 1, \Pi^2 = 1$).

| AZ | Symmetry | | | Dimension | | | | | | | |
|------------|------------|----------|----------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| | Θ^2 | Ξ^2 | Π^2 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| A | 0 | 0 | 0 | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z} |
| AIII | 0 | 0 | 1 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z} | 0 |
| AI | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z} |
| BDI | 1 | 1 | 1 | \mathbb{Z} | 0 | 0 | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_2 |
| D | 0 | 1 | 0 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z} | 0 | 0 | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z}_2 |
| DIII | -1 | 1 | 1 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z} | 0 | 0 | 0 | \mathbb{Z} | 0 |
| AII | -1 | 0 | 0 | 0 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z} | 0 | 0 | 0 | \mathbb{Z} |
| CII | -1 | -1 | 1 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z} | 0 | 0 | 0 |
| C | 0 | -1 | 0 | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z} | 0 | 0 |
| CI | 1 | -1 | 1 | 0 | 0 | \mathbb{Z} | 0 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z}_2 | \mathbb{Z} | 0 |

Figura 2.5: Tabela de isolantes topológicos, onde Θ, Ξ, Π são os operadores de simetria discreta de reversão temporal, Partícula-buraco e Quiral, respectivamente. Na primeira coluna temos as classes topológicas (dez), e na segunda, terceira e quarta colunas temos os valores de Θ^2, Ξ^2, Π^2 . Da quinta à décima segunda coluna temos a dimensão espacial do modelo. Na tabela o símbolo \mathbb{Z} representa um invariante topológico que pode assumir valores inteiros (i.e winding number na classe BDI). O símbolo \mathbb{Z}_2 é um invariante topológico que assume dois valores, 0 ou 1. Marcamos em vermelho a classe BDI, a qual o modelo SSH pertence.

Uma fase topológica é caracterizada por um invariante topológico, de tal forma que o invariante topológico é zero na fase topologicamente trivial e diferente de zero na fase topológica não trivial. O invariante topológico que deve ser calculado depende da classe topológica do modelo e depende das simetrias discretas. Na classe BDI, a fase topológica é caracterizada por um invariante topológico do tipo $\bar{\mathbb{Z}}$ (números inteiros), conhecidos como "*winding Number*". Para um sistema com simetria quiral Π , o *winding number* é dado por:

$$\omega = \frac{1}{4\pi i} \int_0^{2\pi} \text{Tr}(\Pi \cdot H_k^{-1} \frac{\partial H_k}{\partial k}) dk, \quad (2.46)$$

onde $\Pi = \sigma_z$ para o modelo SSH e $H_k = h_1 \sigma_x + h_2 \sigma_y$. Para encontrar o diagrama de fase devemos calcular ω como uma função de t_1 e t_2 . Integrando a equação anterior (ver Apêndice*) chegamos ao seguinte resultado.

$$\omega = \begin{cases} 1, & \text{se } |t_2| > |t_1|, \\ 0, & \text{se } |t_2| \leq |t_1|. \end{cases}$$

Na figura seguinte, destacamos a região verde para valores que fornecem $\omega = 1$ e a região azul quando $\omega = 0$. Por meio do invariante topológico, descobrimos que as fases isolantes da figura (2.3(a))e (2.3(c)) são topologicamente diferentes, pois a figura (2.3(a)) mostra uma fase isolante com $\omega = 0$, enquanto a figura 2.3(c) mostra uma fase isolante com $\omega = 1$. A seguir

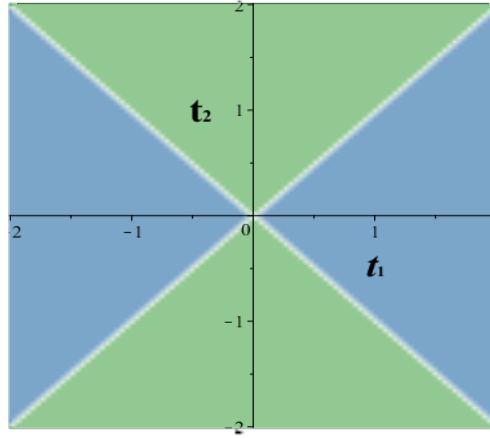


Figura 2.6: Diagrama de fases do modelo SSH, onde o eixo x é o hopping t_1 e o eixo y é o hopping t_2 . A fase topologicamente trivial ($\omega = 0$) ocorre quando $t_2 < t_1$, ver a região azul do diagrama de fases. A fase topológica não trivial ($\omega = 1$) ocorre na região $t_2 > t_1$ do diagrama de fases, ver região verde. A linha branca do diagrama representa os pontos de transição de fase onde o gap Δ se anula.

mostraremos as diferenças nas propriedades físicas de transporte eletrônico entre um isolante trivial $\omega = 0$ e um isolante topológico $\omega \neq 0$

2.8 Espectro de Energia no Espaço Real da Cadeia Aberta

Nessa seção, estudaremos o modelo SSH numa cadeia aberta usando o hamiltoniano da Eq 2.1 da seguinte forma:

$$H_T = \sum_i \psi_k^\dagger \bar{H} \psi_k; \quad (2.47)$$

onde:

$$\bar{H} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & 0 & t_1 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & t_2 & t_1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & t_2 & t_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \vdots & \vdots & t_2 & t_1 \\ t_1 & t_2 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & t_1 & t_2 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & t_1 & t_2 & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

E a base ψ é definida como:

$$\psi^\dagger = \left(c_{1,A}^\dagger \quad c_{2,A}^\dagger \quad \dots \quad c_{N,A}^\dagger; \quad c_{1,B}^\dagger \quad c_{2,B}^\dagger \quad \dots \quad c_{N,B}^\dagger \right) \quad (2.49)$$

Para obter o espectro de energia do Hamiltoniano Eq 2.48 para 50 sítios, precisamos diagonalizar uma matriz $2N \times 2N = 100 \times 100$. Diagonalizando numericamente em *Maple-2017*, \bar{H} , obtemos

um conjunto de $2N$ autoenergias e $2N$ autovetores, ou seja:

$$E = \{E_1, E_2, \dots, E_N; E_{N+1}, \dots, E_{2N}\} \quad (2.50)$$

$$\vec{v} = \{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N; \vec{v}_{N+1}, \dots, \vec{v}_{2N}\} \quad (2.51)$$

Na figura 2.7, mostramos o espectro das $2N$ energias como função de t_2 , quando $t_1 =$

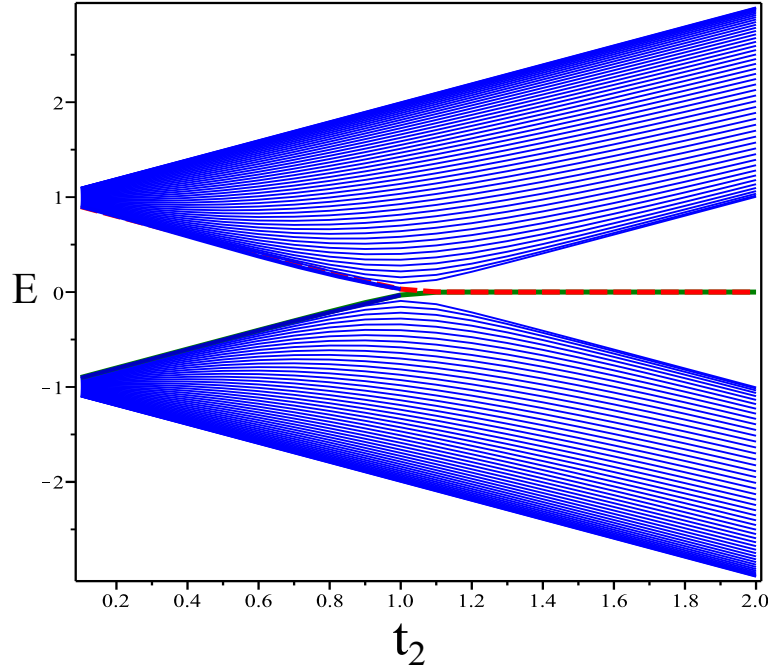


Figura 2.7: Espectro de energia como função do hopping t_2 (com $t_1 = 1$) para uma cadeia finita com 50 células unitárias. As linhas azuis são os estados de bulk, e as linhas tracejadas vermelhas e verdes são os estados de borda com energia zero. Os estados de energia zero surgem na fase isolante topológica para $t_2 > 1$.

1 (*valor fixo*). Notamos que existem 50 energias positivas e 50 negativas. Dentro desse conjunto de 100 energias, existem duas energias (E_1 e E_2) que se mantêm iguais a zero para a região $t_2 > 1$ destacada na cor vermelha. As regiões $t_2 < 1$ e $t_2 > 1$ apresentam um gap no espectro de energia. Quando $t_2 = 1$, podemos observar que o gap do sistema desaparece. O ponto $t_2 = 1$ é um ponto de transição de fase entre as fases isolantes topologicamente trivial $t_1 > t_2$, e topologicamente não trivial $t_2 > t_1$, ver figuras 2.3 e 2.7.

2.9 Estados de Borda

Sejam os autovetores da seção anterior;

$$\vec{v}_1^\dagger = (v_{11}^\dagger, \dots, v_{1N}^\dagger; v_{N+1}^\dagger, \dots, v_{2N}^\dagger); \quad (2.52)$$

$$\vec{v}_2^\dagger = (v_{21}^\dagger, \dots, v_{2N}^\dagger; v_{2N+1}^\dagger, \dots, v_{2N}^\dagger), \quad (2.53)$$

Podemos definir $|v_{i,j}|^2$ como a amplitude de probabilidade de obter uma solução i de energia zero no sítios j da cadeia. Obtemos a figura 2.8:

Nessa Figura o eixo vertical é $|v_{ij}|^2$, enquanto o eixo horizontal marca a posição dos sítios da cadeia SSH. Podemos ver que os estados de energia zero (E_1 e E_2) estão concentrados nas extremidades da cadeia, pois a máxima probabilidade ocorre nos sítios 1 e N . Note-se ainda que $|v_{ij}|^2$ tende a zero para sítios localizados no meio da cadeia que correspondem ao Bulk da cadeia, ver Fig. 2.8. Portanto, E_1 e E_2 são os estados de borda da cadeia. Os estados com energia diferente de zero oscilam ao longo da cadeia.

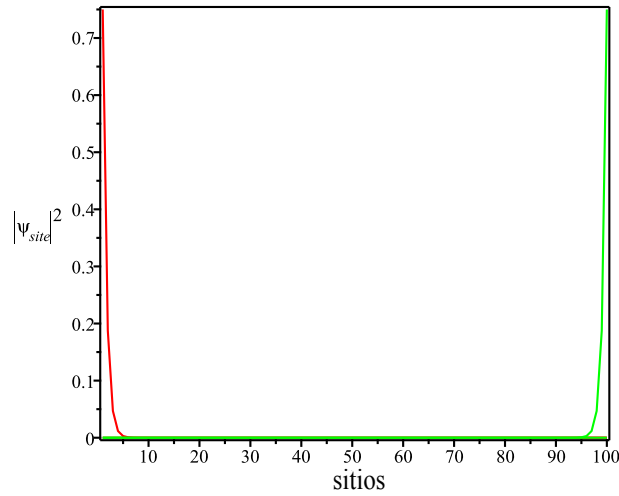


Figura 2.8: Densidade de probabilidade($|\psi|^2$) dos estados de energia zero como função da posição dos sítios da cadeia. O estado vermelho está localizado em torno do primeiro sítio da cadeia, enquanto o estado verde está localizado no último sítio.

É importante ressaltar que os estados com energia zero na borda da cadeia, apenas existem na região $t_2 > 1$ "topológica". A existência dos estados de borda é garantida pela fase topológica não trivial do isolante. De fato, segundo o teorema "Bulk Boundary Correspondence"(9) o invariante topológico ω conta (Eq. 2.46) o número de estados de borda na ponta da cadeia. A proteção dos estados de borda vem da topologia não trivial dos estados eletrônicos do Bulk, uma vez que o cálculo do invariante topológico ω depende apenas dos estados de Bulk. Enquanto o isolante for topológico, ou seja $|t_2| > |t_1|$ e existe a simetria Quiral, teremos estados de borda com energia zero. Esses estados estão localizados no meio do gap da fase isolante $|t_2| > |t_1|$. Ver Fig. 2.7(curvas vermelho e verde).

2.9.1 Natureza dos Estados de Borda

Com base em:

$$H = \sum_i \psi_{2N}^\dagger H_{2N \times 2N} \psi_{2N}, \quad (2.54)$$

Então $u_{11} = v_{11}$, $u_{12N} = v_{2N1}$,, $u_{2N2N} = v_{2N2N}$. Na base diagonal temos que:

$$a_i^\dagger = \sum_{j=1} \alpha_{ij} c_{Aj}^\dagger + \sum_{j=N+1} \beta_{ij} c_{Bj}^\dagger \quad (2.61)$$

$$b_i^\dagger = \sum_{j=N} \gamma_{ij} c_{Aj}^\dagger + \sum_{j=2N} \eta_{ij} c_{Bj}^\dagger, \quad (2.62)$$

onde α_{ij} , β_{ij} , γ_{ij} e η_{ij} dependem dos coeficientes da matriz U . As excitações eletrônicas estão escritas como funções dos operadores c_A e c_B . Note que qualquer excitação na base diagonal com energia E_i é uma combinação linear dos operadores de todos os sítios. As excitações nos estados de borda e Bulk são combinações de partículas c_A^\dagger e c_B^\dagger ou antipartículas c_A e c_B ; segundo a notação da Física de Partículas.

3

O Modelo de Kitaev

3.1 Introdução

Nessa seção, começamos o estudo de um novo modelo efetivo chamado de cadeia de Kitaev. Ao contrário do modelo anterior, que foi proposto para estudar fases isolantes, o modelo de Kitaev descreve estados supercondutores não convencionais do tipo tripleto (p-wave), onde os "spins" estão totalmente polarizados. Após definirmos os parâmetros do modelo do Hamiltoniano de Kitaev (μ o potencial químico, Δ parâmetro supercondutor), vamos calcular as suas autoenergias e autovetores, e então estudar as diferentes fases para as quais se tem um "gap" no espectro de energia. Finalmente vamos obter, como no capítulo anterior, o *winding number* e os estados de borda para entender a natureza desses estados da cadeia Supercondutora de Kitaev.

3.2 O Hamiltoniano de Kitaev

O modelo de Kitaev é definido pelo seguinte Hamiltoniano:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) - \mu \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle i,j \rangle} (\Delta_{i,j}^* (c_i^\dagger c_j^\dagger - c_j^\dagger c_i^\dagger) + h.c.), \quad (3.1)$$

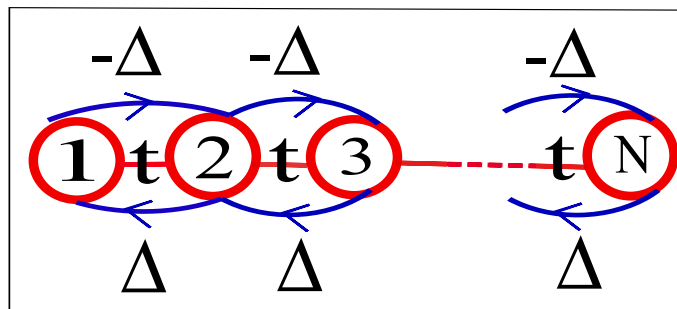


Figura 3.1: Cadeia supercondutora de Kitaev, onde os sítios foram numerados de 1 até N . t é o termo de hopping entre os sítios de primeiros vizinhos, e Δ é o parâmetro supercondutor antisimétrico ($\Delta_{ij} = -\Delta_{ji}$)

onde c_i^\dagger e c_i são os operadores de criação e destruição no sítio i respectivamente, e t é

o termo de Hopping, ver Fig. 3.1. Nesta parte, é importante dizer que o sub-índice j pode ser escrito como $j = i + 1$; definimos μ como sendo o potencial químico ou a energia de Fermi em $T = 0$. Δ é o parâmetro supercondutor que causa a criação de pares de elétrons correlacionados em sitios adjacentes, para um sistema "spinless". Consideramos que Δ é real e quebra a simetria de inversão espacial, ou seja $\Delta_{ij} = -\Delta_{ji}$; e *h.c.* é o hermitiano complexo.

3.3 O Hamiltoniano Kitaev no Espaço dos Momentos

Considerando que o hamiltoniano de Kitaev apresenta simetria translacional, definimos a transformada de Fourier da seguinte maneira:

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (3.2)$$

$$c_{i+1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} c_{k'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j}, \quad (3.3)$$

onde $\vec{r}_j = \vec{r}_i + \vec{a}$, e a é o parâmetro de rede. Realizando a transformada de Fourier, e substituindo as equações anteriores em Eq. 3.1, podemos reescrever o Hamiltoniano de Kitaev na seguinte forma (ver apêndice):

$$H_k = -2t \sum_k \cos(ka) c_k^\dagger c_k - \mu \sum_k c_k^\dagger c_k + 2i\Delta \sum_k \sin(ka) (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger - c_k c_{-k}), \quad (3.4)$$

Usando a simetria da soma em k e a relação de anticomutação, o hamiltoniano (Eq. 3.4) pode ser reescrito como;

$$H_k = t \sum_k \cos(ka) (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) + \frac{\mu}{2} \sum_k (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) + i2\Delta \sum_k \sin(ka) (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger - c_k c_{-k}) \quad (3.5)$$

Por conveniência, escreveremos a Eq. 3.5 na forma matricial abaixo,

$$H = \sum_k \phi_k^\dagger H_k \phi_k \quad (3.6)$$

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu + 2t \cos(ka) & 2i\Delta \sin(ka) \\ -2i\Delta \sin(ka) & -\mu - 2t \cos(ka) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

onde definimos o spinor de Nambu como $\phi_k^\dagger = \begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix}$, e:

$$H_k = \begin{pmatrix} \mu + 2t \cos(ka) & 2i\Delta \sin(ka) \\ -2i\Delta \sin(ka) & -\mu - 2t \cos(ka) \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

A seguir, tomaremos $a = 1$.

3.4 Cálculo do Espectro de Energia

O espectro de energia do modelo de Kitaev no espaço dos momentos, pode ser obtido a partir da diagonalização da Eq. 3.8. A diagonalização fornece as autoenergias, seguindo o mesmo procedimento que para o modelo SSH temos (Ver seção 2.4):

$$H_k|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \quad (3.9)$$

$$\det(H_k - E\mathbb{I}) = 0 \quad (3.10)$$

Resolvendo a equação anterior, obtemos:

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{4\Delta^2 - 4\Delta^2 \cos^2(k) + \mu^2 + 4\mu t \cos(k) + 4t^2 \cos^2(k)}, \quad (3.11)$$

cujos correspondentes autovetores encontramos da seguinte forma:

$$\left[\begin{pmatrix} \mu + 2t \cos(k) & 2i\Delta \sin(k) \\ -2i\Delta \sin(k) & -\mu - 2t \cos(k) \end{pmatrix} - E_{\pm} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$\vec{v}_1(E_+) = \begin{pmatrix} -\frac{2i\Delta \sin(k)}{\mu + 2t \cos(k) - \sqrt{4\Delta^2 + \mu^2 + 4(t^2 - \Delta^2) \cos^2(k)}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

$$\vec{v}_2(E_-) = \begin{pmatrix} -\frac{2i\Delta \sin(k)}{\mu + 2t \cos(k) + \sqrt{4\Delta^2 + \mu^2 + 4(t^2 - \Delta^2) \cos^2(k)}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

3.5 Estados Fundamentais do Modelo Kitaev

Nessa seção usamos a Fig. 3.2, para descrever as fases supercondutoras do modelo de Kitaev; da mesma forma que foi feito no caso do modelo SSH, Fig. 2.3(a). A Fig. 3.2 mostra os autovalores de H_k para $\frac{\mu}{t} = 1$ e $\Delta = 1$. Pode-se ver que existe um "gap" δ no espectro de energia quando todos os parâmetros e/ou variáveis da Eq. 3.11 têm o mesmo valor, ou seja $\frac{\Delta}{t} = \frac{\mu}{t} = 1$. É importante mencionar que representamos o gap por δ , ao contrário do capítulo anterior onde o gap é representado pelo delta maiúsculo; devemos também mencionar que δ pode ser obtido da seguinte forma $\delta = E_+(\frac{\pi}{a}) - E_-(\frac{\pi}{a}) = 2$. Comparando o gráfico (Fig. 3.2) do modelo de Kitaev com o gráfico do modelo SSH(ver Fig. 2.3(a)), descobrimos que os dois gráficos são semelhantes. Isso se deve ao fato de que as equações para as auto-energias dos dois modelos são semelhantes, em particular são iguais quando $\frac{\mu}{t} = \Delta = 1$ e $t_1 = t_2 = 1$. Para o caso do modelo Kitaev o gráfico da Fig. 3.2 representa um estado Superconductor, enquanto o modelo SSH um isolante. A Fig. 3.3 mostra os autovalores de H_k como função do momento k para valores fixos de $\frac{\mu}{t}$ e Δ ; onde a) é uma fase supercondutora e tem valores de $\frac{\mu}{2t} = 1/2$ e $\Delta = 1$, b) é uma transição de fase com $\frac{\mu}{2t} = 1$, $\Delta = 1$ e c) com $\frac{\mu}{2t} = 3/2$, $\Delta = 1$ é uma fase supercondutora. Para seguir a

análise dos graficos da Fig. 3.3, notamos que existe uma transição de fase quântica quando temos $\delta = 0$, ou seja quando $\frac{|\mu|}{2t} = 1$, ver Fig. 3.3.b). O ponto de transição de fase define a fronteira entre duas fases supercondutoras não convencionais (p-wave). As duas fases supercondutoras ocorrem quando $\frac{|\mu|}{2t} < 1$ ver Fig. 3.3.a) e $\frac{|\mu|}{2t} > 1$, ver Fig. 3.3.c). Na seção 3.7, mostraremos que as duas fases supercondutoras que aparecem para $\frac{|\mu|}{2t} < 1$ e $\frac{|\mu|}{2t} > 1$ são topologicamente distintas.

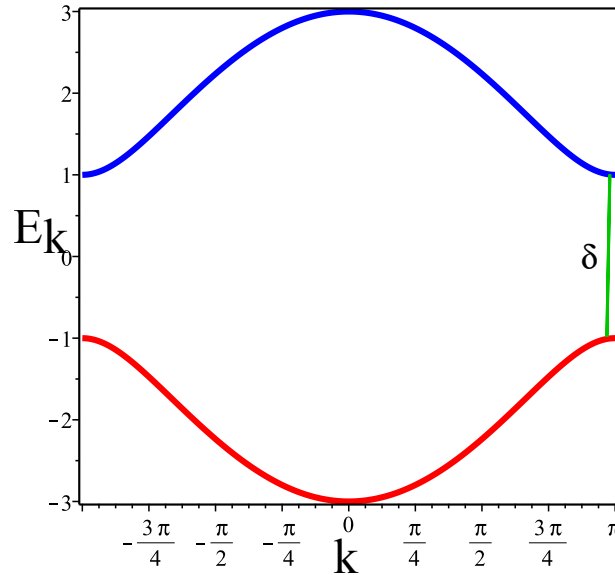


Figura 3.2: Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k . Pode-se ver o gap δ no espectro de energia. A presença do gap δ e do parâmetro supercondutor $\Delta \neq 0$ nos indica um estado fundamental supercondutor ($\frac{\mu}{2t} = 1$ e $\Delta = 1$)

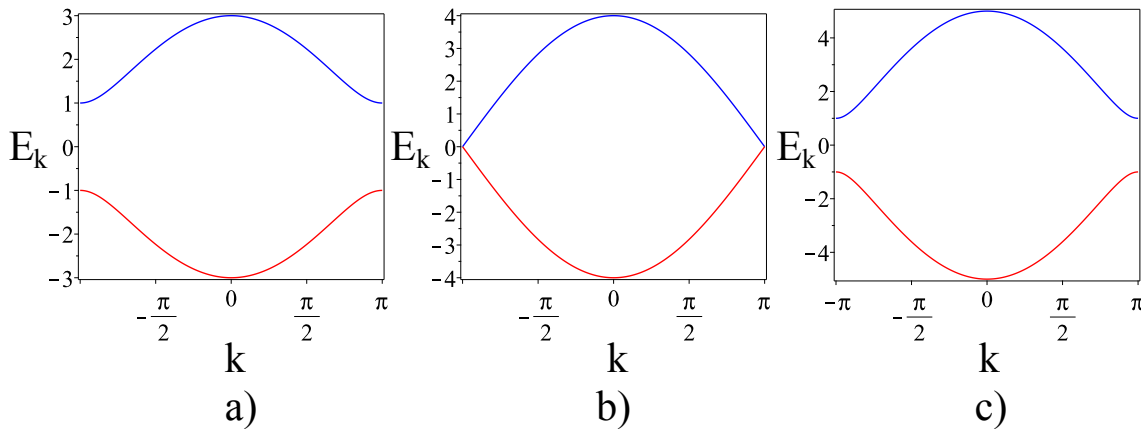


Figura 3.3: Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k para $\Delta = 1$. a) Fase Topológica não trivial, onde fixamos os valores de $\frac{\mu}{2t} = 1/2$. b) Transição de fase topológica, onde fixamos os valores de $\frac{\mu}{2t} = 1$. c) Fase topológica não trivial, onde fixamos os valores de $\frac{\mu}{2t} = 3/2$.

A Fig. 3.4 mostra uma transição de fase Supercondutor-Metal, no limite $\Delta = 0$ e $\frac{\mu}{2t} = 1/2$. Podemos ver que eliminando o parâmetro Δ o espectro de energia não tem mais o gap δ . A Fig. 3.4, mostra que os elétrons podem ser excitados com valores arbitrários de energia da banda de valência (E_-) para a banda de condução (E_+) e, portanto, nessas condições, a cadeia de

Kitaev se comporta como um metal. Na Fig. 3.5, mostramos o caso para $|\mu| < |2t|$ ($\mu/2t = 0.9$, e $\Delta = 1$). Aproximando do valor limite $\frac{|\mu|}{|2t|} = 1$, nota-se que o gap de energia tende para zero em $k = \pi$, ver Fig. 3.5. Portanto, o Hamiltoniano do modelo de Kitaev nesse limite tem uma transição de fase com $\Delta \neq 0$.

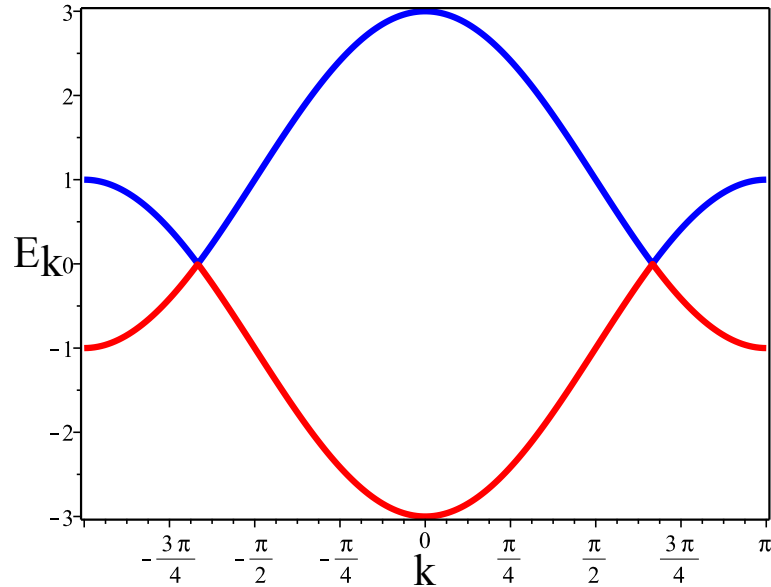


Figura 3.4: Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k para $\Delta = 0$ e $\frac{\mu}{2t} = 1/2$.

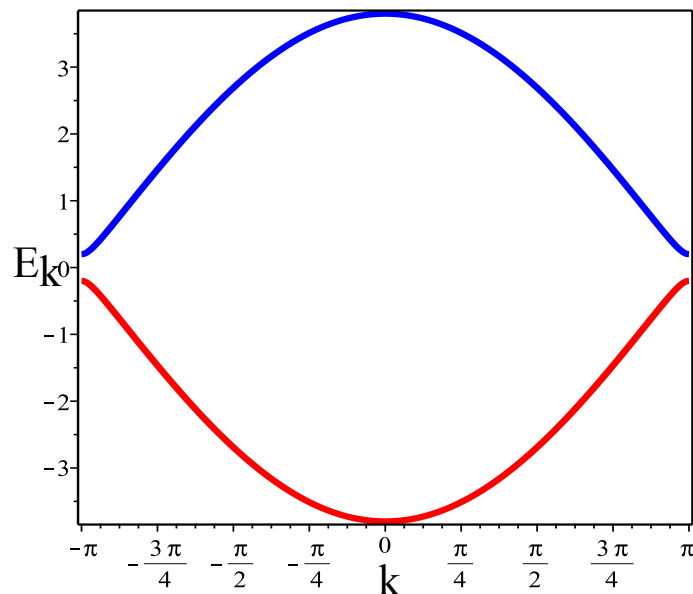


Figura 3.5: Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k para $\Delta = 0$ e $\frac{\mu}{2t} = 0.9$.

Finalmente, analisamos os dois últimos gráficos, Fig. 3.6. Na Fig. 3.6(a) mostramos o espectro de energia quando $|\mu| < |2t|$ ($\frac{\mu}{2t} = 1/2$, $\Delta = 1$), que mostra que existe um gap entre as bandas de energia. Na Fig. 3.6(b) mostramos o gráfico da energia como uma função de k quando $|\mu| > |2t|$, sendo $\frac{\mu}{2t} = 3/2$, $\Delta = 1$. Novamente, notamos que o espectro de energia também

apresenta um gap entre suas duas bandas de energia. Concluimos que nos casos limite $|\mu| < |2t|$ e $|\mu| > |2t|$, o Hamiltoniano do modelo Kitaev se comporta como um Supercondutor com gap.

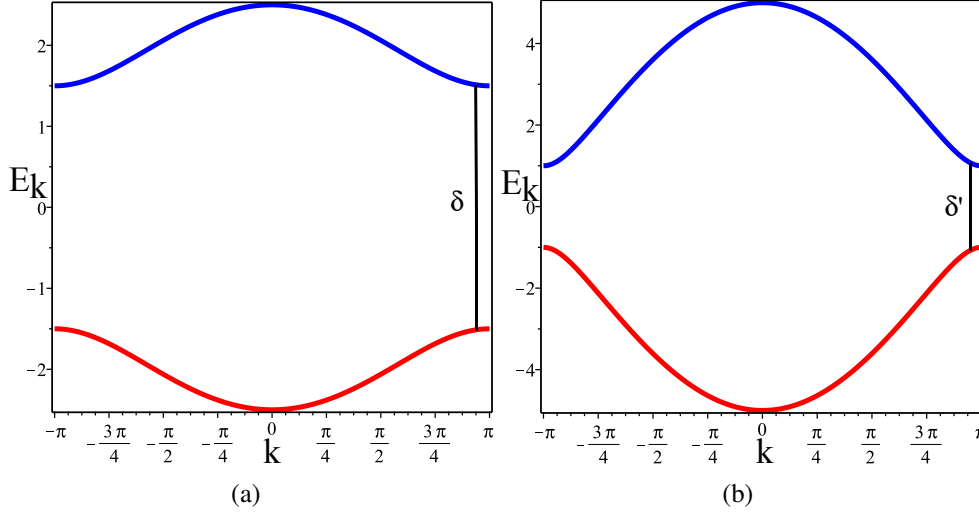


Figura 3.6: Espectro de energia do modelo de Kitaev como função do momento k para $\Delta = 1$. a) $\frac{\mu}{2t} = 1/2$. b) $\frac{\mu}{2t} = 3/2$. Aqui δ e δ' são gaps no espectro de energia das fases supercondutoras.

3.6 Simetrias Discretas do Modelo de Kitaev

Como no caso do modelo SSH, nesta seção, mostraremos as três simetrias discretas (Reversão Temporal, Partícula-Buraco e Chiral) para classificar o modelo segundo a tabela de supercondutores e calcular suas propriedades topológicas. Para as etapas a seguir, será útil reescrever o Hamiltoniano. Lembre-se que o Hamiltoniano pode ser escrito da seguinte maneira

$$H_k = \begin{pmatrix} \mu + 2t \cos(ka) & 2i\Delta \sin(ka) \\ -2i\Delta \sin(ka) & -\mu - 2t \cos(ka) \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

A partir da representação usual das matrizes de Pauli, podemos usá-los para reescrever a Eq. 3.15 como:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Logo:

$$H_k = \begin{pmatrix} -\mu & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -2t \cos(ka) & 0 \\ 0 & 2t \cos(ka) \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

$$+ \begin{pmatrix} 0 & -2i\Delta \sin(ka) \\ 2i\Delta \sin(ka) & 0 \end{pmatrix}$$

$$H_k = -\mu \sigma_z - 2t \cos(ka) \sigma_x + 2\Delta \sin(ka) \sigma_y \quad (3.20)$$

A seguir, mostraremos os operadores de simetria do modelo Kitaev.

3.6.1 Simetria Quiral

No capítulo anterior, já havíamos encontrado o operador de simetria Quiral do modelo SSH, Eq. 2.32. O operador de simetria Quiral para o modelo de Kitaev é a matriz de Pauli $\sigma_x = \Pi$, visto que σ_x anticomuta com Eq.3.17, ou seja:

$$\{\sigma_x, H_k\} = 0, \quad (3.21)$$

onde usamos $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$. Portanto temos que $\sigma_x^2 = 1$ e $\Pi^2 = 1$.

3.6.2 Simetria de Reversão Temporal

Sabendo que o operador de reversão temporal para um sistema *spinless* é o operador complexo conjugado ($\Theta = \mathbb{I}K$), podemos mostrar que o modelo de Kitaev tem simetria de reversão temporal se a condição seguinte é satisfeita:

$$H(k) = H^*(-k) \quad (3.22)$$

O lado direito da Eq. 3.22 fornece:

$$H^*(-k) = \begin{pmatrix} \mu + 2t \cos(-ka) & -2i\Delta \sin(-ka) \\ 2i\Delta \sin(-ka) & -\mu - 2t \cos(-ka) \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

onde, usando as seguintes propriedades:

$$\cos(x) = \cos(-x) \quad (3.24)$$

$$-\sin(x) = \sin(-x), \quad (3.25)$$

temos que cumpre-se $H^*(-k) = H(k)$. O operador Θ tem a seguinte propriedade $\Theta^2 = 1$ como visto no modelo SSH.

3.6.3 Simetria de Partícula-Buraco

O operador de simetria Partícula-Buraco é dado por:

$$\Xi = \sigma_x K, \quad (3.26)$$

De fato, aplicando Ξ na base ϕ_k chegamos a:

$$\Xi \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{-k}^\dagger \\ c_k \end{pmatrix}, \quad (3.27)$$

ou seja $c_{-k} \longrightarrow c_{-k}^\dagger$ e $c_k^\dagger \longrightarrow c_{-k}$.

Este operador de simetria tem a seguinte propriedade:

$$\Xi^2 = 1 \quad (3.28)$$

3.7 Transição de Fase Topológica e Diagramas de Fase

Como mostrado na seção anterior, com base nas três simetrias $\Pi^2 = \sigma_x^2 = 1$, $\Theta^2 = 1$, $\Xi^2 = 1$ o Hamiltoniano pertence à classe BDI da tabela de isolantes topológicos, ver figura. Na classe BDI o invariante topológico é dada pelo winding Number para sistemas com simetria Quiral. Sabemos que o winding number é dado por:

$$\omega = \frac{1}{4\pi i} \int_0^{2\pi} Tr(\Pi \cdot H_k^{-1} \frac{\partial H_k}{\partial k}) dk \quad (3.29)$$

onde:

$$H_k^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{\mu+2t \cos(k)}{\mu^2+4\mu t \cos(k)+4t^2 \cos^2(k)+4\Delta^2 \sin^2(k)} & \frac{-2i\Delta \sin(k)}{\mu^2+4\mu t \cos(k)+4t^2 \cos^2(k)+4\Delta^2 \sin^2(k)} \\ \frac{-2i\Delta \sin(k)}{\mu^2+4\mu t \cos(k)+4t^2 \cos^2(k)+4\Delta^2 \sin^2(k)} & \frac{\mu+2t \cos(k)}{\mu^2+4\mu t \cos(k)+4t^2 \cos^2(k)+4\Delta^2 \sin^2(k)} \end{pmatrix}; \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial H_k}{\partial k} = \begin{pmatrix} 2t \sin(k) & -2i\Delta \cos(k) \\ 2i\Delta \cos(k) & -2t \sin(k) \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

e $\Pi = \sigma_x$.

Resolvendo a integral da Eq. 3.29 numericamente por medio do MAPLE 2017, obtemos o seguinte resultado:

$$\omega = \begin{cases} 1, & \text{se } |\mu| < |2t|, t > 0, \text{ Supercondutora topológica.} \\ 0, & \text{se } |\mu| \geq |2t|, \text{ Supercondutora trivial.} \\ -1, & \text{se } |\mu| < |2t|, t < 0, \text{ Supercondutora topológica.} \end{cases} \quad (3.32)$$

Podemos obter o diagrama de fase com base nos resultados da Eq. 3.32. O diagrama de

fases pode ser visto na Fig. 3.29. As regiões vermelhas e azuis da Fig. 3.7 são topologicamente não triviais. As regiões brancas são triviais, apesar de identificar as diferenças topológicas nos estados eletrônicos de Bloch da cadeia de Kitaev, ainda não sabemos qual a principal diferença física entre a fase supercondutora topológica não trivial e topologicamente trivial. Na próxima seção abordaremos essa questão.

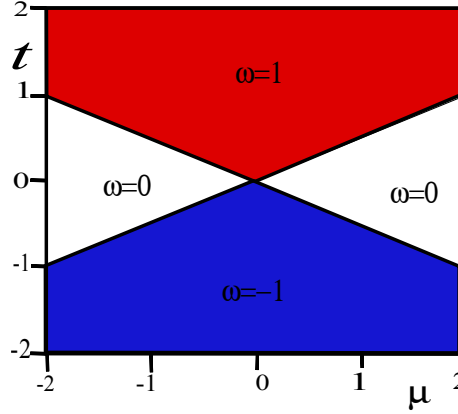


Figura 3.7: Diagrama de fases do modelo de Kitaev, onde o eixo x é o potencial químico μ e o eixo y é o hopping t . A fase topologicamente não trivial ($\omega = 1$ e $\omega = -1$) ocorre quando $|\mu| < |2t|$, ver as regiões azul e vermelha do diagrama de fases. A fase topológica trivial ($\omega = 0$) ocorre na região $|\mu| > |2t|$ do diagrama de fases, ver região branca. A linha preta do diagrama representa os pontos de transição de fase onde o gap δ se anula.

3.8 Espectro de Energia no Espaço Real e os Estados de Borda

3.8.1 Estados de Borda na Cadeia Aberta de Kitaev

Em uma cadeia aberta, considerando $N = 4$, o Hamiltoniano do modelo de Kitaev pode ser escrito como:

$$H_{\text{Kitaev}} = \sum_i \phi^\dagger H \phi \quad (3.33)$$

$$H = t \sum_{i=1}^{N-1} (c_i^\dagger c_{i+1} - c_{i+1} c_i^\dagger + c_{i+1}^\dagger c_i - c_i c_{i+1}^\dagger) + \mu \sum_{i=1}^N (c_i^\dagger c_i - c_i c_i^\dagger) + \Delta \sum_{i=1}^{N-1} (c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger - c_{i+1}^\dagger c_i^\dagger + c_{i+1} c_i - c_i c_{i+1}) \quad (3.34)$$

Consideramos o parâmetro supercondutor Δ como real, e definindo a base ϕ^\dagger como:

$$\phi^\dagger = \left(c_1^\dagger \quad c_2^\dagger \quad c_3^\dagger \quad c_4^\dagger \quad c_1 \quad c_2 \quad c_3 \quad c_4 \right) \quad (3.35)$$

H sera dado por:

$$H = \begin{pmatrix} \mu & t & 0 & 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 \\ t & \mu & t & 0 & -\Delta & 0 & \Delta & 0 \\ 0 & t & \mu & t & 0 & -\Delta & 0 & \Delta \\ 0 & 0 & t & \mu & 0 & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta & 0 & 0 & -\mu & -t & 0 & 0 \\ \Delta & 0 & -\Delta & 0 & -t & -\mu & -t & 0 \\ 0 & \Delta & 0 & -\Delta & 0 & -t & -\mu & -t \\ 0 & 0 & \Delta & 0 & 0 & 0 & -t & -\mu \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

Podemos ver que a matriz Eq. 3.36 pode ser dividida em quatro subespaços, dois para Δ e dois para μ e t . Portanto, podemos reescrever o Hamiltoniano de Kitaev como:

$$H_{kitaev} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} -\mu & -t & 0 & 0 \\ -t & -\mu & -t & 0 \\ 0 & -t & -\mu & -t \\ 0 & 0 & -t & -\mu \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

$$+ \Delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H_{kitaev} = -\sigma_z \otimes (-\mu \mathbb{I} - t T_{cos}) + i\Delta \sigma_y \otimes T_{sen}, \quad (3.38)$$

Onde a última expressão é generalizada para um número N de sítios, e onde T_{cos} e T_{sen} representam as seguintes matrizes simétrica e antissimétrica abaixo:

$$T_{cos} = \sum_{i,j=1}^N (\delta_{i,j+1} + \delta_{j+1,i}) \quad (3.39)$$

$$T_{sen} = \sum_{i,j=1}^N (\delta_{i,j+1} - \delta_{j+1,i}) \quad (3.40)$$

Na Fig. 3.8.a) mostramos as auto-energias como uma função de $\frac{\mu}{t}$ do Hamiltoniano do modelo de Kitaev (Eq. 3.1), onde as linhas azuis são as energias do Bulk, enquanto as linhas vermelhas e verde vermelha representam as autoenergias com valor zero. Essas linhas estão colapsadas no intervalo de $[-1, 1]$. Nessa região, há uma fase topológica Supercondutora pois $|\mu| < |2t|$. Observamos que nas demais regiões fora do intervalo $[-1, 1]$, a fase é trivial, pois $|\mu| > |2t|$. Fora deste intervalo, as linha vermelha e verde se tornam as energias do Bulk. A Fig. 3.8b) mostra o módulo da probabilidade ao quadrado dos estados de energia zero como uma função da posição dos sítios da cadeia. Note que os estados de energia zero (linha verde e

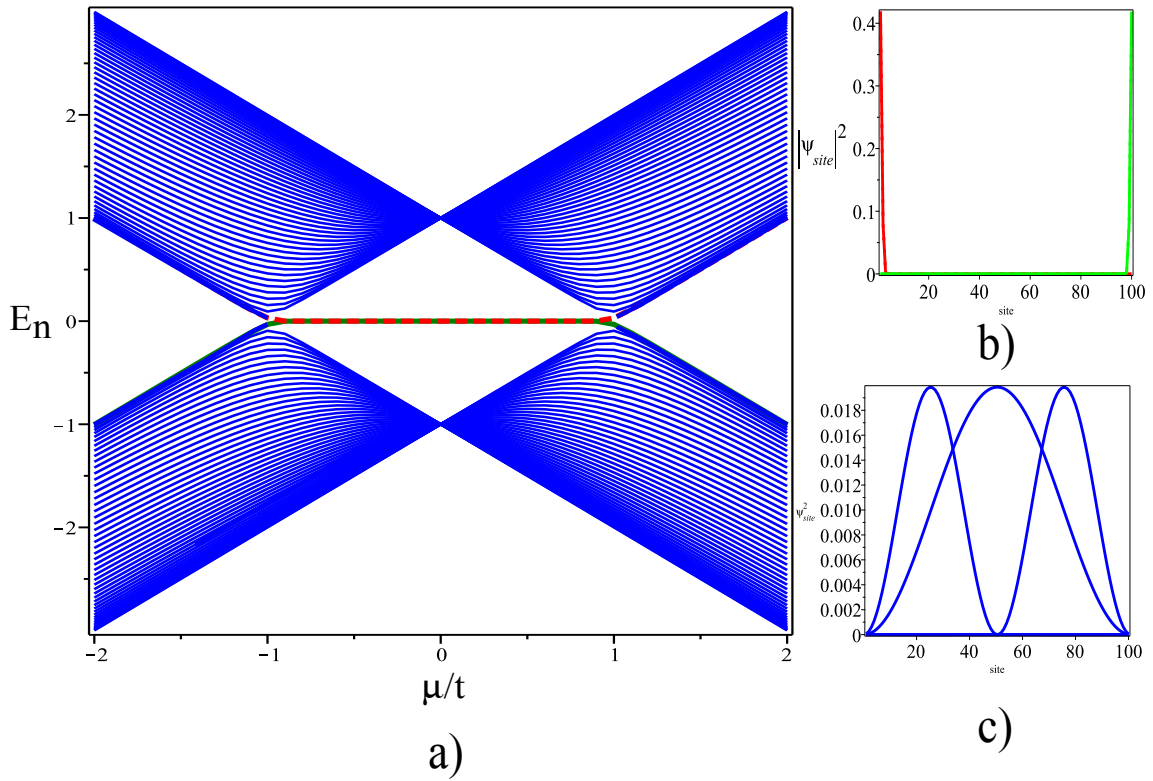


Figura 3.8: a) Espectro de energia como função da razão $\mu/2t$ (com $\Delta = 1$) para uma cadeia finita com 100 sítios. As linhas azuis são os estados de bulk, e as linhas tracejadas vermelhas e verdes são os estados com energia zero (localizados nas bordas da cadeia, ver figura b)). Os estados de energia zero surgem na fase supercondutora topológica não trivial para $|\mu/t| < 1$. b) Densidade de probabilidade dos estados de energia zero (representadas pelas linhas verde e vermelha na parte a)) como função dos sítios da cadeia de Kitaev. c) Densidade de probabilidade dos estados de bulk (representados por linhas azuis da parte a)) como função dos sítios da cadeia de Kitaev.

vermelha) têm probabilidade máxima nas extremidades (sítios 1 a 100) da cadeia de Kitaev. De fato a probabilidade de encontrar esse modo no Bulk é zero. (sítios diferentes de 1 e 100)

A Fig. 3.8c) mostra o módulo da probabilidade ao quadrado dos modos fermiônicos com energia diferente de zero (linhas azuis na Fig. 3.8.a)). Nesse caso, o modo fermiônico com energia diferente de zero pode ser encontrado em toda a cadeia, Bulk. Os estados com energia zero que são localizados nas extremidades da cadeia de Kitaev são a principal característica da fase supercondutora topológica ($|\mu| < |2t|$). Esses estados são topologicamente protegidos pela topologia não trivial do Bulk, e não podem ser destruídos, enquanto a cadeia de Kitaev estiver na fase topologicamente não trivial. O que são esses estados com energia zero localizados nas extremidades da cadeia? Responderemos essa questão na próxima seção.

3.8.2 Natureza dos Estados de Borda no Modelo Kitaev

Considerando a Eq. 3.1, ou seja,

$$H = t \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) + \Delta \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger - c_{i+1}^\dagger c_i^\dagger + h.c.) - \mu \sum_i c_i^\dagger c_i \quad (3.41)$$

e a seguinte transformação entre férmions de Dirac e férmions de Majorana,

$$c_i = \frac{\gamma_{1,j} + i\gamma_{2,j}}{2} \quad (3.42)$$

Com:

$$\gamma_{\alpha,j}^\dagger = \gamma_{\alpha,j}, \quad (3.43)$$

podemos reescrever a cadeia de Kitaev em termos dos operadores de Majorana da seguinte forma.

$$H = \frac{t+\Delta}{4} \sum_j (\{\gamma_{1,j}, \gamma_{1,j+1}\} + i[\gamma_{1,j+1}, \gamma_{2,j}]) + \frac{t-\Delta}{4} \sum_j (\{\gamma_{2,j}, \gamma_{2,j+1}\} + i[\gamma_{1,j}, \gamma_{2,j+1}]) - \frac{\mu}{4} \sum_j (\gamma_{1,j}^2 + i\gamma_{1,j}\gamma_{2,j} - i\gamma_{2,j}\gamma_{1,j} + \gamma_{2,j}^2), \quad (3.44)$$

onde os termos entre $\{\}$ e $[\]$ são o anti-comutador e o comutador, respectivamente.

Para reduzir a equação anterior, temos que usar:

$$\{\gamma_{\alpha,\beta}, \gamma_{\alpha',\beta'}\} = \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{\beta,\beta'} \quad (3.45)$$

Podemos chegar à Eq. 3.45 por meio da Eq. 3.42. Logo, usando a Eq. 3.45 na Eq. 3.44 chegamos a:

$$H = -\frac{1}{2}\mu \sum_{j=1}^N (1 + i\gamma_{1,j}\gamma_{2,j}) - \frac{t+\Delta}{4} \sum_{j=1}^{N-1} 2i\gamma_{2,j}\gamma_{1,j+1} - \frac{t-\Delta}{4} \sum_{j=1}^{N-1} 2i\gamma_{2,j+1}\gamma_{1,j} \quad (3.46)$$

3.8.3 Fixando os Parâmetros na Fase Topológica

Na fase topológica $|\mu| < |2t|$ e $\Delta \neq 0$. Em particular para $\Delta = t$ e $\mu = 0$, temos que $\omega = 1$ e portanto estamos na fase topológica supercondutora com estados de energia zero localizados nas bordas da cadeia. Para esses parâmetros, o Hamiltoniano Eq. 3.46 se torna :

$$H = -\Delta \sum_{j=1}^{N-1} i\gamma_{2,j}\gamma_{1,j+1} \quad (3.47)$$

ou

$$H = -i\Delta(\gamma_{2,1}\gamma_{1,2} + \gamma_{2,2}\gamma_{1,3} + \gamma_{2,3}\gamma_{1,4} + \dots + \gamma_{2,N-1}\gamma_{1,N}). \quad (3.48)$$

A equação anterior (Eq. 3.48) nos indica que existem dois Majoranas isolados em cada borda da cadeia, porque os fermions $\gamma_{1,1}$ e $\gamma_{2,N}$ não aparecem e não se ligam com seus primeiros vizinhos, ver Fig. 3.9 a). Isso significa que esses Majoranas da borda da cadeia aberta estão ligados de maneira não local $\gamma_{1,1}$ e $\gamma_{2,N}$, já que não é possível obter frações de elétrons isolados na natureza (Ref. (7)). Por outro lado a Fig. 3.9.b) mostra a situação quando $|\mu| > |2t|$, nesse

caso, a fase é trivial e não apresenta Majoranas isolados nas bordas da cadeia.

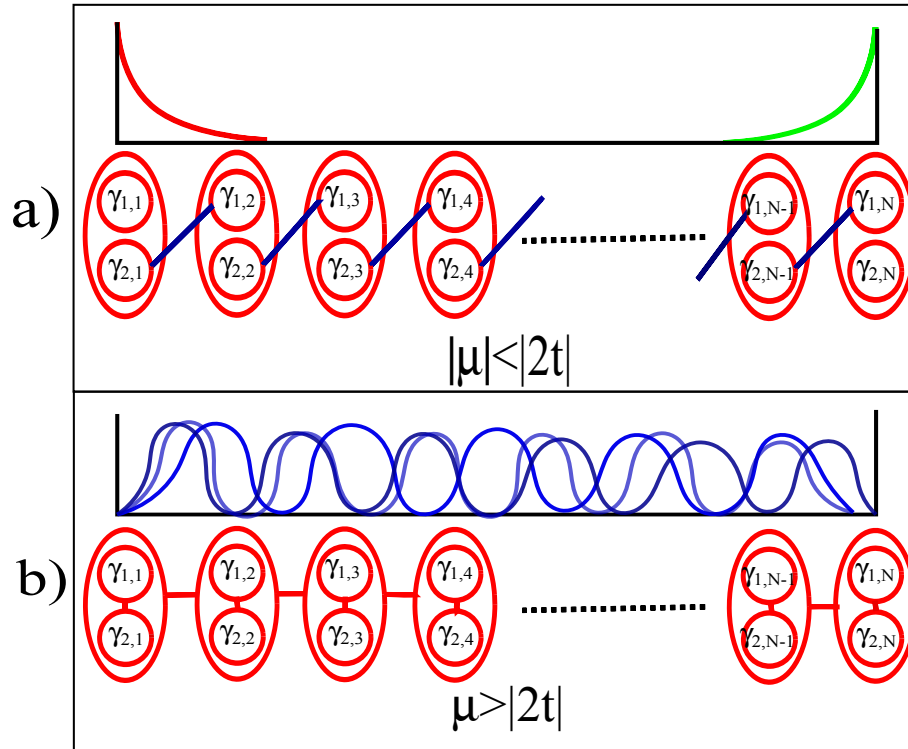


Figura 3.9: Estados fundamentais da cadeia de Kitaev e o surgimento do estado ligado de Majorana com energia zero. a) Para $|\mu| < |t|$, notamos que sobram dois majoranas $\gamma_{1,1}$ e $\gamma_{2,N}$ desacoplados do bulk da cadeia. Esses Majoranas possuem energia zero e estão localizados na borda da cadeia. Os operadores de Majorana $\gamma_{1,1}$ e $\gamma_{2,N}$ se combinam para formar um modo fermiônico não-local $d = (\gamma_{1,1} + i\gamma_{2,N})/2$. b) Para $|\mu| > |t|$ todos os Majoranas estão acoplados ao bulk da cadeia.

4

Estados Fundamentais de uma Cadeia Unidimensional Dimerizada Supercondutora

4.1 Introdução

Na física da matéria condensada, os férmions não-locais de Majorana são excitações de quasi partículas que surgem quando um único modo eletrônico fraciona-se em duas metades. A cadeia de Kitaev pode ser usada para estudar as propriedades de estados ligados não-locais de Majorana com energia zero que residem nas bordas da cadeia.

O modelo de Kitaev pertence à classe topológica BDI. Nesta classe, a fase topológica não trivial depende da simetria de reversão temporal, simetria partícula-buraco e simetria quiral. A simetria de partícula-buraco garante que os estados ligados não-locais de Majorana com energia zero se comportem como uma superposição de partícula e buraco, portanto não têm carga bem definida. No entanto, além da simetria de partícula-buraco, o número de estados de energia zero nas extremidades da cadeia é crucial para obter um estado não-local de Majorana. Qualquer cadeia com um número par de estados de borda com energia zero não pode exibir estados não-locais de Majorana. Para obter um estado não-local de Majorana com energia-zero, é necessário um número ímpar de estados de energia zero em cada extremidade da cadeia, Ref. (7).

Nos últimos anos, vários modelos foram propostos para estudar estados não-locais de Majorana com energia zero. O modelo dimerizado de Kitaev exibe um diagrama de fases composto por estados fundamentais do tipo SSH e Kitaev. Existem dois estados de borda com energia zero no estado fundamental do tipo SSH, enquanto apenas existe um estado de energia zero na borda da cadeia no estado fundamental do tipo Kitaev.

O estado fundamental do tipo SSH exibe um número par de estados de energia zero, enquanto os estados fundamentais do tipo Kitaev apresentam um número ímpar. Nos estados fundamentais do tipo Kitaev, o modelo pode suportar estados não-locais de Majorana nas extremidades da cadeia.

Portanto, a cadeia dimerizada de Kitaev permite estudar transições de fase topológicas de estados fundamentais com um número par de estados ligados nas bordas, para um estado fundamental com um número ímpar de estados ligados com energia zero nestas bordas da cadeia.

Neste capítulo, estudamos o diagrama de fases do modelo de Kitaev com hoppings alternados e correlações supercondutoras. Os resultados não dependem de vínculos entre os

termos de hopping e os parâmetros supercondutores, conforme o empregado na Ref. (8). Obtemos a transição de fase correta entre o modelo híbrido e o modelo SSH puro.

4.2 Modelo Anisotrópico

O modelo SSH mostrado na Fig. 4.1, sujeito a correlações supercondutoras anisotrópicas, pode ser definido como:

$$H = \sum_i (t_1 c_{A,i}^\dagger c_{B,i} + t_2 c_{B,i}^\dagger c_{A,i+1} + h.c.) - \sum_i (\Delta_1 c_{B,i}^\dagger c_{A,i}^\dagger + \Delta_2 c_{A,i+1}^\dagger c_{B,i}^\dagger + h.c.) - \mu \sum_{i,\alpha} c_{\alpha,i}^\dagger c_{\alpha,i}, \quad (4.1)$$

onde μ é o potencial químico, t_1 e t_2 são termos de hopping (e reais), Δ_1 e Δ_2 são os parâmetros de ordem das correlações anisotrópicas dos supercondutores(e também são reais), ver a Fig. 4.1. Aqui, $c_{\alpha,i}^\dagger$ é um operador que cria um férmion no sitio i na sub-rede α com $\alpha = A, B$. O modelo da Eq. 4.1 pertence à classe topológica BDI na classificação Altland-Zirnbauer de supercondutores / isolantes topológicos (12; 13). O modelo possui simetria de reversão temporal, simetria de partícula-buraco e simetria quiral ou simetria de sub-rede (11).

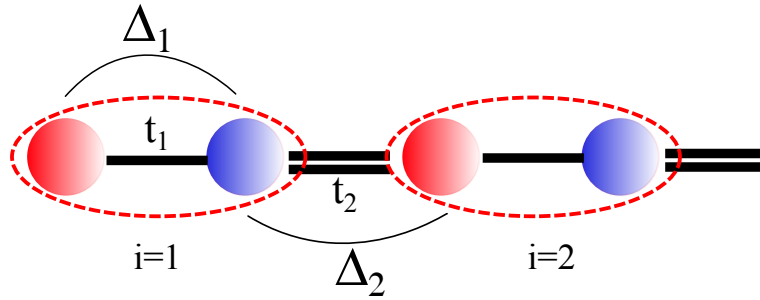


Figura 4.1: (Cor em linha)O modelo híbrido com primeiros vizinhos t_1 e t_2 são hopping, e Δ_1 e Δ_2 são parâmetros supercondutores.Cada célula unitária i contém uma, as esferas vermelha e azul, respectivamente. Os termos de hopping e os parâmetros supercondutores funcionam para diferentes sub-redes, t_1 e Δ_1 dentro da célula unitária, enquanto t_2 e Δ_2 fora da célula unitária.

4.3 Hamiltoniano Híbrido no Espaço dos Momentos

Tomando a representação de Fourier dos operadores de campo no espaço dos momentos a Hamiltoniana (Eq. 4.1) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$H_{Hi} = \sum_k ((t_1 + t_2 e^{ika} c_{B,k}^\dagger c_{A,k}) + (t_1 + t_2 e^{-ika}) c_{A,k}^\dagger c_{B,k} - \mu (c_{A,k}^\dagger c_{A,k} + c_{B,k}^\dagger c_{B,k})) - \Delta_1 (c_{B,k}^\dagger c_{A,-k}^\dagger + c_{A,-k} c_{B,k}) - \Delta_2 (e^{ika} c_{A,-k}^\dagger c_{B,k}^\dagger + e^{-ika} c_{B,k} c_{A,-k}). \quad (4.2)$$

Em termos das matrizes de Dirac podemos reescrever a Eq. 4.2 como

$$H_{Hi} = \sum_k \psi_k^\dagger \tilde{H}_k \psi_k, \quad (4.3)$$

onde

$$\tilde{H}_k = \begin{pmatrix} -\mu & t_1 + t_2 e^{-ika} & 0 & -\Delta_1 + \Delta_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & -\mu & \Delta_1 - \Delta_2 e^{ika} & 0 \\ 0 & \Delta_1 - \Delta_2 e^{-ika} & \mu & -t_1 - t_2 e^{-ika} \\ -\Delta_1 + \Delta_2 e^{ika} & 0 & -t_1 - t_2 e^{ika} & \mu \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

sendo a base $\psi^\dagger = (c_{A,k}^\dagger, c_{B,k}^\dagger, c_{A,-k}, c_{B,-k})$.

As autoenergias de H_k são:

$$E = \pm \sqrt{|y|^2 + |x|^2 + \mu^2 + \sqrt{2|x|^2|y|^2 + 4\mu^2|y|^2 + (x^*)^2 y^2 + x^2 (y^*)^2}} \quad (4.5)$$

$$E' = \pm \sqrt{|y|^2 + |x|^2 + \mu^2 - \sqrt{2|x|^2|y|^2 + 4\mu^2|y|^2 + (x^*)^2 y^2 + x^2 (y^*)^2}}, \quad (4.6)$$

onde: $x = -\Delta_1 + \Delta_2 e^{-ika}$ e $y = t_1 + t_2 e^{-ika}$.

Podemos encontrar onde o gap fecha quando $k = 0$ e $k = \frac{\pi}{a}$:

$$\mu^2 = (t_1 + t_2)^2 - (\Delta_2 - \Delta_1)^2 \quad (4.7)$$

$$\mu^2 = (t_1 - t_2)^2 - (\Delta_1 + \Delta_2)^2 \quad (4.8)$$

4.4 Estados do Modelo Híbrido

Nos gráficos a seguir (Fig. 4.2, Fig. 4.3 e Fig. 4.4) mostramos as autoenergias (Eq. 4.6 e Eq. 4.5) como função do momento k , onde o potencial químico, hopping e o parâmetro superconductor são iguais a $\mu/t_1 = 0.9$, $\Delta_1/t_1 = 0$, $t_2/t_1 = 0.2$, e Δ_2/t_1 varia no intervalo de $[-2, 2]$. A seguir vamos fazer uma análise de cada gráfico. Note que destacamos com a cor preto e amarelo as autoenergias dadas pela Eq. 4.6 e em vermelho e azul as autoenergias dadas pela Eq. 4.5.

Nas Fig. 4.2 vemos a variação de Δ_2/t_1 para os valores de -2 , -1.5 e -0.83 . Na Fig. 4.2a) e b) vemos a existência de um gap no espectro de energia em torno do nível de Fermi ($E_F = 0$), portanto para $\Delta_2/t_1 = -2$ e $\Delta_2/t_1 = -1.5$ o estado fundamental é um superconductor do tipo não-convencional, ou p-wave (ver (1; 2)). Podemos ver pouca variação das autoenergias dadas pelas curvas azul e vermelha.

Na Fig. 4.2 c) vemos que o espectro de energia apresenta um gap que tende a zero à medida que Δ_2/t_1 aumenta. Note que o gap vai a zero quando $\Delta_2/t_1 = -0.83$ em $k = 0$, ver

Fig. 4.2.c). Nesse ponto existe uma transição de fase topológica entre duas fases supercondutoras, pois para $\Delta_2/t_1 > -0.83$ o gap volta aumentar. Ver Fig. 4.3

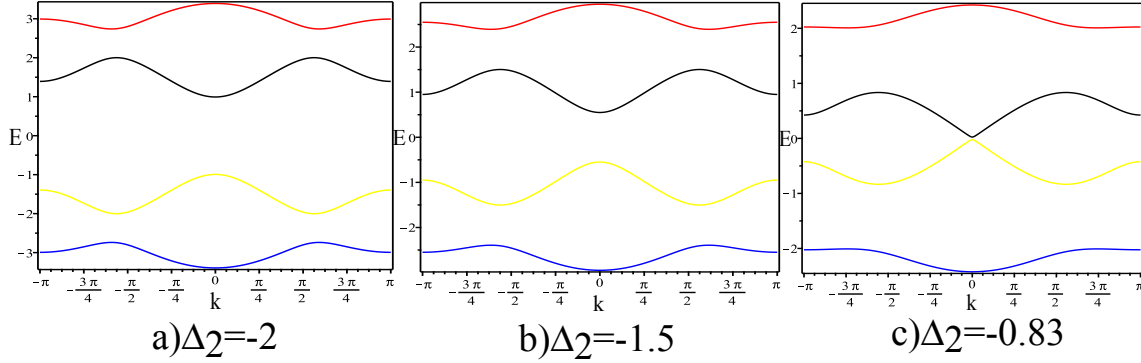


Figura 4.2: Espectro de energia como função do momento k para o modelo híbrido com $\mu/t_1 = 0.9$, $t_2/t_1 = 0.2$, $\Delta_1/t_1 = 0$. a) $\Delta_2/t_1 = -2$. b) $\Delta_2/t_1 = -1.5$. c) $\Delta_2/t_1 = -0.83$

Na figura Fig. 4.3 a) novamente podemos ver o gap no espectro de energia para $\Delta_2/t_1 = -0.5$. Seguindo aumentado o valor da razão Δ_2/t_1 , podemos ver que o gap se anula para $\Delta_2/t_1 = 0$ em $k \cong 0.69\pi$, ver Fig. 4.3 b). A diferença para o caso anterior, onde o gap fechava-se em $k = 0$, é que neste caso o gap é zero em $k \cong 0.69\pi$, portanto a transição de fase ocorre em $k = 0.69\pi$. Finalmente para valores $\Delta_2/t_1 > 0$ o gap se abre como podemos ver na Fig. 4.3 c)

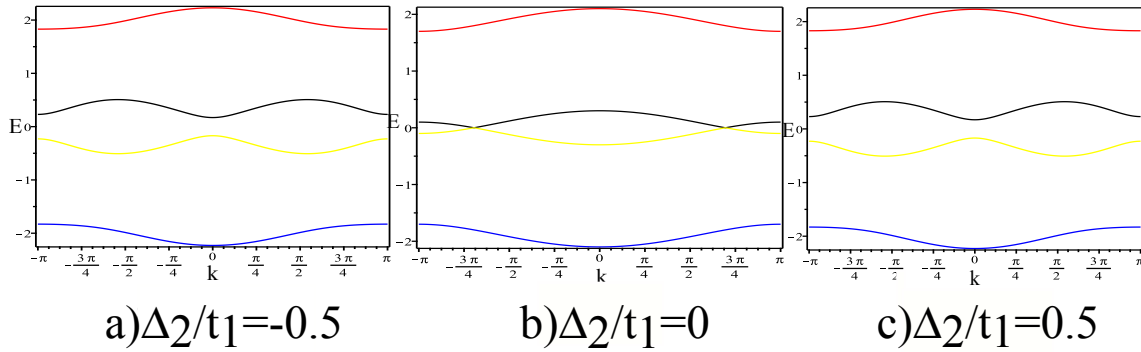


Figura 4.3: Espectro de energia como função do momento k para o modelo híbrido com $\mu/t_1 = 0.9$, $t_2/t_1 = 0.2$, $\Delta_1/t_1 = 0$. a) $\Delta_2/t_1 = -0.5$. b) $\Delta_2/t_1 = 0$. c) $\Delta_2/t_1 = 0.5$.

Finalmente os gráficos na Fig. 4.4 mostram também duas fase supercondutoras (primeira fase para $\Delta_2/t_1 > 0.83$, ver Fig. 4.4 b) e c)) com gap e uma transição de fase topológica que ocorre quando o gap é igual a zero, ver Fig. 4.4 a).

4.5 Simetrias do Modelo Híbrido

4.5.1 Simetria Quiral

Para facilitar a identificação das simetrias discretas da tabela de isolantes topológicos, ver Fig. 2.5, escreveremos abaixo o Hamiltoniano do modelo híbrido Eq. 4.2 em função das matrizes de Pauli:

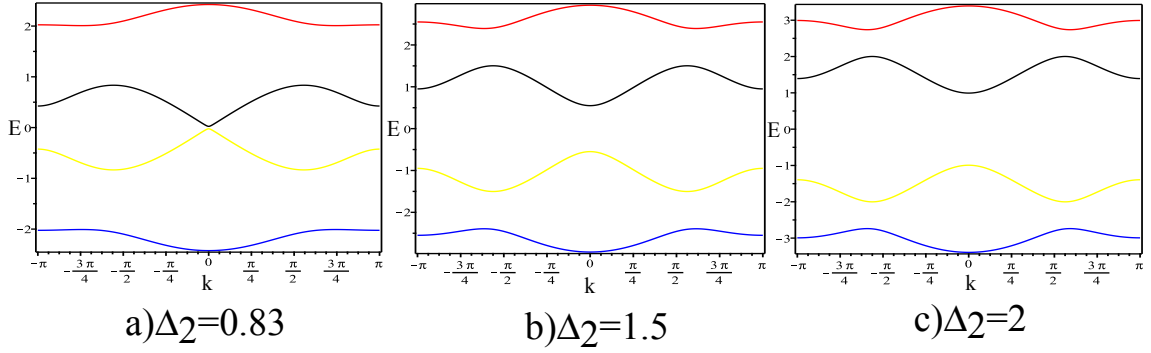


Figura 4.4: Espectro de energia como função do momento k para o modelo híbrido com $\mu/t_1 = 0.9$, $t_2/t_1 = 0.2$, $\Delta_1/t_1 = 0$. a) $\Delta_2/t_1 = 0.83$. b) $\Delta_2/t_1 = 1.5$. c) $\Delta_2/t_1 = 2$

$$\tilde{H}_k = -\mu \tau_z \otimes \sigma_0 + (t_1 + t_2 \cos ka) \tau_z \otimes \sigma_x + t_2 \sin ka \tau_z \otimes \sigma_y + (\Delta_1 - \Delta_2 \cos ka) \tau_y \otimes \sigma_y - i \Delta_2 \sin ka \tau_y \otimes \sigma_x \quad (4.9)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \tilde{H}_k &= -\mu \tau_z \otimes \sigma_0 + a \tau_z \otimes \sigma_x + b \tau_z \otimes \sigma_y \\ &\quad - c \tau_y \otimes \sigma_y - d \tau_y \otimes \sigma_x \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde: $a = t_1 + t_2 \cos(ka)$, $b = t_2 \sin(ka)$, $c = \Delta_1 + \Delta_2 \cos(ka)$, $d = \Delta_2 \sin(ka)$ e σ_0 é a matriz identidade.

Podemos notar que quando $\mu = 0$ o hamiltoniano \tilde{H}_k possui simetria Chiral ($\{\tilde{H}_k, \Pi\} = 0$) dada pelo operador Chiral:

$$\Pi = \tau_z \otimes \sigma_0. \quad (4.11)$$

4.5.2 Simetria de Reversão Temporal

Tomando o conjugado da equação Eq. 4.4 temos o seguinte resultado

$$\tilde{H}_k^* = \begin{pmatrix} -\mu & t_1 + t_2 e^{ika} & 0 & -\Delta_1 + \Delta_2 e^{ika} \\ t_1 + t_2 e^{-ika} & -\mu & \Delta_1 - \Delta_2 e^{-ika} & 0 \\ 0 & \Delta_1 - \Delta_2 e^{ika} & \mu & -t_1 - t_2 e^{ika} \\ -\Delta_1 + \Delta_2 e^{-ika} & 0 & -t_1 - t_2 e^{-ika} & \mu \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

onde podemos notar que quando substituímos k por $-k$ na Eq. 4.12 chegamos ao seguinte resultado:

$$\tilde{H}_k = \tilde{H}_{-k}^* \quad (4.13)$$

Portanto, o modelo Híbrido tem simetria de reversão temporal dada pelo operador complexo conjugado $\Theta = K$, cuja propriedade é $\Theta^2 = 1$.

4.5.3 Simetria Partícula Buraco

A simetria de partícula-buraco para $\mu \neq 0$ é dada pelo operador $\Xi = \tau_0 \otimes \sigma_x K$. Aplicando Ξ à base ψ do Hamiltoniano híbrido temos que esse operador troca partículas por buracos, ou seja: $c_{-k} \longrightarrow c_{-k}^\dagger$ e $c_k^\dagger \longrightarrow c_k$. Temos que lembrar que a simetria partícula buraco é uma característica do modelo supercondutor de Kitaev, porque lembremos que a matriz do hamiltoniano híbrido podemos dividir em quatro subespaços, dois para o parâmetro supercondutor Δ e dois para μ (potencial químico) e t (hopping) como pode-se ver na seguinte equação:

$$\tilde{H}_k = \begin{pmatrix} -\mu & t_1 + t_2 e^{-ika} & 0 & -\Delta_1 + \Delta_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & -\mu & \Delta_1 - \Delta_2 e^{ika} & 0 \\ 0 & \Delta_1 - \Delta_2 e^{-ika} & \mu & -t_1 - t_2 e^{-ika} \\ -\Delta_1 + \Delta_2 e^{ika} & 0 & -t_1 - t_2 e^{ika} & \mu \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

4.6 Transição de Fase Topológica e Diagramas de Fase

4.6.1 Limite SSH puro

Quando $\Delta_1 = \Delta_2 = \mu = 0$, o sistema se torna o modelo SSH que pertence à mesma classe topológica que o modelo Kitaev, como é bem conhecido (7). O modelo SSH não exhibe os estados não locais de Majorana com energia zero nas extremidades da cadeia (7).

O estado fundamental topológico não-trivial ($|t_2| > |t_1|$) do modelo SSH suporta um estado de borda de energia zero no primeiro e no último sítio da cadeia. Os estados de energia zero do modelo SSH são compostos por uma superposição de partículas que possuem uma carga bem definida. Portanto, um modo convencional de excitação fermiônica emerge nas bordas da cadeia (7). No modelo SSH, a simetria quiral resulta de uma equivalência entre as subredes A e B. Mostramos no capítulo do Modelo SSH que a simetria quiral protege a região topológica não-trivial e os estados de borda com energia zero.

4.6.2 Limite de Kitaev

Agora, quando $t_1 = t_2$ e $\Delta_1 = \Delta_2$, a Hamiltoniana dada pela Eq. 4.1, se torna o modelo de Kitaev, que possui a simetria de partícula-buraco, dada ($\Xi = \sigma_x K$), simetria de reversão temporal ($\Theta = K$) e também simetria quiral ($\Pi = \Xi \Theta$).

Embora o modelo de Kitaev e o modelo SSH pertençam à mesma classificação topológica (isto é, BDI), é importante notar que a origem da simetria partícula-buraco é fisicamente distinta para cada modelo (Ref. (7)).

Como apontado na Ref. (11), para o modelo SSH, a simetria de partícula-buraco foi induzida pelas simetrias de reversão temporal e quiral, enquanto para o modelo de Kitaev, a simetria de partículas-buraco é essencialmente uma característica da fase supercondutora.

Diferentemente do modelo SSH, mostramos no capítulo do modelo de Kitaev (ver Cap. 3) que os estados de borda com energia zero são uma combinação linear de partículas e buracos, sem carga bem definida e portanto define um modo fermiônico conhecido como estados ligados não-locais de Majorana.

4.6.3 Diagrama de Fases no Espaço dos Parâmetros, Limite quando $\mu = 0$.

Como o modelo na Eq. 4.1 foi classificado na classe topológica BDI, o invariante topológico Z que deve ser calculado para caracterizar as fases triviais e não triviais é o winding number (14; 7; 11).

$$\omega_i = \frac{1}{4\pi i} \int_0^{2\pi} \text{Tr}(\mathcal{C}_i H_k^{-1} \frac{\partial H_k}{\partial k}) dk, \quad (4.15)$$

onde $\mathcal{C}_{i=1,2}$ são os operadores de simetria e H_k é dado por Eq. 4.10. Os operadores $\mathcal{C}_{i=1,2}$ são duas matrizes que anti-comutam ($\{\mathcal{C}_i, H_k\} = 0$) com o Hamiltoniano e definem dois invariantes topológicos distintos $W_{i=1,2}$.

No caso de $\mu = 0$, o Hamiltoniano, Eq. 4.10, anti-comuta com duas matrizes, as quais são $\mathcal{C}_1 = \tau_z \otimes \sigma_0$ e $\mathcal{C}_2 = \tau_0 \otimes \sigma_x K$. Aqui, a matriz \mathcal{C}_1 é o operador quiral ou simetria de sub-rede e \mathcal{C}_2 é o operador de simetria de partícula-buraco. Além disso, como demonstrado por R. Wakatsuki *et al.* Ref (11), W_1 é igual ao número de estados de energia zero por extremidade da cadeia e $|W_2|$ é igual ao número dos estados ligados não-locais de Majorana. Quando $\Delta_1 = \Delta_2 = \mu = 0$, o operador quiral $\mathcal{C}_1 = \tau_z \otimes \sigma_0$ se torna σ_z . Essa redução, $\mathcal{C}_1 = \sigma_z$ é necessária para obter uma transição de fase quântica da cadeia híbrida para o limite SSH.

Calculamos W_1 para $\mu = 0$ e os resultados do diagrama de fases são mostrados na Fig. 4.5. Todos os parâmetros são expressos em unidades de t_1 no gráfico. Os resultados para W_2 podem ser vistos na Fig. 4.6. Como podemos ver, nas Fig 4.5 e Fig. 4.6, esses diagramas de fases são apresentados em função dos parâmetros $\frac{\Delta_1}{t_1}$ e $\frac{\Delta_2}{t_1}$ para valores fixos de $\frac{t_2}{t_1}$.

A Figura 4.5 (a) mostra o diagrama de fases do modelo SSH puro sem os termos de correlação supercondutores. Nesse caso, uma fase topológica não-trivial surge quando $|t_2| > |t_1|$ tal que $W_1 = 1$ (região vermelha) e uma fase topológica trivial surge quando $|t_1| > |t_2|$ ($W_1 = 0$) (ver região azul).

Em seguida, procedemos à nossa análise, introduzindo as correlações supercondutoras Δ_1 e Δ_2 no modelo SSH. A partir dos três estados fundamentais : $\frac{t_2}{t_1} < 1$ (trivial topológico), $\frac{t_1}{t_2} = 1$ (linha de transição de fase) e $\frac{t_2}{t_1} > 1$ (fase topológica não trivial) na ausência de correlações supercondutoras ($\Delta_1 = \Delta_2 = 0$), variamos as correlações supercondutoras de cada caso e os resultados são apresentados nas Figs. 4.5 (b), (c) e (d). A razão t_2/t_1 foi mantida fixa em cada painel.

A Fig. 4.5 (b) mostra o caso $\frac{t_2}{t_1} < 1$ e observamos que as correlações supercondutoras induzem três diferentes regiões topológicas: azul ($W = 0$), vermelha ($W = 1$) e uma região branca extra ($W = 2$). Além disso, a Fig. 4.5 (c) mostra os resultados ao longo da linha de transição,

$\frac{t_1}{t_2} = 1$, na presença dos parâmetros $\frac{\Delta_1}{t_1}, \frac{\Delta_2}{t_1} \neq 0$, e obtemos as mesmas três fases topológicas diferentes das obtidas anteriormente, indicadas pelo mesmo esquema de cores da Fig. 4.5 (b).

No entanto, observe que agora, existe um ponto preto localizado na origem do diagrama de fases; este ponto representa um ponto gapless (na linha de transição de fase) do modelo SSH, $\frac{\Delta_1}{t_1} = \frac{\Delta_2}{t_1} = 0$, que é consistente com o diagrama de fases na Fig. 4.5 (a) no ponto $t_1 = t_2 = 1$. Finalmente, o diagrama de fases mostrado na Fig. 4.5 (d) emerge de uma fase topológica do modelo SSH, quando $\frac{t_2}{t_1} = 1,6$.

Os resultados são análogos aos obtidos anteriormente, exceto que, diferentemente do resultado obtido por R. Wakatsuki *et al* (11), determinamos corretamente a transição de fase topológica em $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$, veja o ponto vermelho na origem do diagrama de fases. De fato, o modelo deve cair na fase topológica do modelo SSH, $W_1 = 1$, quando $\frac{t_2}{t_1} > 1$ e na ausência de correlações supercondutoras (veja o ponto vermelho na origem do diagrama na Fig. 4.5 (d)). A Fig. 4.6 (a) mostra o espectro de energia no espaço real para $N = 50$ em função de $\frac{t_2}{t_1}$ para valores fixos $\frac{\Delta_1}{t_1} = 0$ e $\frac{\Delta_2}{t_1} = 2$.

Os estados de energia zero localizados nas extremidades da cadeia são destacados por linhas sólidas verdes e azuis e correspondem ao quadrado e triângulo laranja, indicados pelos pontos $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = 2$ da fase diagrama na Fig. 4.6 (c) e (d).

Por outro lado, os estados de energia do bulk destacados por linhas sólidas pretas (correspondentes ao círculo amarelo no espectro de energia da Fig. 4.6 (a)) estão relacionadas ao ponto $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = 2$ dos diagramas de fases (b) e (c) da Fig. 4.6.

As soluções de estados de borda com energia zero são mostradas na Fig. 4.6 (a) e indicadas pelas linhas sólidas pontilhadas em vermelhas e verdes. O círculo indica o estado fundamental topológico não-trivial (índices topológicos $W_1 = 2$ e $W_2 = 0$) com quatro estados de energia zero nas extremidades da cadeia, ver a Fig. 4.6 (a). O quadrado e o triângulo laranja mostram a região topológica não-trivial (índices topológicos $W_1 = 1$ e $W_2 = -1$) com dois estados de energia zero nas extremidades da cadeia, Fig. 4.6.

Vemos que, no intervalo $0 < \frac{t_2}{t_1} < 1$ da Fig. 4.6 (a) $W_1 = 2$. Portanto, usando o teorema “bulk boundary correspondence” (9), pode-se ver que $W_1 = (4)/(2) = 2$ é o número de estados de energia zero por extremidade da cadeia. De fato, as regiões brancas da figura (b), (c) e (d) indicam dois estados de energia zero por extremidades da cadeia.

Além disso, para $1,0 \leq \frac{t_2}{t_1} \leq 1,8$, existem apenas dois estados de energia zero na Fig. 4.6 (a) (veja as duas linhas verdes em colapso nesse intervalo). Novamente, usando o teorema “bulk boundary correspondence”, concluímos que $W_1 = 1$ é o número de estados de energia zero por extremidade da cadeia (ou seja, $W_1 = (2)/(2) = 1$ estados / final).

Sabemos que, dada a simetria partícula-buraco, um estado não-local de Majorana com energia zero emerge nas extremidades da cadeia quando cada extremidade da cadeia possui apenas um estado de energia zero. Por exemplo, no intervalo $1,0 < \frac{t_2}{t_1} < 1,8$ e para $\frac{\Delta_1}{t_1} = 0$ e $\frac{\Delta_2}{t_1} = 2$ existe apenas um estado de Majorana não-local com energia zero por extremidade da cadeia; veja linhas verdes sólidas na Fig. 4.6 (a). De fato, o ponto $(\frac{\Delta_1}{t_1} = 0, \frac{\Delta_2}{t_1} = 2)$ da Fig. 4.6

(c) e (d) está localizado dentro a região verde com $W_2 = -1$, veja quadrado amarelo e triângulo na Fig. 4.6.

Na verdade, as regiões verde e vermelha da Fig. 4.6 suportam um estado de Majorana não-local com energia zero nas bordas, enquanto as regiões azuis não exibem um estado isolado de energia zero Majorana isolado. Os limites dos diagramas de fases Fig. 4.5 e Fig. 4.6 indicam as linhas de transições de fase entre fases topológicas com número diferente de estados de borda com energia zero, de modo que as regiões verde e vermelha exibem estados fundamentais com estados ligados de Majorana não-locais nas bordas da cadeia.

Para investigar a transição da fase topológica da fase híbrida para o estado fundamental do SSH puro, introduzimos as seguintes parametrizações; $t_1 = -t(1 + \eta_1)$, $t_2 = -t(1 - \eta_1)$, $\Delta_1 = \Delta(1 + \eta_2)$ e $\Delta_2 = \Delta(1 - \eta_2)$, onde $\eta_2 = \alpha\eta_1$ e α são parâmetros reais. η_1 foi definido em Ref. (11) como o parâmetro de dimerização. Chamamos atenção para o fato de que, na Ref (11), os autores estudaram apenas o caso $\alpha = 1$, ou seja, $\eta_2 = \eta_1$. Relatamos que a condição $\eta_1 = \eta_2$ cria uma restrição específica entre os termos de hopping e os parâmetros supercondutores. Substituindo a parametrização acima no Hamiltoniano 4.1, obtemos um novo diagrama de fases, ver Fig. 4.7. Além disso, a Fig. 4.7 fornece uma visualização clara da transição topológica da fase quântica do modelo híbrido supercondutor para o modelo SSH. A linha pontilhada em $\Delta = 0$ representa a fase isolante topológica do modelo SSH com $W^{SSH} = 1$, veja a Fig. 4.7 (a) e (b). Para comparar com os resultados anteriores, na Fig. 4.7 (a) com os resultados da Ref (11) fixamos $\eta_1 = \eta_2$. O diagrama de fases em que $\eta_1 \neq \eta_2$ pode ser visto na Fig. 4.7 (b). Nesse caso, fixamos $\alpha = 1, 5$, $\eta_2 = \alpha\eta_1$ e $0 \leq \eta_1 \leq 1$.

Podemos ver três fases topológicas diferentes: vermelho $W_1 = 1$, azul $W_1 = 0$, branco $W_1 = 2$ e uma linha tracejada vermelha com $W_1^{SSH} = 1$ por $\Delta/t = 0$ e $\eta_1 < 0$. Aqui W_1^{SSH} é o winding number para a fase isolante do modelo SSH. Este resultado (linha tracejada) não foi obtido na Figura 2- (a) da Ref. (11), onde, para $\Delta/t = 0$ e $\eta < 0$, encontramos $N_1 = 2$ em toda a área do diagrama de fases para $\eta < 0$ e $|\Delta/t| < |\eta|$.

4.6.4 μ diferente de zero.

Para $|\mu| > 0$ a simetria da sub-rede é explicitamente quebrada e somente a simetria de partícula-buraco ($\Xi_2 = \sigma_0 \otimes \sigma_x K$) induz um índice topológico. Calculamos o número de estados de energia zero e W_2 em função de Δ_1/t_1 , Δ_2/t_1 e $\frac{\mu}{t_1}$. Estes resultados estão resumidos nas figuras 4.8 e 4.9.

A Fig. 4.8 mostra os efeitos do potencial químico $\frac{\mu}{t_1}$ sobre o número de soluções de energia zero por extremidade da cadeia. Na Fig. 4.8 (a), calculamos o espectro de energia para uma cadeia com 120 sítios em função de $\frac{t_2}{t_1}$ para $\frac{\mu}{t_1} = 0, 9$, $\frac{\Delta_1}{t_1} = 0$ e $\frac{\Delta_2}{t_1} = 0.4$.

Os estados de energia zero localizados nas extremidades da cadeia são destacados por linhas sólidas verdes e correspondem ao triângulo laranja, indicado pelo ponto $\Delta_1 = 0$, $\Delta_2 = 2$ do diagrama de fases na Fig. 4.8 (d). Por outro lado, destacamos os estados de energia do bulk

por linhas sólidas pretas, correspondentes ao círculo amarelo e quadrado no espectro de energia da Fig. 4.8 (a). Esses estados estão relacionados ao ponto $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = 2$ dos diagramas de fases (b) e (c) da Fig. 4.8.

A Fig. 4.8 (b) mostra o diagrama de fases no plano $\Delta_1 - \Delta_2$ para $\mu/t = 0.9$ e $t_2/t_1 = 0,2$. Novamente, as regiões com $W_2 = 0$ são coloridas em azul, enquanto as regiões com $W_2 = -1$ e $W_2 = 1$ foram coloridas em verde e vermelho, respectivamente. O círculo amarelo indica os estados fundamentais topológicos triviais ($W_2 = 0$) para $\mu = 0,9$, $t_2/t_1 = 0,2$, $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = 2$.

Fig. 4.8 (c) mostra o diagrama de fases quando $t_2/t_1 = 1$, em que o quadrado amarelo indica o estado fundamental topologicamente trivial ($W_2 = 0$) para $\mu = 0,9$, $t_2/t_1 = 0,2$, $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = 2$.

A Fig. 4.8 (d) mostra o diagrama de fases para $t_2/t_1 = 1.6$. O triângulo laranja indica o estado fundamental topologicamente não-trivial ($W_2 = 0$) para $\mu = 0,9$, $t_2/t_1 = 1,6$, $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = 2$. Podemos ver claramente que as regiões topológicas com $W_2 \neq 0$ aumenta quando a razão t_2/t_1 cresce em magnitude (ou seja, o tamanho das regiões vermelha e verde da Fig. 4.8 (b) ($t_2/t_1 = 0,2$), (c) ($t_2/t_1 = 1,0$) (d) ($t_2/t_1 = 1,6$) aumenta à medida que a razão (t_2/t_1) cresce em magnitude).

Para estudar os efeitos do potencial químico e da função de correlação supercondutora nas fases topológicas, definimos o parâmetro r como $\Delta_2 = r\Delta_1$. A Fig. 4.9 (a) mostra o espectro de energia no espaço real em função da razão μ/t_1 quando $t_2/t_1 = 1.6$ (aqui fixamos $r = -1$ e $N = 120$ sítios.). Descrevemos os estados de energia zero pela linha sólida verde e os estados de bulk pela cor azul.

Na Fig. 4.9 (b), (c) e (d), mostramos o diagrama de fases para W_2 no plano $r - \frac{\mu}{t_1}$ para $t_2/t_1 = 0,2$ (b), (c) $t_2/t_1 = 1,0$ e (d) $t_2/t_1 = 1,6$. Nesse caso, observamos fases topológicas não-triviais com $W_2 = 1$ (regiões vermelhas), fases topológicas não-triviais com $W_2 = -1$ (regiões verdes) e fases topológicas triviais com $W_2 = 0$ (regiões azuis). Observe que as fases topológicas não-triviais são cercadas por fronteiras circulares.

Fixando $r = -1$ e variando μ de -2 a 2 , podemos ver transições de fase topológicas em $\frac{\mu}{t_1} = -1,75$, $-0,6$, $0,6$, $1,75$, veja a Fig. 4.9 (a). Observe que, exatamente um estado de energia zero por borda da cadeia emerge para $-1,75 < \frac{\mu}{t_1} < -0,75$ e $0,6 < \frac{\mu}{t_1} < 1,75$. Portanto, nesses intervalos, um estado de Majorana isolado aparece nas extremidades da cadeia.

Na Fig. 4.9 (b), podemos observar uma transição de fase quântica da fase $W_2 = 1$ (região vermelha) para a fase $W_2 = -1$ (região verde) quando $r = -0.2$, aqui ambas as fases exibem um estado de Majorana isolado nas bordas da cadeia híbrida. Para $t_2/t_1 = 1$, ver a Fig. 4.9 (c), temos duas fases topológicas $W_2 = -1$ (região verde) e $W_2 = 0$ (região azul), enquanto a Fig. 4.9 (d) mostra um diagrama de fases mais complexo com três fases topológicas, região verde ($W_2 = -1$), região azul ($W_2 = 0$) e regiões vermelha ($W_2 = 1$).

Para alguns valores fixos de r nas Fig.4.9 (b), (c) e (d), encontramos um fenômeno interessante de reentrância, que não havia sido observado antes, separado por transições de fase topológicas.

Por exemplo, para $r = -1$ na Fig. 4.9 (d) as transições de fase topológica entre as regiões com $W_2 = 0$ (azul) e $W_2 = 1$ (vermelho) acontecem em $\mu/t_1 = -1,75, -0,6, 0,6$ e $1,75$. A fracionalização fermiônica nas extremidades da cadeia depende do parâmetro anisotrópico r e da razão $\frac{\mu}{t_1}$, como podemos ver em todos os diagramas de fases desta seção.

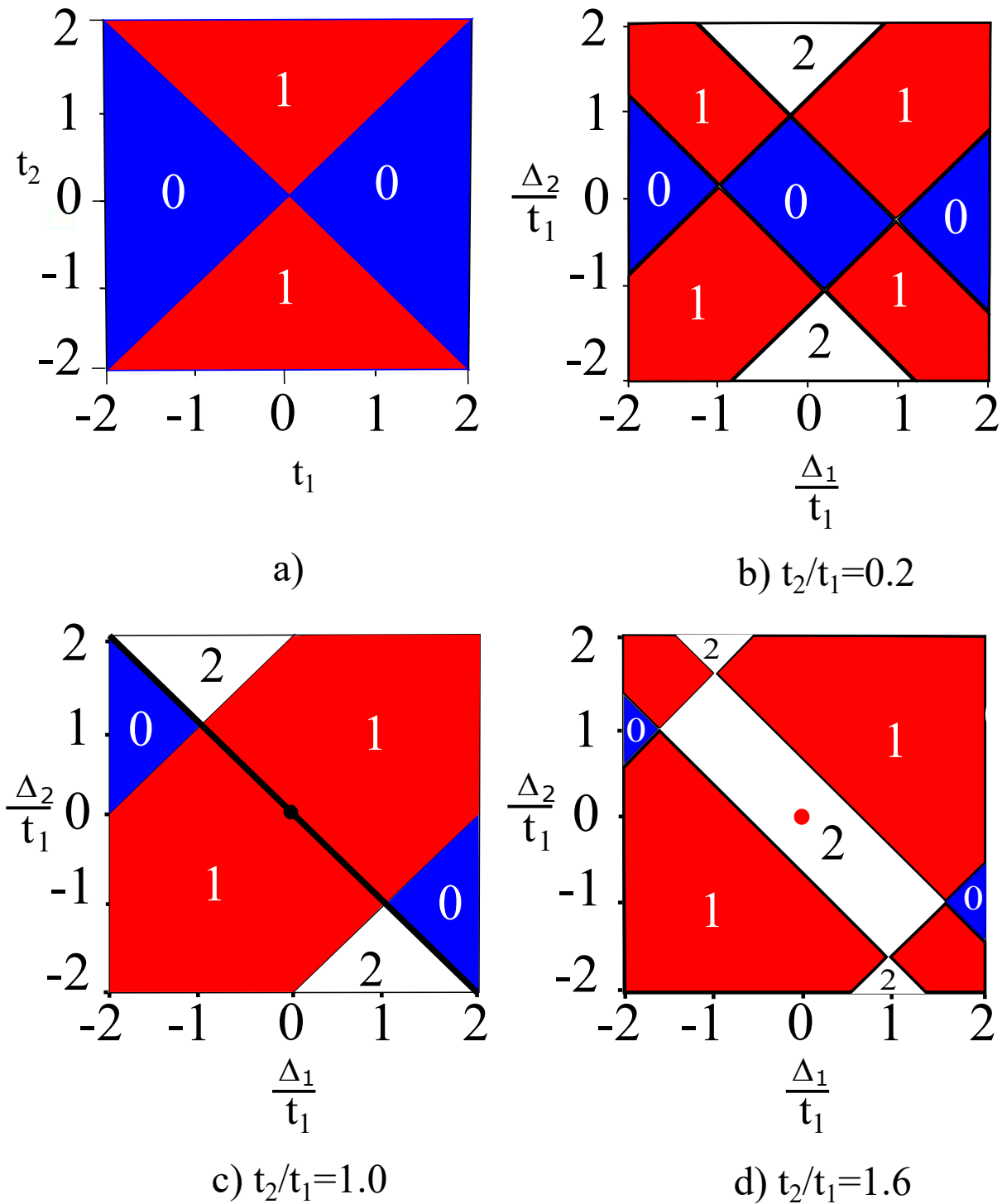


Figura 4.5: (Color online) Diagramas de fases topológicas em relação a W_1 com $\mu = 0$. Os números nas figuras (a), (b), (c) e (d) denota os valores possíveis W_1 . (a) Diagrama de fase topológico do modelo SSH puro com $\Delta_1 = \Delta_2 = 0$. A região topológica trivial é indicada pela cor azul ($W_1 = 0$), enquanto a região vermelha é a fase topológica não-trivial com $W_1 = 1$. Nas figuras (b), (c) e (d), consideramos os efeitos das correlações Δ_i para valores fixos da relação t_2/t_1 . (b) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 0.2$, (c) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1$ e (d) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$. Uma nova fase topológica com $W_1 = 2$ (regiões brancas) surge no sistema híbrido supercondutor.

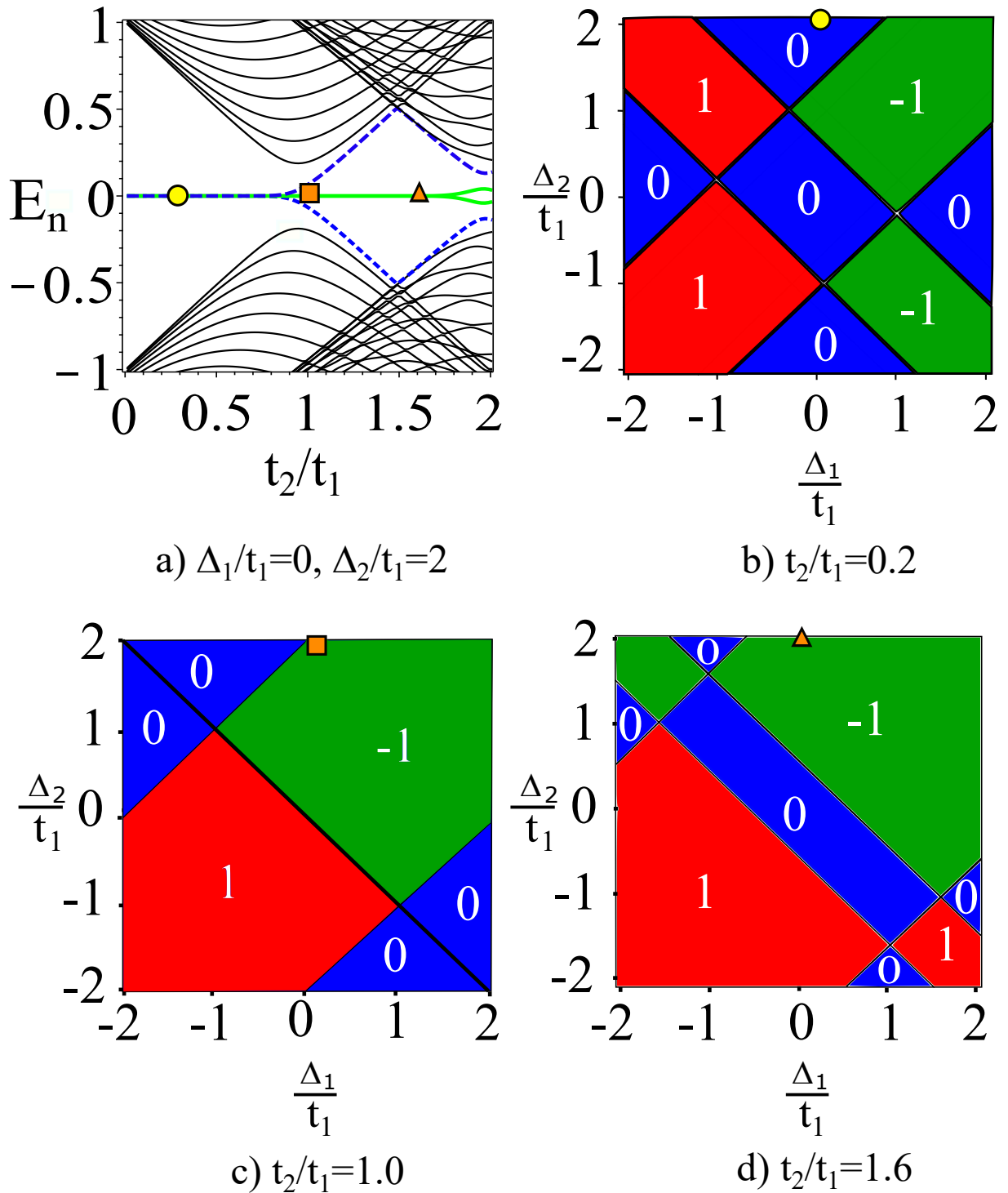


Figura 4.6: (Color online) Espectro de energia no espaço real e diagramas de fases topológicas em relação a W_2 com $\mu = 0$. As regiões verde, vermelha e azul correspondem a $W_2 = -1$, $W_2 = 1$ e $W_2 = 0$, respectivamente. Os números nas figuras (b), (c) e (d) denotam os valores de W_2 . (a) Espectro de energia em função de $\frac{t_2}{t_1}$ para o ponto particular $\frac{\Delta_1}{t_1} = 0$ e $\frac{\Delta_2}{t_1} = 2$ dos diagramas de fases (b), (c) e (d). Aqui, as linhas sólidas pretas são a energia dos estados de bulk, enquanto as linhas azul e verde são a energia dos estados de borda. O círculo (amarelo), quadrado (laranja) e triângulo (laranja) no espectro de energia (a) indica o valor da razão t_2/t_1 . (b) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 0.2$, onde o círculo indica o ponto $(0, 2)$. (c) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1$, onde o quadrado indica o ponto $(0, 2)$. (d) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$, onde o triângulo indica o ponto $(0, 2)$.

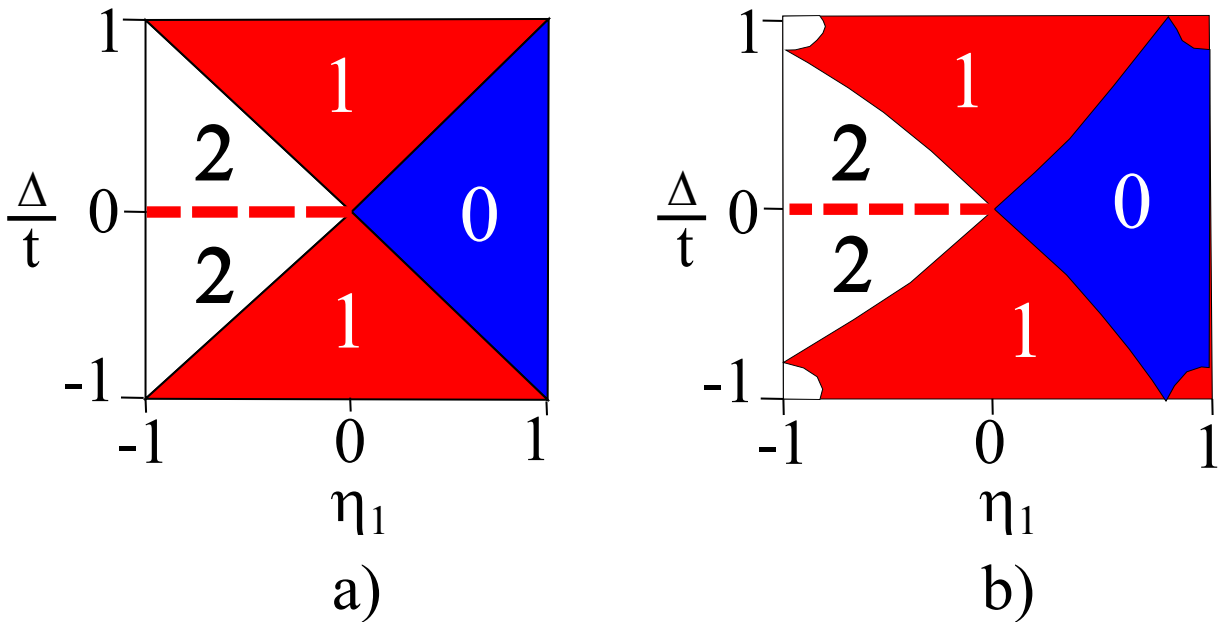


Figura 4.7: (Color online) Diagramas de fases topológicas em relação a W_1 no plano $\frac{\Delta}{t} - \eta_1$ com $\mu = 0$. Parametrização $t_1 = -t(1 + \eta_1)$, $t_2 = -t(1 - \eta_1)$, $\Delta_1 = \Delta(1 + \eta_1)$ e $\Delta_2 = \Delta(1 - \eta_2)$, (11). Os números nas figuras indicam W_1 . As regiões vermelhas exibem fase com $W_1 = 1$, regiões azuis exibem uma fase com $W_1 = 0$ e as regiões brancas $W_1 = 2$. (a) Caso $\eta_2 = \eta_1$. (b) Caso $\eta_2 = 1.5\eta_1$. Todos os pontos que pertencem à linha tracejada em $\frac{\Delta}{t} = 0$ e $\eta_1 < 0$ estão em uma fase topologicamente não-trivial do modelo SSH puro, já que nesses pontos, o winding number é $W^{SSH} = 1$. A linha topologica traçada para $\eta_1 < 0$ separa duas regiões topológicas com o mesmo invariante topológico $W_1 = 2$ (região branca).

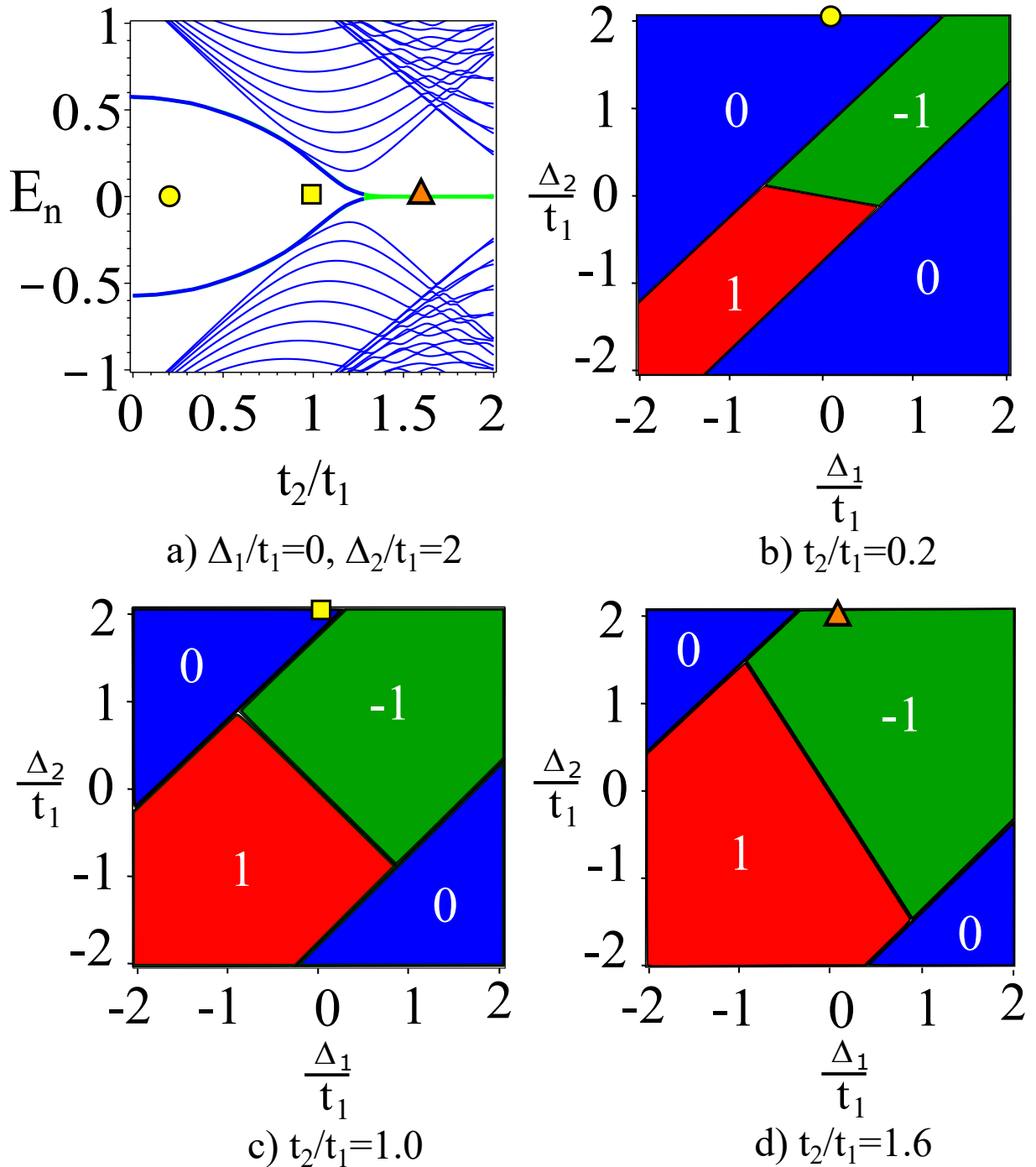


Figura 4.8: (Color online) Espectro de energia da cadeia finita em função de $\frac{t_2}{t_1}$ e diagramas de fase topológica em relação a W_2 com $\mu = 0.9$. Os números nas figuras (b), (c) and (d) denotam W_2 . (a) Espectro de energia em função $\frac{t_2}{t_1}$ com $\frac{\Delta_1}{t_1} = 0.0$, $\frac{\Delta_2}{t_1} = 2.0$ e $\mu = 0.9$. Aqui, as linhas sólidas pretas são os estados de energia do bulk, enquanto as linhas verdes são as energias dos estados da borda da cadeia. Nesse caso, podemos ver estados ligados a Majorana com energia zero apenas para $1.2 < t_2 < 2.0$ (linhas verdes sólidas em $E = 0$). O círculo, quadrado e triângulo no espectro de energia(a) indica o ponto $\Delta_1 = 0$ e $\Delta_2 = 2$ nos diagramas de fases (b), (c) e (d). (b) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 0.2$, (c) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1.0$ e (d) Diagrama de fase topológico com $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$. O ponto $(0, 2)$ dos diagramas de fase em (b), (c) e (d) são indicados por círculo (amarelo), quadrado (amarelo) e triângulo (laranja). Aqui, a cor verde corresponde a $W_2 = -1$, red $W_2 = 1$ e azul $W_2 = 0$.

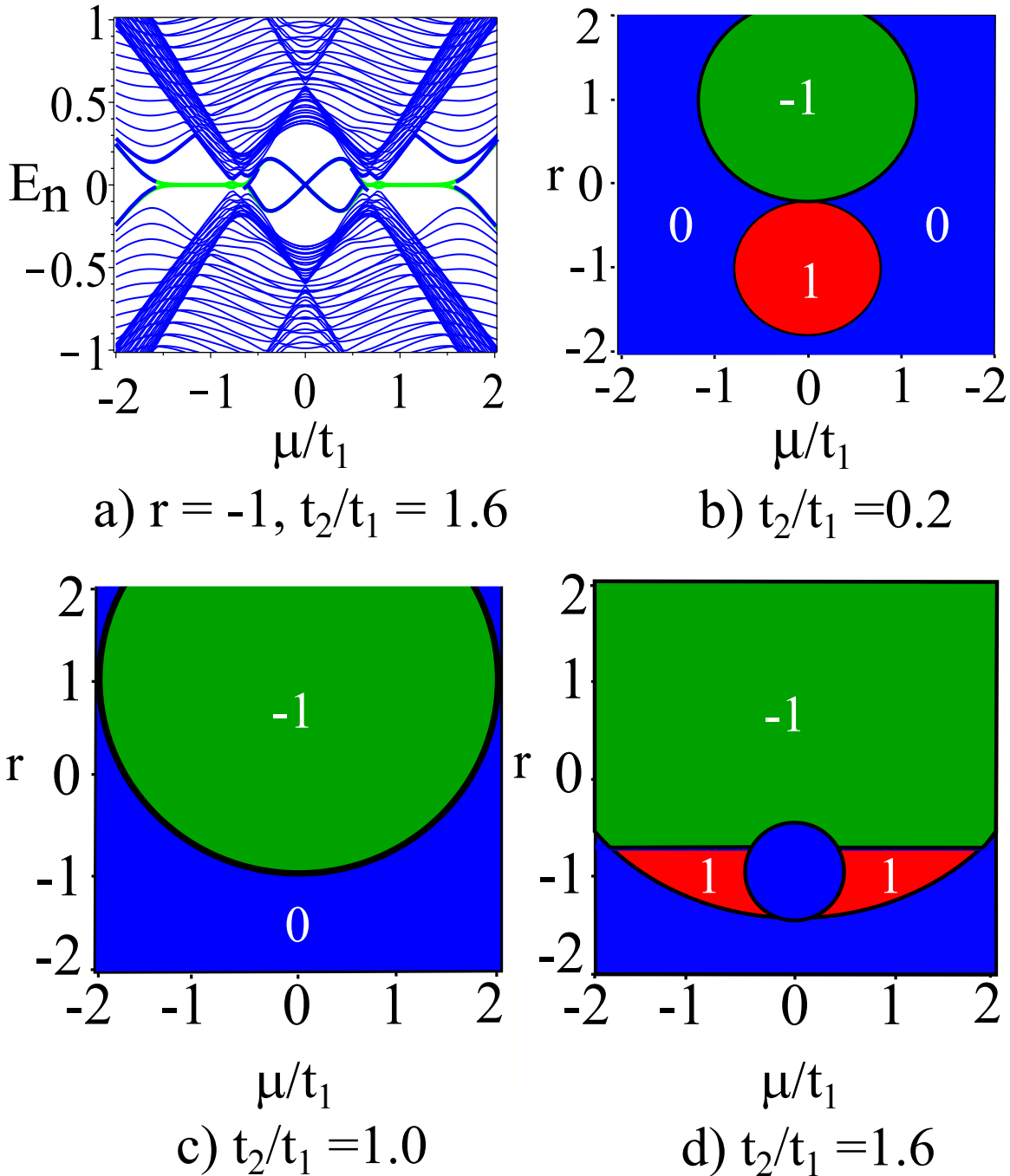


Figura 4.9: (Color online) Espectro de energia da cadeia finita e diagrama de fase topológica em relação a W_2 no plano $\frac{\mu}{t_1} - r$. Aqui $r = \frac{\Delta_2}{\Delta_1}$. Os números nas figuras (b), (c) e (d) denotam os valores de W_2 . (a) Espectro de energia em função de $\frac{\mu}{t_1}$ com $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$ e $r = -1$. (b) Diagrama de fase topológico para $\frac{t_2}{t_1} = 0.2$ (c) Diagrama de fase topológico para $\frac{t_2}{t_1} = 1.0$ e (d) Diagrama de fase topológico para $\frac{t_2}{t_1} = 1.6$

5

Conclusões

Neste trabalho, no capítulo 1, encontramos as autoenergias do modelo SSH e mostramos as fases isolantes e condutoras do modelo. As fases isolantes ocorrem quando $t_2 > t_1$ e $t_2 < t_1$ a fase condutora ocorre quando $t_2 = t_1$. Mostramos que quando o comutador do hamiltoniano é zero, o modelo SSH mostra simetria quiral dada por σ_z . O Hamiltoniano dado pela equação Eq. 2.9, mostra que tem simetria de reversão temporal, e como a diagonal principal dessa matriz é zero, ela apresenta simetria partícula-buraco, o que também é mostrado no capítulo 1. Com tudo o que foi descrito anteriormente, concluímos que o modelo SSH pertence à classe topológica BDI, mostrada na Fig. 2.5. Com base no anterior dito obtivemos também o winding number, já que cada fase topológica é caracterizada por um invariante topológico, e na classe BDI esse invariante é caracterizada pelo winding number. Finalmente encontramos os estados de borda da cadeia, os quais tem energia zero e estão localizados nas extremidades da cadeia, como podemos ver na Fig. 2.8.

No capítulo do modelo de Kitaev encontramos as autoenergias, e como no caso do modelo SSH também verificamos que apresenta as três simetrias. Neste caso a simetria Chiral é dado por σ_x . Quanto ao diagrama de fases, e sendo que igual que no modelo SSH (isto é encontrar as outras simetrias como reversão temporal e partícula-buraco), o modelo de Kitaev pertence à classe BDI. Além disso podemos dizer que o invariante topológico para este modelo supercondutor vêm dado em três regiões: a primeira quando $|\mu| < |2t|$ com $t > 0$, a segunda quando $|\mu| < |2t|$ com $t < 0$ e a terceira quando $|\mu| < |2t|$. Nos dois primeiros é um supercondutor topológico e no último de supercondutor trivial. Em relação ao espectro de energia no espaço real, podemos ver a diferença que existe com o modelo SSH (ver Fig. 2.7 e Fig. 3.8). Para o modelo de Kitaev os estados ligados não-locais de Majorana se encontram dentro o intervalo de $[-1,1]$. A natureza desses estados que estão nas extremidades da cadeia se deve ao fato de que cada partícula vem com sua antipartícula correspondente.

Neste trabalho, estudamos a fraccionação fermiônica que emerge no modelo supercondutor anisotrópico Su-Schieriffer-Heeger (SSH). Generalizamos os diagramas de fases obtidos na Ref. (11).

O modelo híbrido SSH exhibe duas simetrias discretas distintas para o potencial químico nulo e, portanto, nesse caso, essas duas simetrias (simetria Chiral e partícula-buraco) permitem

calcular dois invariantes topológicos distintos W_1 e W_2 , onde o primeiro pode ser associado ao número de estados com energia zero por extremidade da cadeia, e o último nos diz que um estado ligado não-local de Majorana com energia zero reside no final da cadeia.

O resultado foi confirmado pelo cálculo do número de estados de borda com energia zero, em cada caso dos diagramas de fases obtidos através desses dois invariantes topológicos. Estudamos também os efeitos de um potencial químico finito sobre os diagramas de fases e a existência de fracionamento fermiônico, como os estados ligados não-locais de Majorana com energia zero. Diferentemente dos trabalhos anteriores, os diagramas de fases do nosso modelo híbrido foram corretamente reduzidos ao limite de um estado fundamental de SSH puro.

Referências

- [1] A. Y. Kitaev, *Sov. Phys.-Usp.* 44, 131 (2001).
- [2] J. Alicea, *Rep. Prog. Phys.* 75, 076501 (2012).
- [3] M. Leijnse and K. Flensberg, *Semicond. Sci. Technol.* 27, 124003 (2012).
- [4] Motohiko Ezawa *Phys. Rev. B*, 100, 045407(2019).
- [5] Ning Wu and Wen-Long You *Phys. Rev. B* 100, 085130(2019).
- [6] C. W. J. Beenakker, *Annu. Rev. Con. Mat. Phys.* 4, 113 (2013).
- [7] Andrei Bernevig and Titus Neupert, “Topological superconductors and category theory,” arXiv:1506.05805 (2015).
- [8] D. Sticlet, L. Seabra, F. Pollmann, J. Cayssol, *Phys. Rev. B* 89, 115430 (2014).
- [9] R. Mong and V. Shivamoggi, *Phys. Rev. B* 83, 125109 (2011).
- [10] M. Yahyavi, B. Hetenyi, and B. Tanatar, *Phys. Rev. B* 100, 064202 (2019).
- [11] R. Wakatsuki, M. Ezawa, Y. Tanaka, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B*, 90 014505 (2014).
- [12] A. Altland and M. R. Zirnbauer, *Phys. Rev. B*, 55, 1142 (1997).
- [13] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A.W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B*, 78, 195125 (2008).
- [14] M. Maffei, A. Dauphin, F. Cardano, M. Lewenstein, and Massignan, *New J. Phys.* 20, 013023 (2018).
- [15] L. Jin, P. Wang, Z. Song, *Sci. Rep.* 7, 5903 (2017).
- [16] M.A. Continentino, H. Caldas, D. Nozadze and N. Trivedi, *Phys. Lett. A* 378, 3340 (2014).
- [17] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Colloquium, Rev. Mod. Phys.* 82, 3045 (2010).
- [18] M. Atala, M. Aidelsburger, J. T. Barreiro, D. A. Abanin, T. Kitagawa, E. Demler, and I. Bloch, *Nat. Phys.* 9, 795 (2013).
- [19] M. A. Griffith, T. O. Puel, and M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* 99, 075109 (2019).
- [20] M. A. Griffith, M. A. Continentino, *Phys. Rev. E* 97, 012107 (2018).
- [21] B. K. Stuhl, H.-I. Lu, L. M. Aycock, D. Genkina, and I. B. Spielman, *Science* 349, 1514 (2015).
- [22] M. Mancini, G. Pagano, G. Cappellini, L. Livi, M. Rider, J. Catani, C. Sias, P. Zoller, *Science* 349, 1510 (2015).
- [23] M. Leder, C. Grossert, L. Sitta, M. Genske, A. Rosch, and M. Weitz, *Nat. Comm.* 7, 13112 (2016).

- [24] N. Goldman, J. C. Budich, and P. Zoller, *Nat. Phys.* 12, 639 (2016).
- [25] E. J. Meier, F. A. An, and B. Gadway, *Nat. Comm.* 7, 13986 (2016).
- [26] C. Beenakker and L. Kouwenhoven, *Nat. Phys.* 12, 618 (2016).
- [27] M. Hafezi, S. Mittal, J. Fan, A. Migdall, and J. M. Taylor, *Nat. Phot.* 7, 1001 (2013).
- [28] M. C. Rechtsman, J. M. Zeuner, Y. Plotnik, Y. Lumer, D. Podolsky, F. Dreisow, S. Nolte, M. Segev, and A. Szameit, *Nature* 496, 196 (2013).
- [29] J. M. Zeuner, M. C. Rechtsman, Y. Plotnik, Y. Lumer, S. Nolte, M. S. Rudner, M. Segev, and A. Szameit, *Phys. Rev. Lett.* 115, 040402 (2015).
- [30] L. Lu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljacic, *Nat. Phys.* 12, 626 (2016).
- [31] S. Mukherjee, A. Spracklen, M. Valiente, E. Andersson, P. Ohberg, N. Goldman, and R. R. Thomson, *Nat. Comm.* 8, 13918 (2017).
- [32] M. Xiao, G. Ma, Z. Yang, P. Sheng, Z. Q. Zhang, and C. T. Chan, *Nat. Phys.* 11, 240 (2015).
- [33] V. Peano, C. Brendel, M. Schmidt, and F. Marquardt, *Phys. Rev. X* 5, 031011(2015).
- [34] Y.-G. Peng, C.-Z. Qin, D.-G. Zhao, Y.-X. Shen, X.-Y. Xu, M. Bao, H. Jia, and X.-F. Zhu, *Nat. Comm.* 7, 13368 (2016).
- [35] Su-Yang Xu et al, *Nature Physics* 10, 950 (2014).
- [36] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems: An Approach to Quantum Phase transitions*, 2nd ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 2017).
- [37] C.-K. Chiu, J. C. Y. Teo, A. P. Schnyder, and S. Ryu, *Rev. Mod. Phys.* 88, 035005 (2016).
- [38] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Solitons in Polyacetylene*, *Phys. Rev. Lett.* 42, 1698 (1979).
- [39] A. Y. Kitaev, *Phys. Usp.* 44, 131 (2001).
- [40] A. Kitaev, *Ann. Phys.* 303, 2 (2003).
- [42] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.*, 105, 077001 (2010).
- [43] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, *Phys. Rev. Lett.*, 105, 177002 (2010).
- [44] R. Wakatsuki, M. Ezawa, Y. Tanaka and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B* 90, 015505(2014).

Apêndice

A

Modelo SSH

A.1 Modelo SSH na representação de Fourier

$$H = t_1 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} (c_{A,i}^\dagger c_{B,i} + c_{B,i}^\dagger c_{A,i}) + t_2 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} (c_{A,i+1}^\dagger c_{B,i} + c_{B,i}^\dagger c_{A,i+1}) \quad (\text{A.1})$$

Se:

$$c_{A,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} c_{A,k} \quad (\text{A.2})$$

$$c_{B,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} c_{B,k'} \quad (\text{A.3})$$

Substituindo essas expressões temos:

$$\begin{aligned} H = & t_1 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left(\frac{1}{N} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} c_{A,k}^\dagger \sum_{k'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} c_{B,k'}^\dagger + \frac{1}{N} \sum_{k'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} c_{B,k'}^\dagger \sum_k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} c_{A,k}^\dagger \right) \\ & + t_2 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left(\frac{1}{N} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} c_{A,k}^\dagger \sum_{k'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} c_{B,k'}^\dagger + \frac{1}{N} \sum_{k'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} c_{B,k'}^\dagger \sum_k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} c_{A,k}^\dagger \right) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde: $\vec{r}_j = \vec{r}_i + \vec{a}$. Logo, usando a definição de função discreta da delta de Dirac δ da seguinte forma:

$$\delta(\vec{k}' - \vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_i e^{+i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} \quad (\text{A.5})$$

Encontramos que:

$$\begin{aligned} H = & t_1 \left(\sum_k \sum_{k'} \delta(\vec{k}' - \vec{k}) c_{A,k}^\dagger c_{B,k'} + \sum_k \sum_{k'} \delta(\vec{k}' - \vec{k}) c_{B,k'}^\dagger c_{A,k} \right) \\ & + t_2 \left(\sum_k \sum_{k'} \delta(\vec{k}' - \vec{k}) e^{ika} c_{A,k}^\dagger c_{B,k'} + \sum_k \sum_{k'} \delta(\vec{k}' - \vec{k}) e^{-ika} c_{B,k'}^\dagger c_{A,k} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

ou ainda:

$$H = t_1 \sum_k (c_{A,k}^\dagger c_{B,k} + c_{B,k}^\dagger c_{A,k}) + t_2 \sum_k (e^{ika} c_{A,k}^\dagger c_{B,k} + e^{-ika} c_{B,k}^\dagger c_{A,k}) \quad (\text{A.7})$$

$$H = \sum_k ((t_1 + t_2 e^{ika}) c_{A,k}^\dagger c_{B,k} + (t_1 + t_2 e^{-ika}) c_{B,k}^\dagger c_{A,k}) \quad (\text{A.8})$$

Se usamos a fórmula de Euler $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$ temos:

$$H = \sum_k (t_1 + t_2 (\cos ka + i \sin ka)) c_{A,k}^\dagger c_{B,k} + \sum_k (t_1 + t_2 (\cos ka - i \sin ka)) c_{B,k}^\dagger c_{A,k} \quad (\text{A.9})$$

A.2 Cálculo do *winding number* para o modelo SSH

$$\omega = \frac{1}{4\pi i} \int_0^{2\pi/a} \text{Tr}(\Pi \cdot H_k^{-1} \frac{\partial H_k}{\partial k}) dk, \quad (\text{A.10})$$

onde:

$$H_k^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{h_1 + ih_2} \\ \frac{1}{h_1 - ih_2} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

$$\Pi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{\partial H_k}{\partial k} = \begin{pmatrix} 0 & -iat_2 e^{-ika} \\ iat_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

com: $h_1 = t_1 + t_2 \cos(ka)$ e $h_2 = t_2 \sin(ka)$. Fazendo a multiplicação das matrizes e aplicando o traço da matriz resultante, obtemos:

$$\omega = \frac{at_2}{4\pi} \int_0^{2\pi/a} \left(\frac{e^{ika}}{t_1 + t_2 e^{ika}} + \frac{e^{-ika}}{t_1 + t_2 e^{-ika}} \right) dk \quad (\text{A.14})$$

Logo fazemos:

$$z = e^{ika} \quad (\text{A.15})$$

$$dk = \frac{dz}{iaz} \quad (\text{A.16})$$

sostituindo em A.14 obtemos:

$$\omega = \frac{t_2}{4\pi i} \left[\frac{1}{t_2} \int_0^{2\pi/a} \frac{dz}{z + \frac{t_1}{t_2}} + \frac{1}{t_1} \int_0^{2\pi/a} \frac{dz}{z(z + \frac{t_2}{t_1})} \right] \quad (\text{A.17})$$

Lembramos que uma consequência direta do Teorema integral de Cauchy, é, o Teorema de

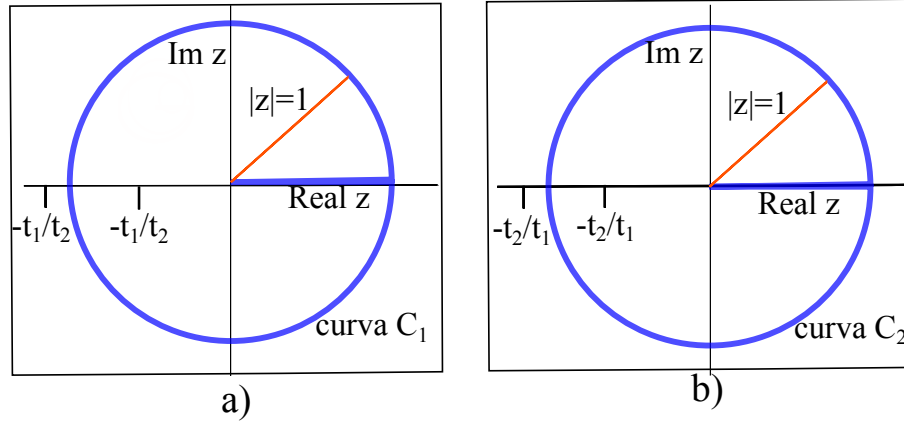


Figura A.1: Razoamento para o calculo do winding number. a) Se $\frac{|t_1|}{|t_2|} > 1$. b) Se $\frac{|t_2|}{|t_1|} > 1$

Resíduos :

$$Res(f(z), z_0) = \frac{1}{2\pi i} \int_C f(z) dz \quad (\text{A.18})$$

onde $Res(f(z), z_0)$ é o resíduo da função $f(z)$, $f(z)$ é uma função analítica, e z_0 é um ponto singular da função $f(z)$. Além disso temos:

$$Res(f(z), z_0) = \frac{1}{(k-1)!} \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{d^{k-1}}{dz^{k-1}} [(z-z_0)^k f(z)] \quad (\text{A.19})$$

onde k é a ordem do polo, que para nosso caso é $k = 1$, e z_0 é um polo. Substituindo A.18 em A.17 temos:

$$\omega = \frac{t_2}{4\pi i} \left[\frac{2\pi i}{t_2} Res(f(z), \frac{-t_1}{t_2}) + \frac{2\pi i}{t_1} (Res(f(z), 0) + Res(f(z), -\frac{t_2}{t_1})) \right] \quad (\text{A.20})$$

Com base em A.15 e na figura A.1 observamos que o módulo do nosso número complexo é $|z| = 1$, portanto para calcular o winding number com A.20 temos que considerar os polos que estejam dentro do círculo de raio $|z| = 1$. Procedemos da seguinte maneira; Se $\frac{|t_1|}{|t_2|} < 1 \Rightarrow \frac{|t_2|}{|t_1|} > 1$, portanto o $Res(f(z), \frac{-|t_2|}{|t_1|})$ não está dentro da curva C de raio 1 (Ver Fig. A.1a)).

$$\omega = \frac{t_2}{4\pi i} \left[\frac{2\pi i}{t_2} Res(f(z), \frac{-t_1}{t_2}) + \frac{2\pi i}{t_1} Res(f(z), 0) \right] \quad (\text{A.21})$$

$$\omega = \frac{t_2}{4\pi i} \left[\frac{2\pi i}{t_2} (1) + \frac{2\pi i}{t_1} \frac{t_1}{t_2} \right] \quad (\text{A.22})$$

$$\omega = 1 \quad (\text{A.23})$$

Por outro lado se $\frac{|t_1|}{|t_2|} > 1 \Rightarrow \frac{|t_2|}{|t_1|} < 1$, portanto o $Res(f(z), \frac{-|t_1|}{|t_2|})$ não está dentro da curva C de raio 1 (Ver Fig. A.1b)).

$$\omega = \frac{t_2}{4\pi i} \left[\frac{2\pi i}{t_1} \left(\frac{t_1}{t_2} - \frac{t_1}{t_2} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.24})$$

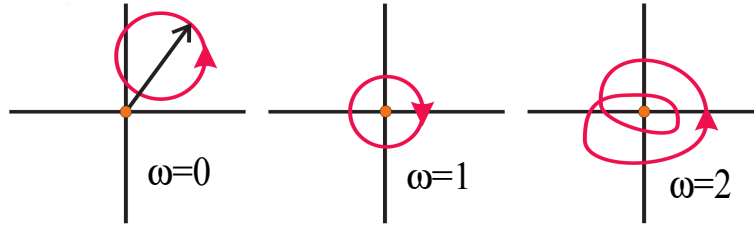


Figura A.2: Representação esquemática do winding number

Finalmente o winding number é:

$$\omega = \begin{cases} 1, & \text{Se } \frac{|t_2|}{|t_1|} > 1 \\ 0, & \text{Se } \frac{|t_2|}{|t_1|} < 1 \end{cases} \quad (\text{A.25})$$

A.3 Interpretação do Winding Number

O winding number ou índice de uma curva fechada é o número inteiro de voltas em torno de um ponto, que para o caso é em torno de 0. A figura A.2 é um exemplo simples do winding number. Lembremos do capítulo 2 a Eq. 2.22

$$h_k = h_1 \sigma_x + h_2 \sigma_y \quad (\text{A.26})$$

que também podemos escrever como:

$$\vec{h}_k = (h_x, h_y) \cdot (\sigma_x, \sigma_y) \quad (\text{A.27})$$

com $h_1 = h_x = t_1 + t_2 \cos(ka)$ e $h_2 = h_y = t_2 \sin(ka)$. Podemos expressar h em forma vetorial com componentes vetoriais h_x e h_y . A definição formal do winding number é aquela dada por uma curva no plano xy e ademais esta parametrizada; ou seja: $x = x(t)$ e $y = y(t)$ para $0 < t < 1$. Como nosso vetor \vec{h} está parametrizado em relação a k , ou seja $\vec{h} = (h_1(k), h_2(k))$, e que tanto na física quanto na topologia o winding number representa um mapeamento contínuo da forma

$$h : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{S}^2, \quad (\text{A.28})$$

sendo que agora nosso vetor \vec{h} podemos representar no plano xy como se pode ver na fig. A.3, a interpretação direta do winding number é poder discernir entre uma fase topológica e outra (Ver Fig. A.3a) e c)). Como vimos no capítulo 2 os gráficos das energias em função de k eram semelhantes para os casos $|t_2| > |t_1|$ e $|t_1| > |t_2|$, o winding number calculado para esses valores de $|t_1|$ e $|t_2|$ é diferente. No caso da Fig. A.3c) vemos que esta na transição de fase topológica, ou seja $|t_1| = |t_2|$

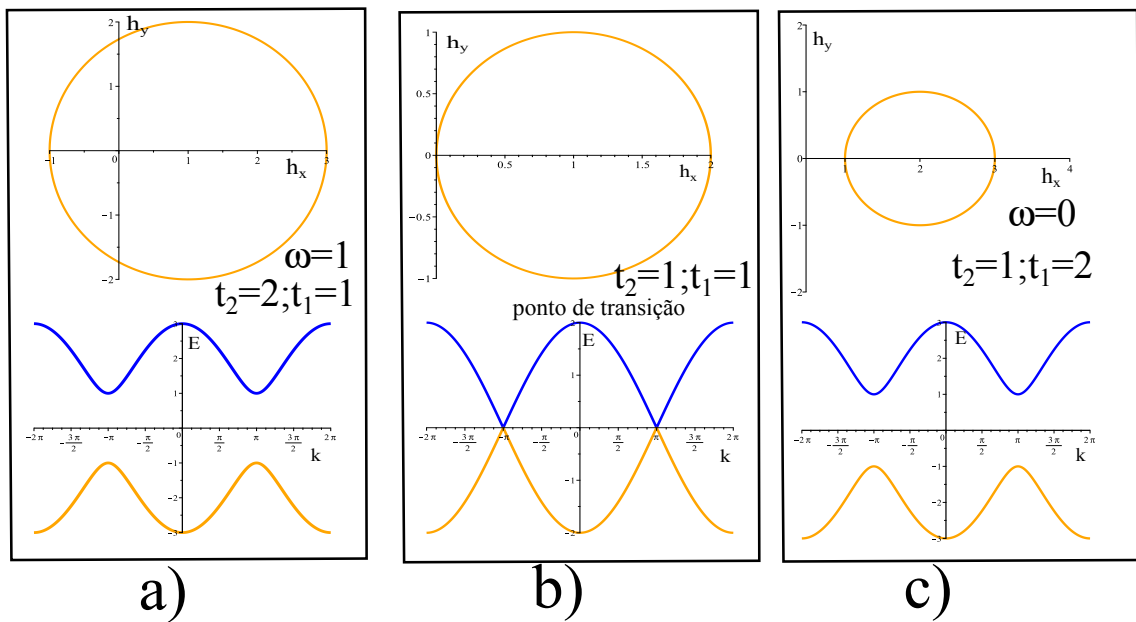


Figura A.3: Winding Number para valores diferentes de t_1 e t_2 . a) quando $|t_2| > |t_1|$ o winding number é 1 e no espectro de energia apresenta um gap. b) quando $|t_2| = |t_1|$ é uma transição de fase. c) quando $|t_2| < |t_1|$ o winding number é zero e apresenta um gap no espectro de energia

B

Modelo de Kitaev

B.1 Modelo de Kitaev na Representação de Fourier

Tomando o hamiltoniano de Kitaev

$$H = -t \sum_{i,j} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) - \mu \sum_{i=1}^N c_i^\dagger c_i + \sum_{i,j} (\Delta_{i,j}^* (c_i^\dagger c_j^\dagger - c_j^\dagger c_i^\dagger) + h.c.), \quad (\text{B.1})$$

podemos expressá-lo no espaço dos momentos na representação de Fourier usando os termos:

$$c_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (\text{B.2})$$

$$c_{i+1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} c_{k'} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r}_i + \vec{a})}, \quad (\text{B.3})$$

substituindo as equações anteriores em B.1 temos

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_i \left[\frac{1}{N} \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{a}} + \frac{1}{N} \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_k e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}_i} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{a}} \right] \quad (\text{B.4}) \\ &+ \Delta_0 \sum_i \left[\frac{1}{N} \sum_{k,k'} c_k^\dagger c_{k'}^\dagger e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{a}} e^{-i(\vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} - \frac{1}{N} \sum_{k,k'} c_{k'}^\dagger c_k^\dagger e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{a}} e^{-i(\vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} \right] \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{k,k'} c_{k'} c_k e^{i\vec{k}' \cdot \vec{a}} e^{i(\vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} - \frac{1}{N} \sum_{k,k'} c_k c_{k'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{a}} e^{i(\vec{k}' + \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} \\ &- \mu \sum_i \sum_{k,k'} \frac{1}{N} c_k^\dagger c_{k'} e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} \end{aligned}$$

onde usamos $\Delta_{i,j}^* = -\Delta_{j,i} = \Delta_0$. Logo, usando a definição de delta de Dirac discreta como:

$$\delta(\vec{k}' - \vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_i e^{+i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} \quad (\text{B.5})$$

e aproveitando sua propriedade de função par da delta de Dirac reescrevemos B.4 como:

$$H = -t \sum_k [e^{ika} c_k^\dagger c_k + e^{-ika} c_k^\dagger c_k] - \mu \sum_k c_k^\dagger c_k \quad (\text{B.6})$$

$$+ \Delta_0 \sum_k [c_k^\dagger c_{-k}^\dagger e^{ika} - c_{-k}^\dagger c_k^\dagger e^{ika} + c_{-k} c_k e^{-ika} - c_k c_{-k} e^{-ika}]$$

da equação B.6 trabalhamos o primeiro termo do lado direito da seguinte forma:

$$\sum_k [e^{ika} c_k^\dagger c_k + e^{-ika} c_k^\dagger c_k] = 2 \sum_k \cos(ka) c_k^\dagger c_k \quad (\text{B.7})$$

logo usando o anticomutador dos operadores $\{c_k^\dagger, c_k\} = 1$ podemos escrever $c_k^\dagger c_k$ da seguinte maneira:

$$c_k^\dagger c_k = \frac{1}{2} (c_k^\dagger c_k + c_k^\dagger c_k) \quad (\text{B.8})$$

$$c_k^\dagger c_k = \frac{1}{2} (c_k^\dagger c_k + 1 - c_k c_k^\dagger) \quad (\text{B.9})$$

substituindo em B.7 encontramos:

$$\sum_k [e^{ika} c_k^\dagger c_k + e^{-ika} c_k^\dagger c_k] = 2 \sum_k \cos(ka) \frac{1}{2} (c_k^\dagger c_k + 1 - c_k c_k^\dagger) \quad (\text{B.10})$$

o terceiro termo do lado direito de B.10 pela propriedade do índice mudo com o somatório e aproveitando a simetria espacial na primeira zona de Brillouin podemos reescrever e depois verificar que:

$$\sum_k c_k c_k^\dagger = \sum_{-k} c_{-k} c_{-k}^\dagger \quad (\text{B.11})$$

$$\sum_3^{-3} c_k c_k^\dagger = c_3 c_3^\dagger + c_2 c_2^\dagger + c_1 c_1^\dagger + c_0 c_0^\dagger + c_{-1} c_{-1}^\dagger + c_{-2} c_{-2}^\dagger + c_{-3} c_{-3}^\dagger \quad (\text{B.12})$$

$$\sum_{-3}^3 c_{-k} c_{-k}^\dagger = c_3 c_3^\dagger + c_2 c_2^\dagger + c_1 c_1^\dagger + c_0 c_0^\dagger + c_{-1} c_{-1}^\dagger + c_{-2} c_{-2}^\dagger + c_{-3} c_{-3}^\dagger \quad (\text{B.13})$$

O termo que resulta da constante 1 de B.10 vira integral se o tamanho de dk é muito pequeno, ou seja:

$$\frac{1}{2} \sum_k \cos(ka) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \cos(ka) dk \quad (\text{B.14})$$

avaliando a integral de B.14 encontramos que o resultado é 0. Usando o critério de B.8 e B.11 para o termo do potencial químico em B.6, e B.11 (mas da forma $\sum_{-k} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger e^{-ika} = \sum_k c_{-k}^\dagger c_k^\dagger e^{ika}$)

para o segundo e quarto termos do parâmetro supercondutor de B.6, obtemos:

$$H_k = -t \sum_k \cos(ka) (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) - \frac{1}{2} \mu \sum_k (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) + i\Delta \sum_k \sin(ka) (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger - c_k c_{-k}) \quad (\text{B.15})$$

onde $\Delta = 2\Delta_0$, e o termo constante do potencial químico μ tende a N (número total de sítios), e foi passado para o lado esquerdo da equação, pois é uma constante e é a energia necessária para colocar o elétron no átomo.