

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

ADONAI RODRIGUES DA CRUZ

Fusão de modos de Majorana em pontos quânticos

São Carlos

2016



ADONAI RODRIGUES DA CRUZ

## Fusão de modos de Majorana em pontos quânticos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica  
Orientador: Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes

Versão Corrigida  
(versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos  
2016

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica revisada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC,  
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Cruz, Adonai Rodrigues da  
Fusão de modos de Majorana em pontos quânticos /  
Adonai Rodrigues da Cruz; orientador José Carlos  
Egues de Menezes - versão corrigida -- São Carlos,  
2016.  
126 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em  
Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos,  
Universidade de São Paulo, 2016.

1. Modos de Majorana. 2. Cadeia de Kitaev. 3.  
Pontos quânticos. 4. Supercondutividade topológica. I.  
Menezes, José Carlos Egues de, orient. II. Título.

# Agradecimentos

Agradeço ao professor José Carlos Egues de Menezes pela orientação deste trabalho e por possibilitar oportunidades de aprendizagem e desenvolvimento profissional através do contato com pesquisadores dos EUA e da Suíça, em especial pela estadia junto ao grupo do professor Dominik Zumbühl na Universidade de Basileia.

À Poliana Heifig Penteado pelo acompanhamento e discussões ao longo desta pesquisa e pela atenciosa correção desta dissertação.

Ao professor Edson Vernek por ter me ensinado sobre a física de Majoranas e o método das equações de movimento, pelo auxílio com o desenvolvimento dos códigos numéricos e sua disponibilidade para discussões.

Aos meus colegas de grupo Denis e Fu pela amizade e inúmeras discussões que o contato diário possibilitou.

Às amizades que fiz durante esse tempo no IFSC (Rodrigo, Julián, Oscar e Eduardo)

À minha família pelo apoio e paciência. Em especial à minha mãe Graziela e ao meu pai Marcos.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

Ao IFSC-USP pela infraestrutura e apoio acadêmico, em especial aos funcionários da CPG (Ricardo), da secretaria do Grupo de Física Teórica (Cris) e da Biblioteca (Neusa) pela atenção e pela solução dos nossos problemas acadêmicos do dia a dia.



*“A mente antecede todos os estados mentais.  
A mente é o seu criador, pois são todos forjados pela mente.  
Se uma pessoa fala ou age com uma mente pura, a felicidade segue-a  
como um sombra que jamais a abandona.”*  
*(Dhammapada)*



# Resumo

CRUZ, A.R. **Fusão de modos de Majorana em pontos quânticos**. 2016. 126 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

Neste trabalho investigamos a fusão entre estados ligados de Majorana em nanoestruturas compostas por um ponto quântico conectado a contatos metálicos e acoplado lateralmente a dois fios quânticos supercondutores que sustentam modos de Majorana em suas pontas. Modelando cada fio quântico por uma cadeia de Kitaev, nós adotamos duas abordagens: inicialmente usando as funções de Green do ponto obtidas através do método recursivo calculamos a condutância e a densidade local de estados (LDOS), posteriormente diagonalizamos o sistema no formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) e obtemos o espectro completo dos autoestados. Como descrito em (1), o LDOS do ponto quântico acoplado a uma única cadeia de Kitaev mostra claramente o vazamento do modo de Majorana inicialmente presente na ponta da cadeia para o ponto quântico, onde este modo surge fixo na energia de Fermi dos contatos metálicos ( $\varepsilon_f$ ). A condutância de dois terminais medida através do ponto mostra uma assinatura dos estados de Majorana neste sistema, uma ressonância fixa mesmo quando o nível do ponto está vazio ou não. Interessante ressaltar que mesmo na presença de interações no ponto essa assinatura de Majorana é válida como mostrado em (2). Motivados por estes resultados anteriores estamos particularmente interessados em investigar a hibridização (aqui denominada de fusão) entre dois modos de Majorana resultando em um modo fermiônicos ordinário dentro do ponto quântico. Nossos resultados demonstram que controlando a diferença de fase supercondutora entre os fios e a voltagem de gate do ponto quântico somos capazes de controlar a emergência e fusão dos modos de Majorana. Além disso nós reforçamos a proposta de se utilizar o efeito Josephson a.c. de período  $4\pi$  para identificar os modos de Majorana pela reprodução dos resultados obtidos por (3).

**Palavras-chave:** Modos de Majorana. Cadeia de Kitaev. Pontos quânticos. Supercondutividade topológica.



# Abstract

CRUZ, A.R. **Fusing Majorana modes in quantum-dots**. 2016. 126 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

In this work we investigate the fusion between Majorana bound states in nanostructures composed of a quantum dot connected to source and drain leads and side coupled to two topological superconducting nanowires sustaining Majorana end modes. Modeling the nanowire via a Kitaev chain, we have used two approaches: first using a recursive Green's-function approach we calculate the conductance and local density of states (LDOS) and then by the diagonalization using the Bogoliubov-de Gennes (BdG) formalism we obtain the full spectrum of eigenstates. As described in (1) the LDOS of quantum dot coupled to a single wire clearly shows a leakage of the Majorana end mode from the wire into the dot, where it emerges as a unique dot level pinned to the Fermi energy of the leads ( $\varepsilon_f$ ). The calculated two-terminal conductance through the dot displays an unambiguous signature of the Majorana bound states, i. e., a pinned resonance occurring even when the dot level is far above  $\varepsilon_f$ . Interestingly this Majorana signature remains even in the presence of interactions within the dot as showed in (2). Motivated by these earlier results we are particularly interested to investigate the fusion of Majonana end modes into ordinary fermionic modes within the dot. Our results demonstrate that by tuning the superconducting phase difference between the wires and the quantum-dot gate voltage we are able to control the emergence and splitting of Majorana modes. Furthermore we reinforce the proposal of using the  $4\pi$  periodic a.c Josephson effect to identify Majorana modes by reproducing the results obtained by (3).

**Keywords:** Majorana modes. Kitaev chain. Quantum-dots. Topological superconductivity.



# Listas de Figuras

- Figura 1 – Decaimento  $\beta$  duplo só é possível quando os neutrinos são suas próprias antipartículas. Assim os dois neutrinos virtuais que são emitidos pelos dois nêutrons podem se aniquilar. . . . . 21
- Figura 2 – Diagrama ilustrativo da fusão de dois modos de Majorana em um modo fermiônico devido ao acoplamento entre eles modelada pelo Hamiltoniano  $H = i\varepsilon_m \gamma_1 \gamma_2 = \varepsilon_m (2\hat{n} - 1)$ . Inicialmente enquanto afastados os modos possuem energia zero, a medida que se aproximam espacialmente e suas funções de onda começam a se sobrepor estes modos se hibridizam e formam um férnion convencional  $c = (\gamma_1 + i\gamma_2)/2$  como em um sistema de dois níveis com energias finitas  $\pm\varepsilon_m$  que depende de sua ocupação  $\hat{n} = c^\dagger c$ . . . . . 24
- Figura 3 – Um típico *setup* experimental para a detecção de modos de Majorana em fios quânticos. O fio é posto sobre um substrato contendo os *gates* metálicos e coberto por eletrodos metálicos normal (cinza) e supercondutor (amarelo). As setas vermelhas indicam o campo magnético externo aplicado. . . . . 25
- Figura 4 – Imagem colorida obtida através de microscopia eletrônica de varredura de um dispositivo híbrido semicondutor-supercondutor. O fio quântico de InSb está mostrado em cinza, o metal supercondutor (NbTiN) em dourado, os *gates* em azul. Os contatos verdes (metal normal) ligados ao fio quântico são usados para se detectar modos de Majorana como discutido em (23). As posições esperadas dos modos de Majorana são mostradas pelos pontos laranja. . . . . 26
- Figura 5 – Espectroscopia diferencial  $dI/dV$  em função de  $V$  obtida experimentalmente do setup da Fig.3 em 70 mK para diferentes valores do campo magnético (de 0 a 490 mT em passos de 10 mT). A elipse vermelha indica a presença de um pico em  $V = 0$  no meio do *gap* induzido no fio. . . . . 27
- Figura 6 – (a,b) Esquema de uma junção necessária para observar o efeito Josephson fracionário de período  $4\pi$  oriundo da fusão de dois Majoranas  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  formado por dois segmentos de um fio quântico sobre um substrato supercondutor com fases distintas  $\phi_L$  e  $\phi_R$  separados por uma região. (c) As energias dos dois estados fermiônicos com diferentes paridades em função da diferença de fases supercondutoras  $\Delta\phi = \phi_R - \phi_L$ . . . . . 28

Figura 7 – (a) Diagrama esquemático da estrutura de uma junção Nb-InSb-Nb para a detecção de Majoranas. Em (b) uma imagem obtida através de microscopia por varredura eletrônica do dispositivo estudado em (29). Os segmentos de InSb cobertos pelo supercondutor Ti-Nb-Al formam dois fios quânticos topológicos que apresentam modos de Majorana em suas extremidades na fase topológica não-trivial alcançada pela aplicação de um campo magnético externo perpendicular ao substrato e uma voltagem apropriada no *backgate* ( $V_{bg}$ ). Estes fios quânticos topológicos podem ser mapeados em duas cadeias de Kitaev no limite de baixas energias (ver Capítulo 2). A região de InSb que separa os dois contatos de Nb tem em torno de 150 nm e se torna um ponto quântico pela depleção eletrônica quando aplicado uma voltagem ( $V_{sd}$ ) . . . . . 30

Figura 8 – Diagrama ilustrativo do sistema composto por um fio semicondutor na direção  $\hat{y}$  em proximidade com um supercondutor *s-wave* e um campo magnético externo na direção  $\hat{z}$  perpendicular ao vetor spin-órbita de Rashba  $\vec{\alpha}$  que aponta na direção  $\hat{x}$  . . . . . 33

Figura 9 – Bandas spin-órbita com efeito Zeeman usando como parâmetros  $m = 1$ ,  $\alpha = 1.0$ ,  $V_z = 2.0$  e  $\mu = 0$ . A introdução de um campo magnético provoca a abertura de um *gap* em  $k = 0$ . No regime em que  $|\mu| < 2|V_z|$  apenas a banda  $\varepsilon_-$  (verde) está ocupada. . . . . 35

Figura 10 – Bandas de energia para um fio quântico com energia Zeeman  $V_z$  e supercondutividade induzida por proximidade  $\Delta$  obtidas pela diagonalização da Eq. 2.34 com  $\mu = 0$ . Em (a) obtemos as típicas bandas de Rashba duplicadas fazendo  $\Delta = 0$  e  $V_z = 0$ . (b) Ao aplicarmos um campo magnético perpendicular ao fio um *gap* surge em  $k = 0$ . (c) O efeito da supercondutividade  $\Delta$  é abrir outro *gap* em  $k = k_f$  devido ao acoplamento das bandas  $E_\pm$  com as  $-E_\pm$  tornando o sistema “*gapped*” em *bulk*. Em (d) observamos o fechamento do *gap* em  $k = 0$  para  $\Delta = V_z$ . . . . . 40

Figura 11 – Energia de excitação do *gap*  $E_g$  normalizada por  $\Delta$ . Em (a) variamos  $\Delta/V_z$  e  $m\alpha^2/V_z$  e fixamos potencial químico em  $\mu = 0$ . Para  $\Delta/V_z < 1$  o fio se comporta como um supercondutor *p-wave* (topológico) enquanto para  $\Delta/V_z > 1$  o sistema apresenta supercondutividade trivial *s-wave*. Na fase *p-wave* o *gap* é maximizado quando  $\Delta/V_z = 0.5$  e  $m\alpha^2/V_z \gg 1$ . No entanto o *gap* se anula para  $m\alpha^2/V_z \rightarrow 0$  pois o pareamento *p-wave* em  $k_f$  se anula neste limite. Em (b) fixamos  $m\alpha^2/V_z = 0.1$  e variamos  $\mu/V_z$  e  $\Delta/V_z$  para mostrar que o *gap* na fase *p-wave* permanece mesmo quando  $V_z$  excede  $m\alpha^2$  por mais de uma ordem de grandeza . . . . . 41

Figura 12 – Relação de dispersão do Hamiltoniano <i>p-wave</i> em diferentes casos. (a) $\mu > 0$ e $m = 1$ , a linha tracejada é para $\Delta = 0$ enquanto a linha sólida para $\Delta \neq 0$ . (b) $\Delta \neq 0$ , a linha sólida corresponde a $\mu > 0$ , a tracejada a $\mu = 0$ e a pontilhada para $\mu < 0$ . . . . .	44
Figura 13 – Figura esquemática da densidade de probabilidade $ \varphi(x) ^2$ do estado de energia nula em função da posição. . . . .	46
Figura 14 – Diagrama ilustrativo dos sítios da cadeia de Kitaev na representação de Majorana para $\Delta = t = 0$ e $\mu \neq 0$ . Cada retângulo representa um sítio eletrônico $c_j$ que comporta dois operadores de Majorana $\gamma_{B,j}$ (circulo vermelho) e $\gamma_{A,j}$ (circulo azul). Os acoplamentos entre Majoranas no mesmo sitio está representado pelos retângulos azuis. . . . .	52
Figura 15 – Diagrama ilustrativo dos sítios da cadeia de Kitaev na representação de Majorana para $\Delta = t$ e $\mu = 0$ . Cada retângulo representa um sítio eletrônico $c_j$ que comporta dois operadores de Majorana, $\gamma_{B,j}$ (círculo vermelho) e $\gamma_{A,j}$ (círculo azul). Os acoplamentos entre Majoranas de sítios vizinhos esta representado pelos retângulos rosa. Note que os operadores $\gamma_{B,1}$ e $\gamma_{A,N}$ estão desacoplados do restante da cadeia. . . . .	52
Figura 16 – Auto-valores para uma cadeia de Kitaev com $N = 50$ sítios em função do potencial químico $\mu$ . Usando como parâmetros $ \Delta  = t$ . . . . .	53
Figura 17 – Relações de dispersão $E(k)$ para a cadeia de Kitaev para $\Delta = 0.4t$ e vários valores de $\mu$ . Em (a) vemos o fechamento do <i>gap</i> para $\mu = 2t$ em $k = 0$ e em (b) o fechamento para $\mu = -2t$ em $k = \pm\pi$ . Esses dois valores de $\mu$ definem duas fases <i>gapped</i> distintas. Como podemos ver em (c) e (d) temos que $ \mu  < 2t$ e $ \mu  > 2t$ respectivamente correspondem a duas fases com <i>gap</i> porém qualitativamente distintas. Importante salientar que não podemos variar $\mu$ entre estas fases continuamente sem fechar do <i>gap</i> (o fechamento sempre ocorre para $\mu = \pm 2t$ ). . . . .	59
Figura 18 – Sistema composto por um quantum-dot conectado a dois contatos metálicos e acoplado lateralmente a duas cadeias de Kitaev. . . . .	61
Figura 19 – Processo iterativo utilizado para se calcular as funções de Green de uma cadeia finita. . . . .	67
Figura 20 – Diagrama do sistema composto por um ponto quântico não-interagente <i>spinless</i> com um nível com energia $\varepsilon_d$ acoplado a duas cadeias de Kitaev através de $t_0$ . . . . .	68
Figura 21 – Diagrama esquemático de um ponto quântico de um nível ( <i>spinless</i> ) acoplado a dois contatos metálicos . . . . .	74

- Figura 22 – Densidade de estados do ponto  $\rho_{dot}(\varepsilon)$  acoplado a dois contatos metálicos. Observamos que  $\rho_{dot}(\varepsilon)$  tem a forma de uma Lorentziana centrada em  $\varepsilon_{dot} + \Lambda_L$ , onde  $\varepsilon_{dot}$  é a energia do ponto controlada pela voltagem  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ). O alargamento dos picos é proporcional a  $\Gamma_L$ . No gráfico assumimos três valores distintos para  $\varepsilon_{dot}$ :  $-5\Gamma_L$  (linha vermelha), 0 (linha verde) e  $5\Gamma_L$  (linha azul) com  $t = 10 \text{ meV}$ ,  $\Gamma_L = 0,004t = 40 \mu\text{eV}$ ,  $\Lambda_L = 0.1t = 1 \text{ meV}$  e  $\varepsilon_f = 0$ . . . . . 75
- Figura 23 – Condutância no ponto quântico em função da potencial aplicado  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ). O pico da Lorentziana está centrado em  $\varepsilon_{dot} = 0$  quando o nível do ponto está alinhado com a energia de Fermi dos contatos  $\varepsilon_f = 0$ . . . . . 76
- Figura 24 – Diagrama de um ponto quântico *spinless* de um nível sem interação acoplado lateralmente a uma cadeia de Kitaev e a dois contatos metálicos. A energia do ponto é controlada pela voltagem  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ). . . . . 77
- Figura 25 – Densidade de estados de *bulk*  $\rho_{bulk}$  (curva tracejada vermelha) e do primeiro sítio  $\rho_{edge}$  (curva sólida preta) de uma cadeia de Kitaev desacoplada do ponto quântico na fase topológica com  $\mu = 0$ . O termo de supercondutividade  $\Delta$  gera a abertura de um *gap* em torno da energia de Fermi  $\varepsilon_f = 0$  presente tanto na densidade de estados de *bulk* quanto na das extremidades. No primeiro sítio observamos o surgimento de um pico no meio do *gap* em  $\varepsilon = 0$  que corresponde ao modo de Majorana. . . . . 78
- Figura 26 – Densidade de estados do ponto quântico (a) e do primeiro sítio da cadeia (b) em função da energia  $\varepsilon$  para diferentes valores de  $t_0$ , com  $\varepsilon_{dot} = -5\Gamma_L$ ,  $\Delta = 0.2t$ ,  $\Gamma_L = 0.004t$  e  $t = 10 \text{ meV}$ . . . . . 78
- Figura 27 – O “vazamento” do modo de Majorana inicialmente presente no primeiro sítio da cadeia de Kitaev para o ponto quântico pode ser observado ao variarmos o acoplamento  $t_0$  entre a cadeia e o ponto e plotarmos as alturas máximas dos pico em  $\varepsilon = 0$  em ambos. À medida que o acoplamento entre a cadeia e o ponto ( $t_0$ ) aumenta observamos a diminuição do pico de Majorana em  $\tilde{\rho}_{edge}$  (linha vermelha) e o progressivo surgimento deste pico no ponto,  $\tilde{\rho}_{dot}$  (linha verde). . . . . 79
- Figura 28 – Diagramas das densidades locais de estados para um ponto quântico com as ressonâncias de Majorana (a) e Kondo (b). Embora o nível fixo em  $\varepsilon_f$  (nível de Fermi dos contatos) produza um pico na condutância de  $e^2/h$  nos dois casos, ao contrário do efeito Kondo este nível só permanece fixo em  $\varepsilon_f$  para valores de  $\varepsilon_{dot}$  acima de  $\varepsilon_f$  quando existe Majorana. . . . . 80
- Figura 29 – Mapa de cores da densidade local de estados do ponto  $\rho_{dot}$  vs.  $\varepsilon$  e  $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ . Com a cadeia na fase topológica ( $\mu = 0 < t = 1$ ) e acoplamento dot-cadeia  $t_0 = 10\Gamma_L$ . A linha tracejada corresponde ao gráfico (a) da Fig.26. . . . . 80

Figura 30 – Mapa de cores da densidade local de estados para Majoranas “A” e “B” no ponto quântico (a) e (b) e no primeiro sítio da cadeia (c) e (d), respectivamente como função de $\varepsilon$ e $eV_g$ para $t = 10 \text{ meV}$ , $\Delta = 0.2t$ , $\Gamma_L = 40 \mu\text{eV}$ , $t_0 = 10\Gamma_L$ e $\mu = 0$ .	81
Figura 31 – Diagrama dos acoplamentos em termos dos operadores de Majorana para o sistema composto de um ponto quântico com nível em $\varepsilon_{dot}$ acoplado através de $t_0$ a uma cadeia de Kitaev com $N = 2$ sítios. Eq.5.15.	83
Figura 32 – Condutância $G[e^2/h]$ medida através do ponto quântico em função de $eV_g$ para diferentes valores de $\mu$ . As curvas verde e vermelha mostram o plateau de condutância fixa em $e^2/2h$ para uma cadeia de Kitaev na fase topológica ( $\mu < 2t$ ). A curva azul corresponde $\mu = 2.5t$ mostra o perfil de ressonância apresentando um pico de condutância em $e^2/h$ quando o nível de energia do ponto coincide com a energia de Fermi dos contatos $eV_g = 0$ . Neste regime a cadeia de Kitaev está na fase trivial e portanto não há Majorana acoplado ao ponto quântico.	84
Figura 33 – Condutância $G$ em função do potencial químico $\mu$ . Em (a) $\varepsilon_{dot} = 0$ e $\Delta = 0.2t$ para diferentes valores de $t_0$ e em (b) $\varepsilon_{dot} = 0$ e $\Delta = 0$ não há modo de Majorana e a cadeia se torna um terceiro contato metálico. Neste caso para $t_0 = 15.8\Gamma_L$ obtemos um pico de condutância de $e^2/2h$ idêntico ao de Majorana. Em (c) fixamos $t_0 = 10\Gamma_L$ e variamos $\varepsilon_{dot}$ para $\Delta = 0.2t$ e o mesmo em (d) para $\Delta = 0$ . As regiões sombreadas correspondem a fases triviais ( $\mu > 2t$ ).	85
Figura 34 – Densidade de estados no ponto quântico $\rho_{dot}[1/t]$ vs. $\varepsilon$ acoplado a duas cadeias idênticas com $\Delta\phi = 0$ , $\mu = 0$ e $t_0 = t = 10 \text{ meV}$ . Fazemos $\varepsilon_{dot} = \mu$ de forma que nível de energia do ponto seja igual ao dos sítios das cadeias de Kitaev. Nestas condições o ponto se comporta como um sítio de <i>bulk</i> de uma única cadeia na fase topológica como mostrada na Fig. 25(linha tracejada).	86
Figura 35 – Densidade de estados no ponto quântico $\rho_{dot}[\times\pi\Gamma_L]$ acoplado a duas cadeias de Kitaev em função de $\Delta\phi$ com $t_0 = 10\Gamma_L$ , $\varepsilon_{dot} = -5\Gamma_L$ , $\Gamma_L = 0.004t$ e $t = 10 \text{ meV}$ . A curva verde corresponde a $\Delta\phi = \pi$ e apresenta um pico de Majorana em $\varepsilon = 0$ semelhante ao da Fig. 26 (a) quando há apenas uma cadeia acoplada ao ponto. Demonstramos que esse pico corresponde a um Majorana efetivo formado pelos dois modos de Majorana das cadeias acoplados ao ponto. A medida que variamos $\Delta\phi$ o pico de Majorana se desdobra em dois laterais, o que corresponde a hibridização dos dois Majoranas que estão acoplados ao ponto.	87

Figura 37 – Mapas de cor da densidade de estados no ponto quântico  $\rho_{dot}$  (escala de cor) vs.  $\varepsilon/\Gamma_L$  variando a energia do ponto através de  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ). Em (a) fixamos  $\Delta\phi = \pi$  e observamos a existência do pico de Majorana em  $\varepsilon = 0$  para todos os valores de  $V_g$  calculados. Em (b) fixamos  $\Delta\phi = \pi/2$  e estão presentes dois picos laterais resultantes da hibridização do modo de Majorana, em (c)  $\Delta\phi = 0$ . A linha tracejada em  $eV_g/\Gamma_L = 5$  de (a), (b) e (c) corresponde respectivamente às curvas verde, vermelha e azul da Fig.35.

Figura 38 – Condutância através do ponto quântico  $G[e^2/h]$  em função de  $\mu$  para diferentes valores de acoplamento entre o ponto e as cadeia  $t_0$ . Quando  $\Delta\phi = 0$  (a) observamos que a condutância permanece nula para  $|\mu| < 2t$  independentemente de  $t_0$ . Já para  $\Delta\phi = \pi$  surge um *plateau* na condutância em  $e^2/2h$  quando as cadeias estão na fase topológica ( $|\mu| < 2t$ ) para todos valores de  $t_0$  considerados.

Figura 39 – Condutância através do ponto quântico  $G[e^2/h]$  em função de  $V_g$  para diferentes valores de  $\mu$ . Acima: para  $\Delta\phi = \pi$  observamos um *plateau* na condutância em  $e^2/2h$  quando as cadeias estão na fase topológica ( $\mu < 2t$ ). Abaixo: para  $\Delta\phi = 0$  a condutância é nula quando  $\mu < 2t$ . . . 91

Figura 40 – Mapa de cores da condutância  $G[e^2/h]$  através do ponto quântico em função de  $\Delta\phi$  e  $\mu$  para duas cadeias simétricas com  $eV_g = 0$ ,  $\Delta = 0.2t$  e  $t = 10 \text{ meV}$ . A condutância apresenta periodicidade de  $2\pi$  assumindo o valor de  $e^2/2h$  sempre que  $\Delta\phi = (2n + 1)\pi$  onde  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . . . 92

Figura 41 – Diagrama do modelo efetivo composto por um ponto quântico *spinless* de um nível em  $\varepsilon_{dot}$  controlado pela voltagem  $V_g$  e acoplado a dois contatos metálicos (S e D) modelados por duas cadeias *tight-binding* e lateralmente acoplado a dois modos de Majoranas ( $\gamma_{lN}^A$  e  $\gamma_{r1}^B$ ) com fases  $\phi_L$  e  $\phi_R$ . . . 92

Figura 42 – Densidade de estados no ponto quântico usando a Eq.5.35,  $\rho_{dot}(\omega) = -(1/\pi) Im [G_{dot}(\omega)]$  para  $t_{0,R} = t_{0,L} = 5\Gamma_L$  e  $\varepsilon_{dot} = 0$ . De forma coerente com os resultados obtidos numericamente na Fig.35 da Seção 5.2, observamos um pico em  $\omega = 0$  para  $\Delta\phi = \pi$  que sofre um desdobramento resultante da fusão dos modos de Majorana no ponto.

Figura 43 – Energia dos auto-estados para  $N = 30$  sitios em cada cadeia com  $\varepsilon_{dot} = 0.5t$ ,  $\mu = 1.5t$ ,  $|\Delta| = 0.5t$ ,  $t_0 = 1.0t$  e  $t = 10\text{meV}$ . Observamos que para  $\Delta\phi = \pi$  (a) existem dois auto-estados com energia zero enquanto para  $\Delta\phi = 0$  (a) apenas um se mantém e outro estado assume energia finita. A distribuição espacial destes estados está mostrada na Fig. 44. . . . .

97

Figura 44 – Distribuição espacial da função de onda dos auto-estados de energia nula para  $N = 30$  sítios em cada cadeia, com  $\varepsilon_d = 0.5t$ ,  $\mu = 1.5t$ ,  $|\Delta| = 0.5t$ ,  $t_0 = 1.0t$  e  $t = 10\text{ meV}$ . Em (a) para  $\Delta\phi = \pi$ ,  $\psi_1$  se localiza nas extremidades externas das cadeias enquanto  $\psi_2$  se localiza em torno do ponto. Quando  $\Delta\phi = 0$ ,  $\psi_2$  assume energia finita devido a hibridização dos Majoranas em torno do ponto, enquanto  $\psi_1$  permanece com energia zero. . . . .

97

Figura 45 – Energia positiva dos auto-estados obtidos pela diagonalização de  $\mathcal{H}_{BdG}$  variando  $\mu$  simultaneamente nas duas cadeias com  $N = 30$  sítios em cada com  $\varepsilon_{dot} = 2.0t$ ,  $\Delta = t$ ,  $t_0 = t$  e  $t = 10\text{ meV}$ . Em (a) fazemos  $\Delta\phi = 0$  e encontramos apenas um estado fermiônico (curva azul) em  $E = 0$  que permanece fixo nesta energia até a transição de fase ocorrer em torno de  $\mu = 2t$ . Associamos este estado ao formado pelos Majoranas externos do sistema permanecem desacoplados independente de  $\Delta\phi$ . O estado com energia finita (curva vermelha) é resultante da fusão entre os Majorana do ponto. Em (b) quando fazemos  $\Delta\phi = \pi$  encontramos dois estados fermiônicos em  $E = 0$  que permanecem fixos nessa energia até  $\mu = 2t$  sem se acoparem. . . . .

98

Figura 46 – (a) Energia positiva dos auto-estados em função de $\Delta\phi$ para $N = 50$ sítios em cada cadeia com $\mu = 1.75t$ , $\varepsilon_{dot} = 0.1t$ , $t_0 = t$ e $t = 10 \text{ meV}$ para ambas. A linha tracejada mostra o <i>gap</i> efetivo $\Delta_{eff}$ que separa os estados localizados do quasi-contínuo. A curva azul corresponde a auto-energia $\varepsilon_1(\phi)$ do auto-estado formado por $d_1^\dagger(\phi)$ composto majoritariamente pelos Majoranas externos pois permanece em $\varepsilon = 0$ com pouca dependência com $\Delta\phi$ , já a curva vermelha corresponde a auto-energia $\varepsilon_2(\phi)$ do auto-estado formado por $d_2^\dagger(\phi)$ composto pelos Majoranas em torno do ponto e tem uma forte dependência com $\Delta\phi$ . As energias dos estados de muitos-corpos $ n_1 n_2\rangle$ formados pelos dois estados do <i>gap</i> [curvas azul e vermelha de (a)] são $E_{00} = \frac{1}{2}(-\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ , $E_{11} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$ , $E_{10} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ e $E_{01} = \frac{1}{2}(-\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$ . Em (b) fizemos $\mu = t$ onde não ocorre a fusão dos Majoranas e portanto os estados de mesma paridade são degenerados com energia zero. Este regime remonta ao exemplo mostrado no Cap. 1 e apresenta corrente a.c. de Josephson com período $4\pi$ . Em (c) tomamos $\mu = 1.75t$ onde há fusão dos Majoranas no nosso modelo e ocorre a abertura de um <i>anti-crossing</i> $\delta_\pi$ presente em $\Delta\phi = \pi$ e o destacamento $\delta_0 = 0.138t = 13.8 \text{ meV}$ dos estados do quasi-contínuo. Em SAN-JOSE et al (3) é demonstrado que transientes de período $4\pi$ na corrente a.c. de Josephson podem ocorrer neste regime . . . . .	100
Figura 47 – Diagrama esquemático de um ponto quântico de um nível <i>spinless</i> acoplado a dois contatos metálicos . . . . .	118
Figura 48 – Densidade de estados constante dos contatos metálicos $\rho_0(\omega)$ . . . . .	120
Figura 49 – (a) Densidade de estados no ponto quântico $\pi\Gamma_L \times \rho_{dot}(\varepsilon)$ em função da energia $\varepsilon/\Gamma_L$ para $\varepsilon_{dot} = 0$ (b) Número de ocupação médio $\langle n \rangle$ de um ponto quântico em função da sua energia $\varepsilon_{dot}/\Gamma_L$ para $\varepsilon_f = 0$ . . . . .	122
Figura 50 – Diagrama esquemático de um ponto quântico acoplado a um contato metálico. . . . .	122
Figura 51 – Densidade de estados para uma cadeia <i>tight-binding</i> semi-infinita $2\pi \times \rho(\omega)$ em função de $\omega/t$ de obtida pela Eq.B.42.. . . . .	124
Figura 52 – Trajetória de $\hat{\mathbf{h}}(k)$ quando $k$ varia de 0 a $\pi$ nas fases trivial (a) e topológica (b) . . . . .	126

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>21</b>
1.1	<b>Férmions de Majorana</b>	<b>21</b>
1.2	<b>Realização de Majoranas em sistemas de matéria condensada</b>	<b>24</b>
1.3	<b>Assinaturas experimentais de Majoranas</b>	<b>26</b>
1.3.1	Pico de condução a voltagem zero	26
1.3.2	Efeito Josephson de período $4\pi$	27
1.4	<b>Motivações</b>	<b>29</b>
1.5	<b>Objetivos do trabalho e outline</b>	<b>30</b>
<b>2</b>	<b>MAJORANAS EM ESTADO SÓLIDO</b>	<b>33</b>
2.1	<b>Supercondutividade <math>p</math>-wave em fios quânticos</b>	<b>33</b>
2.1.1	Origem da supercondutividade $p$ -wave	38
2.1.2	Modelo efetivo $p$ -wave	41
2.2	<b>Estados ligados de Majorana</b>	<b>43</b>
<b>3</b>	<b>CADEIA DE KITAEV</b>	<b>49</b>
3.1	<b>Aproximação <i>tight-binding</i></b>	<b>49</b>
3.2	<b>Cadeia de Kitaev</b>	<b>51</b>
3.2.1	Casos especiais	51
3.2.2	Caso geral	55
3.3	<b>Propriedades de <i>bulk</i> e diagrama de fase</b>	<b>57</b>
<b>4</b>	<b>DESENVOLVIMENTO</b>	<b>61</b>
4.1	<b>Formalismo das funções de Green</b>	<b>61</b>
4.2	<b>Formalismo de Bogoliubov-de Gennes</b>	<b>67</b>
4.2.1	Ponto quântico acoplado a uma cadeia	68
4.2.2	Ponto quântico acoplado a duas cadeias	71
4.3	<b>Conclusões</b>	<b>72</b>
<b>5</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>73</b>
5.1	<b>Ponto quântico acoplado a dois contatos metálicos</b>	<b>73</b>
5.2	<b>Resultados numéricos</b>	<b>76</b>
5.2.1	Densidade de estados	77
5.2.2	Condutância através do ponto quântico	83
5.3	<b>Ponto quântico acoplado a duas cadeias de Kitaev</b>	<b>85</b>
5.3.1	Densidade de estados	85

5.3.2	Condutância . . . . .	90
<b>5.4</b>	<b>Resultados analíticos . . . . .</b>	<b>92</b>
5.5	Diagonalização do Hamiltoniano no formalismo de Bogoliubov-de Gennes . . . . .	96
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES . . . . .</b>	<b>101</b>
 <b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>		<b>103</b>
 <b>APÊNDICE A – FUNÇÕES DE GREEN . . . . .</b>		<b>107</b>
<b>A.1</b>	<b>Definição . . . . .</b>	<b>107</b>
A.1.1	Função espectral . . . . .	112
A.1.2	Densidade local de estados . . . . .	113
<b>A.2</b>	<b>Equação de movimento . . . . .</b>	<b>114</b>
 <b>APÊNDICE B – CÁLCULO DA FUNÇÃO DE GREEN PELO MÉTODO DA EQUAÇÃO DE MOVIMENTO . . . . .</b>		<b>117</b>
<b>B.1</b>	<b>Elétrons livres . . . . .</b>	<b>117</b>
<b>B.2</b>	<b>Ponto quântico acoplado a dois contatos metálicos . . . . .</b>	<b>118</b>
<b>B.3</b>	<b>Cadeia <i>tight-binding</i> semi-infinita . . . . .</b>	<b>122</b>
 <b>APÊNDICE C – INVARIANTE TOPOLOGICO . . . . .</b>		<b>125</b>

# 1 Introdução

## 1.1 Férmiões de Majorana

Os férmiões de Majorana tiveram sua origem na física de partículas, a partir do trabalho do físico italiano Ettore Majorana que propôs em 1937 (4) uma solução real para a equação de Dirac. O fato das partículas serem descritas por uma solução real implica que essas são suas próprias antipartículas. Em segunda quantização isso é expresso pela igualdade,

$$\gamma = \gamma^\dagger, \quad (1.1)$$

onde  $\gamma$  é um operador hermitiano.

Embora os bósons sejam frequentemente suas próprias antipartículas, não se conhece nenhum férnion elementar com esta propriedade. Desde o trabalho de Majorana tentativas de encontrar tais partículas na natureza se focaram em experimentos com neutrinos (5). Estes experimentos buscam geralmente por duplos decaimentos  $\beta$  sem neutrinos. Em um decaimento  $\beta$  convencional um nêutron ( $n$ ) decai mediado pelo bóson  $W^-$  em um próton ( $p$ ), um elétron ( $e^-$ ) e um neutrino ( $\nu_e$ ). Já no duplo decaimento  $\beta$  sem neutrino (Fig. 1) dois nêutrons decairiam em dois prótons e dois elétrons sem emitir qualquer neutrino. Este processo só é possível quando o neutrino é sua própria antipartícula, portanto um férnion de Majorana. Quando uma partícula é sua própria antipartícula, criar ou aniquilar esta partícula é em certo sentido o mesmo processo. Assim, o neutrino virtual emitido por um nêutron pode ser absorvido pelo decaimento  $\beta$  do outro nêutron, sem a necessidade de se criar um neutrino real no processo (6).

Neste trabalho estaremos interessados nos estados ligados de Majorana que surgem como excitações com energia zero em sistemas de matéria condensada. Ao contrário das

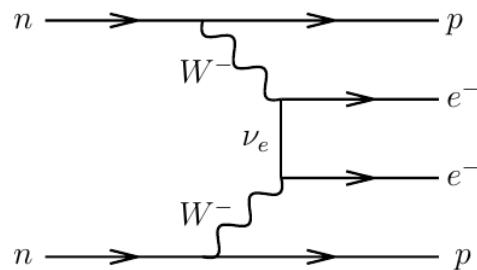


Figura 1 – Decaimento  $\beta$  duplo só é possível quando os neutrinos são suas próprias antipartículas. Assim os dois neutrinos virtuais que são emitidos pelos dois nêutrons podem se aniquilar.

Fonte: Elaborada pelo autor.

partículas previstas por Majorana como resultados da equação de Dirac, estas não são partículas fundamentais e não obedecem à estatística de Fermi-Dirac como veremos adiante. Durante esta monografia usaremos o termos Majoranas e modos de Majorana para designar sempre os *estados ligados com energia zero*.

Acima introduzimos os operadores de criação e destruição de Majorana através da Eq.1.1. De fato, qualquer sistema fermiônico ordinário pode ser discutido em termos de tais operadores de Majorana. Para ver isto basta notarmos que sempre podemos decompor operadores fermiônicos convencionais  $c_j$  (que satisfazem as relações de anticomutação  $\{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0$  e  $\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ ) em suas partes hermitiana e anti-hermitiana,

$$c_j = \frac{1}{2} (\gamma_j^A + i\gamma_j^B), \quad (1.2)$$

exatamente como números complexos podem ser decompostos em suas partes real e imaginária. Aqui  $\gamma_j^{A/B}$  são operadores hermitianos que satisfazem  $\gamma_j^{A/B} = (\gamma_j^{A/B})^\dagger$  e escrevemos a parte anti-hermitiana de  $c_j$  como  $i\gamma_j^B$ . Expressando  $\gamma$  em termos dos operadores de férmons originais ( $c_i$ ) pela inversão da Eq.1.2, encontra-se que estes operadores satisfazem a seguinte relação de anticomutação,

$$\{\gamma_i^\alpha, \gamma_j^\beta\} = 2\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}, \quad (1.3)$$

que implica em  $(\gamma_j^\dagger)^2 = 1$ . Desta maneira podemos ver que criar dois Majoranas retorna o sistema para o estado inicial, isso é coerente para uma partícula que é sua própria antipartícula - o segundo Majorana simplesmente aniquila o primeiro. Ao contrário dos férmons convencionais, os modos de Majorana não possuem ocupação bem definida pois  $\hat{n} = \gamma^\dagger\gamma = 1$  e portanto não é possível falar em espaço de Fock. Além disso, os Majoranas não obedecem o princípio de Pauli que implica que os operadores ao quadrado seja zero  $(c^\dagger)^2 = 0$  e indica que um estado pode ser ocupado por no máximo uma partícula.

Há algumas propriedades que tornam os modos de Majorana interessantes e que são responsáveis pelo crescente interesse na realização destes estados. A primeira é que estados ligados de Majorana isolados têm energia de excitação zero separada das outras excitações do sistema por um *gap*. Se tivermos  $2N$  estados de Majorana podemos formar pela Eq.1.2  $N$  férmons cujas ocupações custaria zero de energia, isto implica que o estado fundamental do sistema tem degenerescência de pelo menos  $2^N$ . Estas degenerescências devem ser não-locais (as funções de onda dos  $N$  estados fermiônicos com energia zero são formadas pelas funções dos modos de Majoranas distantes entre si) e assim oferecem uma proteção natural contra decoerência, principal obstáculo para a realização da computação quântica. (7)

A segunda propriedade é a que a estatística de troca dos estados ligados de Majorana não é bosônica nem fermiônica mas obedece a chamada estatística de anyons *não Abelianos*.

Quando se faz a troca de dois Majoranas (operação também chamada de *braiding*) o estado resultante do sistema não permanece inalterado (como ocorre para bósons) nem é multiplicado por um sinal de menos (como nos férmons) ou mesmo multiplicado por um fator de fase geral (como ocorre para os chamados anyons Abelianos). O estado final pode mudar para um estado fundamentalmente diferente do inicial e como resultado, operações de troca subsequentes geralmente não comutam, portanto levam o nome de “não-Abelianas”. (5)

Estas duas propriedades tornam os Majoranas possíveis candidatos para a implementação da computação quântica topológica. Nas propostas de se utilizar anyons não-Abelianos para computação existem basicamente dois modelos chamados de *anyons* de Ising e *anyons* de Fibonacci, os modos de Majorana podem ser mapeados no primeiro modelo que não garante computação quântica universal. (8) No trabalho seminal de KITAEV. (9), foi proposto uma forma de codificar informação dentro do subespaço do estado fundamental degenerado associado com os Majoranas e a processar essa informação através de operações de *braiding*. O fato da degenerescência do estado fundamental associada com os Majoranas ser robusta sempre que os Majoranas permaneçam espacialmente isolados (se os Majoranas são trazidos próximo um do outro ocorre o processo de fusão descrito adiante) provê uma proteção contra perturbações locais no sistema, pois estes estados estão em  $\varepsilon = 0$  e separados dos demais por um *gap* de energia, uma transição entre eles é dificultada. Além disso uma consequência dos Majoranas serem suas próprias “antipartículas” (ou em analogia em matéria condensada, “buracos”) é a de que eles não podem possuir carga, caso contrário deveriam ser de sinais opostos para partícula e antipartícula, dessa forma não são afetados por campos eletromagnéticos externos.

Resta-nos explicar as seguintes questões: se pela Eq.1.2 podemos descrever um sistema fermiônico ordinário, como por exemplo uma cadeia *tight-binding*, em termos de operadores dos modos de Majorana, o que torna esta representação especial? Não seria apenas uma outra base qualquer? Para responder a estas perguntas temos que ressaltar que em primeiro lugar, estaremos interessados em sistemas em que os operadores de Majorana são auto-operadores do sistema, ou seja, sistemas em que os auto-estados possam ser descritos por operadores que obedecem a Eq.1.1. Em segundo lugar é importante que estes estados sejam não-locais, ou seja, que estejam isolados espacialmente ou distantes o suficiente para que a sobreposição entre suas funções de onda possa ser desprezada. Nestas condições o estado fermiônico é degenerado em energia zero e sua presença caracteriza uma fase topológica não-trivial do sistema (7) (um exemplo deste tipo de sistema que usaremos nesta dissertação é a cadeia de Kitaev (10)).

Para finalizar esta seção iremos descrever o processo chamado de fusão que corresponde a formação de um estado fermiônico com energia finita quando dois modos de Majorana se acoplam, ou, o que é equivalente a dizer, quando suas funções de onda se sobrepõem. Pela Eq.1.2 podemos sempre criar um estado fermiônico  $c^\dagger$  a partir de dois

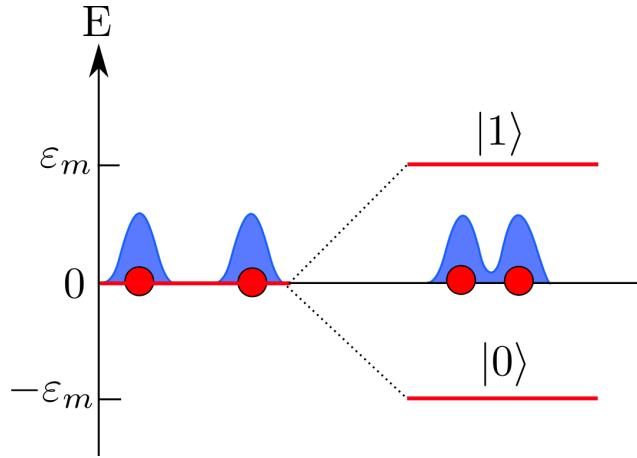


Figura 2 – Diagrama ilustrativo da fusão de dois modos de Majorana em um modo fermiônico devido ao acoplamento entre eles modelada pelo Hamiltoniano  $H = i\varepsilon_m \gamma_1 \gamma_2 = \varepsilon_m (2\hat{n} - 1)$ . Inicialmente enquanto afastados os modos possuem energia zero, a medida que se aproximam espacialmente e suas funções de onda começam a se sobrepor estes modos se hibridizam e formam um férnion convencional  $c = (\gamma_1 + i\gamma_2) / 2$  como em um sistema de dois níveis com energias finitas  $\pm\varepsilon_m$  que depende de sua ocupação  $\hat{n} = c^\dagger c$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

modos de Majorana  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$ . Se não houver termos acoplando os Majoranas no Hamiltoniano, ocupar este estado fermiônico não gasta energia do sistema. No entanto se houver um acoplamento entre  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  devido a uma sobreposição das suas funções de onda obteremos um termo do tipo  $H = i\varepsilon_m \gamma_1 \gamma_2$ , onde  $\varepsilon_m \propto e^{-L/\xi}$  em que  $L$  é a distância entre os modos e  $\xi$  é uma escala de distância (nas implementações de Majoranas em sistemas supercondutores  $\xi$  será o comprimento de coerência supercondutora). Invertendo a Eq.1.2 e substituindo em  $H$  encontramos  $H = \varepsilon_m (2\hat{n} - 1)$ , onde  $\hat{n} = c^\dagger c$  é o operador número. Os dois estados fermiônicos resultantes  $|0\rangle$  e  $|1\rangle = c^\dagger |0\rangle$  tem energias diferentes de zero,  $-\varepsilon_m$  e  $+\varepsilon_m$  respectivamente como mostrado na Fig. 2.

## 1.2 Realização de Majoranas em sistemas de matéria condensada

Existem propostas que visam realizar os estados ligados de Majorana em sistemas de matéria condensada utilizando diversos sistemas tais como o efeito Hall quântico fracionário em  $\nu = 5/2$  (11, 12), centros de vórtices em supercondutores *p-wave* como  $Sr_2RuO_4$  (13) e átomos frios (14, 15). No entanto pelas dificuldades experimentais que estes sistemas oferecem novas propostas surgiram que se utilizam de materiais semicondutores (16, 17) e isolantes topológicos (18) acoplados a supercondutores convencionais na presença de magnetos ou campos magnéticos externos como mostrado na Fig. 3.

Os supercondutores são uma excelente plataforma para o aparecimento de Majoranas.

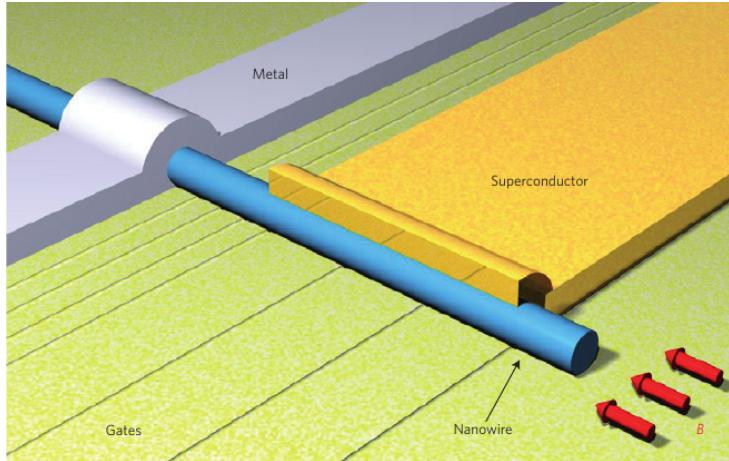


Figura 3 – Um típico *setup* experimental para a detecção de modos de Majorana em fios quânticos. O fio é posto sobre um substrato contendo os *gates* metálicos e coberto por eletrodos metálicos normal (cinza) e supercondutor (amarelo). As setas vermelhas indicam o campo magnético externo aplicado.

Fonte: Adaptada de FRANZ. (20)

Seu estado fundamental é formado por um condensado de pares de Cooper (estado ligado composto por dois elétrons), cujas excitações envolvem superposições de elétrons e buracos que violam a conservação de carga. A maioria dos supercondutores convencionais são ditos *s-wave* e são bem descritos pela teoria de campo médio BCS (19) e pelo formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) que descreve excitações como uma superposição entre elétrons e buracos. Esquematicamente estas excitações podem ser escritas em segunda quantização por  $\gamma = uc_{\uparrow}^{\dagger} + vc_{\downarrow}^{\dagger}$ , onde  $c_{\uparrow/\downarrow}^{\dagger}$  é o operador de criação de fermions com spin  $\uparrow$  ou  $\downarrow$ . Notamos que estas excitações continuam distintas de  $\gamma^{\dagger} = v^*c_{\downarrow}^{\dagger} + u^*c_{\uparrow}^{\dagger}$ . Para que obedeçam a condição de Majorana,  $\gamma = \gamma^{\dagger}$ , é necessário que, além de satisfazer a condição  $u = v^*$ , sejam fermions *spinless*, isto é, tenham apenas uma componente de spin “congelada” através de polarização, por exemplo.

Como será discutido adiante na Sec. 2.1.1 pelo princípio de exclusão de Pauli pares de Cooper *spinless* só podem surgir se a paridade do potencial de pareamento for ímpar com relação ao momento, o que corresponde à formação de um estado de tripleto que constitui os chamados supercondutores *p-wave* ao contrário dos supercondutores chamados de *s-wave* onde os elétrons formam estados de singuleto. Os supercondutores *p-wave* têm atraído grande atenção pois possuem fases topológicas distintas das triviais que apresentam estados de bordas (*edge states*). No caso 1D, modos com energia nula se localizam nas interfaces com o vácuo do sistema, enquanto em 2D esses modos se formam em vórtices dos supercondutores (vórtices de Abrikosov). (13) Podemos constatar que esses modos de energia nula que se formam em supercondutores *p-wave* são estados de Majorana e surgem como excitações no meio do *gap*. (5, 21).

No entanto a ocorrência de supercondutividade *p-wave* é naturalmente rara e instável devido a defeitos intrínsecos do material. Uma alternativa é compor materiais com a finalidade de se obter um modelo efetivo que apresente esse tipo de supercondutividade. Um meio

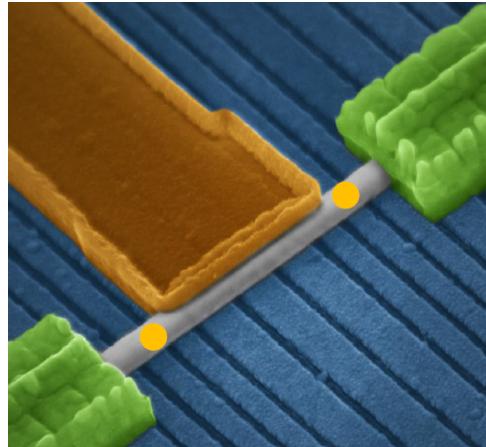


Figura 4 – Imagem colorida obtida através de microscopia eletrônica de varredura de um dispositivo híbrido semicondutor-supercondutor. O fio quântico de InSb está mostrado em cinza, o metal supercondutor (NbTiN) em dourado, os *gates* em azul. Os contatos verdes (metal normal) ligados ao fio quântico são usados para se detectar modos de Majorana como discutido em (23). As posições esperadas dos modos de Majorana são mostradas pelos pontos laranja.

Fonte: Adaptada de MOURIK et al.(23)

para se obter supercondutividade *p-wave* em sistemas 1D foi proposto por (16) e (22) e se baseia em um nanofio semicondutor com interação spin-órbita de Rashba (geralmente InSb ou InAs) em proximidade com um supercondutor convencional e magnetização que pode ser obtida por proximidade com um magneto ou através de um campo magnético externo. Na Fig. 4 temos uma imagem obtida através de microscopia eletrônica de varredura (SEM) de um *setup* experimental típico composto por um fio quântico semicondutor com contatos supercondutores (o campo magnético está aplicado perpendicularmente ao plano da figura).

O interesse nesta proposta em particular é sua conexão com o modelo da cadeia de Kitaev (10) que constitui o sistema fermiônico unidimensional mais simples a apresentar Majoranas como excitações em sua fase topológica nas suas extremidades. Por este ser a base do modelo proposto usado nesta monografia faremos no Capítulo 2 uma dedução da cadeia de Kitaev a partir de um sistema realista composto por um fio semicondutor com interação spin-órbita de Rashba, campo magnético externo e supercondutividade induzida por proximidade.

## 1.3 Assinaturas experimentais de Majoranas

### 1.3.1 Pico de condução a voltagem zero

Uma das formas mais simples de se detectar a presença de Majoranas experimentalmente em fios quânticos é através da espectroscopia por tunelamento. (24, 25) A presença de um estado de Majorana em energia zero possibilita que elétrons tunelem de contatos metálicos para o fio quântico e vice-versa sem custo energético. Isto dá origem a um pico

a voltagem zero nas medidas de condutância diferencial ( $dI/dV$ ) e uma assinatura clara dos Majoranas seria a persistência deste pico ao serem variados os parâmetros do sistema como na Fig. 5 adaptada de MOURIK et al. (23) onde a elipse vermelha indica Em sistemas realistas, no entanto, picos a voltagem zero também podem surgir de diferentes fenômenos o que tornam estas medidas ainda controversas. (20)

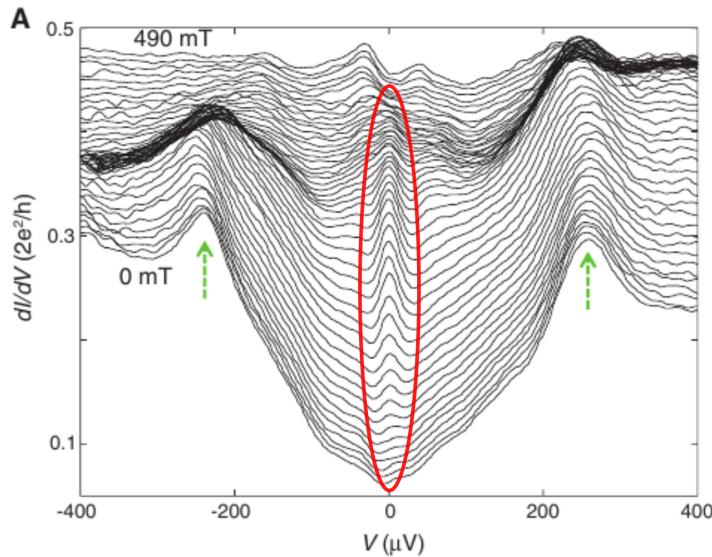


Figura 5 – Espectroscopia diferencial  $dI/dV$  em função de  $V$  obtida experimentalmente do setup da Fig.3 em 70 mK para diferentes valores do campo magnético (de 0 a 490 mT em passos de 10 mT). A elipse vermelha indica a presença de um pico em  $V = 0$  no meio do gap induzido no fio.

Fonte: Adaptada de MOURIK et al. (23)

### 1.3.2 Efeito Josephson de período $4\pi$

O método de detecção experimental discutido anteriormente nos possibilita deduzir a existência dos modos de Majorana mas não fornece informação acerca da paridade (ou ocupação) do estado fermiônico formado por eles, o que poderia ser usado como um *qubit*. (7) A paridade de um estado fermiônico criado por dois modos de Majorana  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  é definido pelo operador  $\hat{P} = -i\gamma_1\gamma_2$  e corresponde (utilizando a Eq.1.2) a  $\hat{P} = (1 - 2\hat{n})$ , onde  $\hat{n} = c^\dagger c$  é o operador número do estado fermiônico  $c = \frac{1}{2}(\gamma_1 + i\gamma_2)$ . Os auto-valores de  $\hat{P}$  são  $-1$  para o estado ocupado  $|1\rangle = c^\dagger|0\rangle$  e  $+1$  para o estado vazio  $|0\rangle$ . O operador paridade de um sistema com  $2N$  modos de Majoranas (ou o equivalente a  $N$  estados fermiônicos) é generalizado por  $\hat{P} = \sum_{j=1}^N (1 - 2c_j^\dagger c_j)$ .

Uma forma de extrair essa informação sobre a paridade é preparar o sistema em um estado fundamental e adiabaticamente aproximar dois modos de Majoranas, digamos  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$ , de forma que suas funções de onda se sobreponham. Como mencionado anteriormente a fusão destes modos pode ser modelada pelo Hamiltoniano  $H_f = i\varepsilon\gamma_1\gamma_2 = \varepsilon(2\hat{n} - 1)$  onde  $\hat{n}$  é o operador número de ocupação do estado fermiônico composto pelos Majoranas .

Assumindo  $\varepsilon > 0$  o sistema se mantém no estado fundamental com  $\hat{n} = 0$  (em  $-\varepsilon$ ) enquanto a fusão dos Majorana faz com que a ocupação deste estado,  $\hat{n} = 1$ , tenha energia finita  $+\varepsilon$ . Desta forma podemos ler a ocupação do estado ( $\hat{n}$ ) detectando a presença ou não de uma excitação no sistema com energia  $\varepsilon$ . Assim a fusão de Majoranas através de junções possibilita fazer tanto a leitura da ocupação deste estado fermiônico quanto fornece uma assinatura dos modos de Majorana.

Na Fig.6 (a,b) mostramos o esquema de um *setup* experimental básico composto por duas regiões de supercondutores topológicos 1D resultantes do efeito de proximidade a um supercondutor *s-wave* e separadas por uma região isolante. Aqui assumimos que os fios sejam longos de tal forma que a sobreposição entre os Majoranas externos  $\gamma_{3,4}$  seja desprezível. Uma junção de Josephson (26, 27) estreita o bastante para que ocorra a fusão entre  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  é formada entre os dois fios.

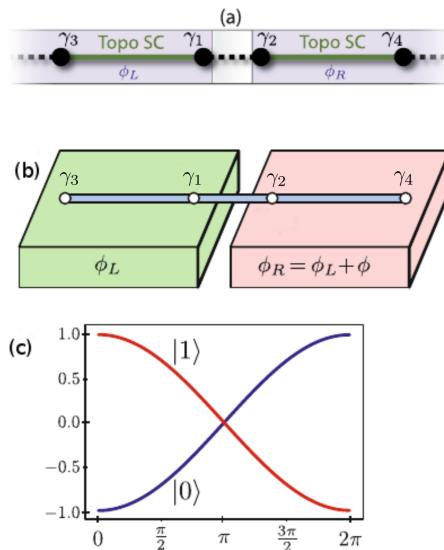


Figura 6 – (a,b) Esquema de uma junção necessário para observar o efeito Josephson fracionário de período  $4\pi$  oriundo da fusão de dois Majoranas  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  formado por dois segmentos de um fio quântico sobre um substrato supercondutor com fases distintas  $\phi_L$  e  $\phi_R$  separados por uma região. (c) As energias dos dois estados fermiônicos com diferentes paridades em função da diferença de fases supercondutoras  $\Delta\phi = \phi_R - \phi_L$ .

Fonte: Adaptada de ALICEA e SHEN. (28, 7)

Para mostrarmos o efeito na corrente devido a presença de Majoranas vamos considerar um Hamiltoniano efetivo da junção mostrada na Fig.6,

$$H_j = -\Gamma(c_{LN}^\dagger c_{R1} + H.c), \quad (1.4)$$

onde  $c_{LN}^\dagger$  e  $c_{R1}^\dagger$  são os operadores de criação de férmons dos dois lados da junção. Usando a Eq.1.2 e supondo que apenas um dos operadores de Majorana que formam os férmons  $c_{LN}$  e  $c_{R1}$  participam do acoplamento na junção (podemos assumir que o outro Majorana esteja fortemente hibridizado com o restante do fio), fazemos as mudanças  $c_{LN} \rightarrow \frac{1}{2}e^{-i\phi_L/2}\gamma_1$  e

$c_{1R} \rightarrow \frac{i}{2}e^{-i\phi_R/2}\gamma_2$  na Eq.1.4 e encontramos,

$$\begin{aligned} H_j &= -\frac{\Gamma}{2}\cos\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right)i\gamma_1\gamma_2 \\ &= -\Gamma\cos\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right)(\hat{n} - 1/2). \end{aligned} \quad (1.5)$$

Como  $[H_j, \hat{n}] = 0$  o número de ocupação  $\hat{n}$  é uma grandeza conservada. Portanto se o sistema estiver inicialmente em um estado com  $\hat{n} = n_i$  e a diferença de fase  $\Delta\phi$  em torno da junção for variada obteremos uma corrente dada por (28),

$$I_j = \frac{2e}{\hbar} \frac{d\langle H_j \rangle}{d\Delta\phi} = \frac{e\Gamma}{2\hbar} \sin\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) (2n_i - 1). \quad (1.6)$$

Assim a corrente  $I_j$  na presença de Majoranas tem periodicidade  $4\pi$  em  $\Delta\phi$  (ao contrário da periodicidade de  $2\pi$  do efeito Josephson convencional onde só há férmiões na junção) e seu sinal indica a ocupação  $n_i$  do estado fermiônico. (7)

## 1.4 Motivações

Motivados pela proposta de se utilizar um ponto quântico acoplado à extremidade de um fio quântico para a detecção local de Majorana através de cálculos de transporte (1) estendemos este modelo para dois fios quânticos topológicos modelados por cadeias de Kitaev acoplados a um ponto quântico formando um *setup* de junção supercondutora com a finalidade de estudar as propriedades de fusão dos modos de Majorana dentro do ponto.

Além disso a possibilidade de implementar nosso sistema experimentalmente nos motivou a estudar este modelo. Como mostrado na Fig.7 adaptada de DENG, et al. (29) temos um fio quântico de InSb revestido nas duas extremidades por uma liga metálica supercondutora (Ti/Nb/Al). Os segmentos de InSb cobertos pelo supercondutor Ti-Nb-Al formam dois fios quânticos topológicos em baixas temperaturas e na presença de um campo magnético externo que apresentam modos de Majorana em suas extremidades. A região de InSb que separa os dois contatos de Nb tem em torno de 150 nm e se torna um ponto quântico pela depleção eletrônica quando aplicado uma voltagem ( $V_{sd} > 0$ ).

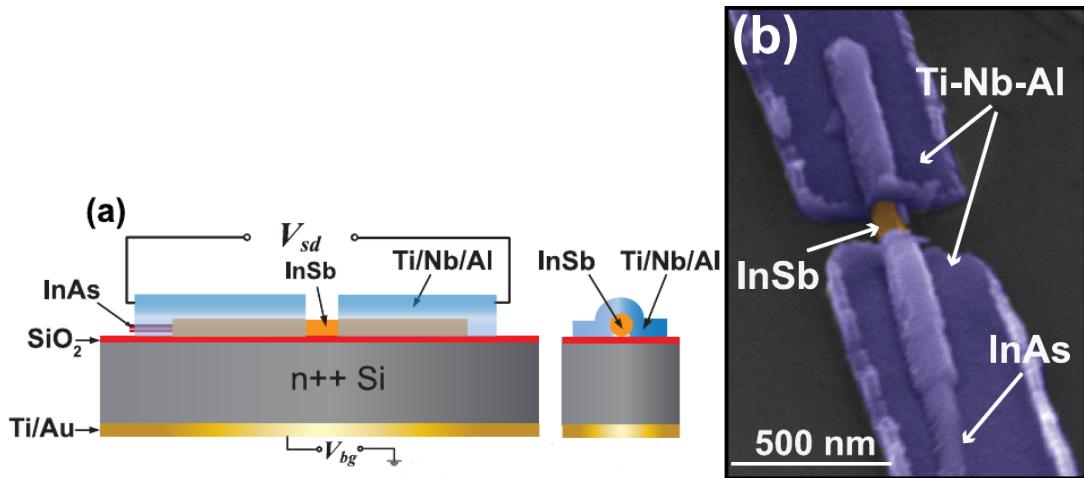


Figura 7 – (a) Diagrama esquemático da estrutura de uma junção Nb-InSb-Nb para a detecção de Majoranas. Em (b) uma imagem obtida através de microscopia por varredura eletrônica do dispositivo estudado em (29). Os segmentos de InSb cobertos pelo superconductor Ti-Nb-Al formam dois fios quânticos topológicos que apresentam modos de Majorana em suas extremidades na fase topológica não-trivial alcançada pela aplicação de um campo magnético externo perpendicular ao substrato e uma voltagem apropriada no *backgate* ( $V_{bg}$ ). Estes fios quânticos topológicos podem ser mapeados em duas cadeias de Kitaev no limite de baixas energias (ver Capítulo 2). A região de InSb que separa os dois contatos de Nb tem em torno de 150 nm e se torna um ponto quântico pela depleção eletrônica quando aplicado uma voltagem ( $V_{sd}$ ).

Fonte: Adaptada de DENG, et al. (29)

Como possível aplicação do nosso trabalho em computação quântica topológica ressaltamos o recente trabalho de HOFFMAN et al. (30) em que um ponto quântico *spinfull* acoplado a modos de Majoranas foi usado para implementar computação quântica universal híbrida utilizando-se do *qubit* de spin do ponto e do *qubit* formado pela fusão dos dois modos de Majorana de forma a complementar as operações que não são possíveis apenas por *braiding*.

## 1.5 Objetivos do trabalho e outline

Neste trabalho investigaremos a fusão entre Majoranas em um sistema composto por duas cadeias de Kitaev acopladas a um ponto quântico não-interagente *spinless* de um nível quântico de energia. Empregando o método das funções de Green obteremos as propriedades espectrais dos modos de Majorana e calcularemos a condutância no regime de resposta linear em busca de uma assinatura característica dos Majoranas. Usamos como base o trabalho realizado em nosso grupo (1), onde se constatou que o modo de Majorana presente na extremidade da cadeia de Kitaev na fase topológica “vaza” para um ponto quântico e se mantém fixo à energia de Fermi dos contatos originando um pico de  $e^2/2h$  na condutância medida por dois terminais metálicos através desse ponto quântico. Estenderemos esse modelo adicionando uma segunda cadeia ao ponto quântico *spinless* de um nível com a finalidade de estudarmos a fusão dos dois modos de Majorana presentes nas duas extremidades das

cadeias que se acoplam ao ponto. Além dos resultados obtidos pelo cálculo das funções de Green, estudaremos a diagonalização exata do sistema escrita no formalismo de Bogoliubov-deGennes de onde obteremos todo o espectro de excitações. Propomos também um modelo analítico com solução exata que captura a física dos acoplamentos entre os Majoranas das cadeias e o ponto quântico e reproduz os resultados numéricos obtidos anteriormente. A seguir faremos uma breve descrição de como essa dissertação está organizada.

No Capítulo 2 encontraremos o modelo contínuo efetivo de um supercondutor *p-wave* a partir de um sistema realista composto por fio quântico com interação spin-órbita de Rashba em proximidade com um supercondutor convencional *s-wave* e um campo magnético externo. Mostraremos que esse modelo sustenta soluções de energia nula localizadas em suas extremidades que satisfazem a condição de Majorana.

No Capítulo 3 vamos deduzir a cadeia de Kitaev como um modelo *tight-binding* a partir do modelo contínuo efetivo de um supercondutor *p-wave* obtido anteriormente. Estudaremos a diagonalização da cadeia de Kitaev para uma cadeia finita e suas bandas de *bulk* e mostraremos um indício da correspondência *bulk-edge* que associa as fases obtidas em *bulk* com o surgimento de estados de borda, que no nosso sistema são os estados ligados de Majorana presente nas pontas da cadeia.

No Capítulo 4 construiremos um modelo para estudar o acoplamento entre dois modos de Majorana, composto de um ponto quântico de um nível não-interagente acoplado a dois contatos metálicos e a duas cadeias de Kitaev. Os dois modos de Majorana (cada um proveniente de um cadeia) se acoplam ao ponto quântico em função da diferença entre as fases supercondutoras das cadeias. O típico pico de condutância a voltagem zero de Majorana se divide dando origem a novas excitações com energias não-nulas resultantes da fusão dos modos de Majorana em férmiões convencionais.

No Capítulo 5 reproduziremos os resultados obtidos em (1) para um ponto quântico acoplado a dois contatos metálicos e a uma cadeia de Kitaev como um caso particular do nosso modelo quando eliminamos uma das cadeias. Em seguida mostraremos nossos resultados obtidos para as duas cadeias acopladas ao ponto. Encontramos uma dependência da fusão entre os Majoranas com a diferença de fase supercondutora ( $\Delta\phi$ ) existente entre os dois fios. Quando  $\Delta\phi = \pi$  observamos a presença de um pico de Majorana na densidade de estados do ponto quântico que se desdobra em dois picos laterais (se fundem em dois estados fermiônicos) quando variamos  $\Delta\phi \neq \pi$ . Este resultado é corroborado tanto pelos nossos cálculos numéricos utilizando funções de Green e a diagonalização exata quanto pelo modelo analítico que propusemos.

No Capítulo 6 faremos as conclusões finais deste trabalho apresentando os principais resultados obtidos e possíveis estudos futuros.



## 2 Majoranas em Estado Sólido

Neste capítulo iremos deduzir um hamiltoniano de um sistema 1D que apresenta estados ligados de Majorana a partir de um *setup* experimental que consiste em um fio quântico semicondutor com interação spin-órbita do tipo Rashba em proximidade com um supercondutor convencional e um campo magnético externo. (17, 22) Em seguida mostraremos que este modelo apresenta soluções de estado ligado com energia zero que correspondem a excitações que obedecem a condição de Majorana  $\gamma = \gamma^\dagger$ . No capítulo seguinte mostraremos que a discretização deste modelo é equivalente a cadeia de Kitaev (10) que usaremos no restante deste trabalho.

### 2.1 Supercondutividade p-wave em fios quânticos

Nesta seção iremos obter um modelo contínuo efetivo para um supercondutor *p-wave* em uma dimensão. Vamos inicialmente escrever o Hamiltoniano do fio quântico sem supercondutividade e diagonalizá-lo. Depois adicionaremos o termo de supercondutividade induzida por proximidade utilizando como base os autovetores obtidos anteriormente, em seguida, utilizando o procedimento de *folding-down* (31), obteremos um Hamiltoniano  $2 \times 2$  efetivo válido para baixas energias que apresenta como soluções estados ligados com energia zero que demonstraremos obedecer a condição de Majorana. No Capítulo seguinte discretizaremos esse Hamiltoniano contínuo para obtermos um modelo *tight-binding* e mostraremos que este corresponde a cadeia de Kitaev.

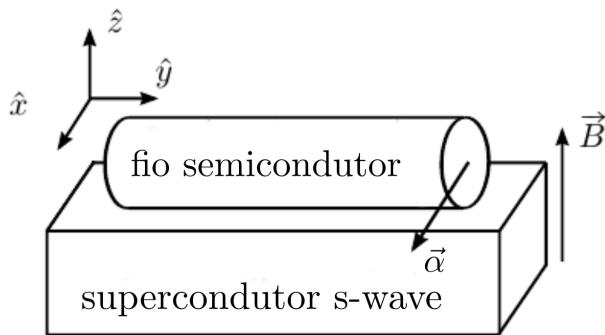


Figura 8 – Diagrama ilustrativo do sistema composto por um fio semicondutor na direção  $\hat{y}$  em proximidade com um supercondutor *s-wave* e um campo magnético externo na direção  $\hat{z}$  perpendicular ao vetor spin-órbital de Rashba  $\vec{\alpha}$  que aponta na direção  $\hat{x}$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Começaremos com um sistema unidimensional contínuo que descreve um fio quântico com acoplamento spin-órbita do tipo Rashba na presença de um campo magnético externo mostrado na Fig. 8 com o seguinte Hamiltoniano,

$$H_0 = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \mu - \alpha k_y \sigma_x - \frac{1}{2} g \mu_B |\vec{B}| \sigma_z \quad (2.1)$$

$$= H_{kin} + H_{SO} + H_Z, \quad (2.2)$$

O acoplamento *spin*-órbita tem a função de deslocar as duas bandas de elétrons livres antes degeneradas em *spin* e a presença de um campo magnético  $\vec{B}$  perpendicular ao eixo do fio (efeito Zeeman) abrirá um *gap* de energia no cruzamento dessas duas bandas spin-órbita (Fig.9). Como mostraremos adiante se a energia de Fermi  $\mu$  estiver dentro deste *gap* o efeito de proximidade com um supercondutor *s-wave* induzirá a formação de supercondutividade do tipo *p-wave* com o sistema efetivamente *spinless*. Como iremos demonstrar, esse sistema sustenta soluções de energia nula nas bordas que constituem os estados ligados de Majorana. Em segunda quantização podemos escrever cada termo do Hamiltoniano por,

$$H_{kin} = \sum_{\sigma} \int \psi_{\sigma}^{\dagger}(y) \left[ \frac{(-i\hbar\partial_y)^2}{2m} - \mu \right] \psi_{\sigma}(y) dy, \quad (2.3)$$

que descreve a energia cinética dos elétrons com potencial químico  $\mu$  e massa efetiva do elétron  $m$ . O operador de campo  $\psi_{\sigma}^{\dagger}(y)$  cria um elétron com projeção de spin  $\sigma = \uparrow / \downarrow$  na posição  $y$ .

O termo  $H_{SO}$  descreve o acoplamento spin-órbita de Rashba para um fio na direção  $\hat{y}$ ,

$$H_{SO} = -i\alpha \sum_{\sigma, \sigma'} \int \psi_{\sigma}^{\dagger}(y) (\sigma_x)_{\sigma\sigma'} \partial_y \psi_{\sigma'}(y) dy, \quad (2.4)$$

em que  $\alpha$  corresponde à intensidade do acoplamento spin-órbita de Rashba,  $\sigma_{x,y,z}$  são as matrizes de Pauli, e o eixo  $\hat{x}$  é escolhido para ser paralelo ao vetor de spin-órbita. E o termo  $H_z$  descreve o termo de Zeeman oriundo do campo magnético  $\vec{B}$  ao longo do eixo z,

$$H_z = V_z \sum_{\sigma, \sigma'} \int \psi_{\sigma}^{\dagger}(y) (\sigma_z)_{\sigma\sigma'} \psi_{\sigma}(y) dy, \quad (2.5)$$

com  $V_z = \frac{1}{2} g \mu_B |\vec{B}|$ , onde  $\mu_B$  é o magneto de Bohr e  $g$  o fator de Landé. Assim, o Hamiltoniano  $H_0$  assume a forma,

$$H_0 = \sum_{\sigma\sigma'} \int \psi_{\sigma}^{\dagger}(y) \left\{ \left[ \frac{(-i\hbar\partial_y)^2}{2m} - \mu \right] \delta_{\sigma\sigma'} - i\alpha (\sigma_x)_{\sigma\sigma'} \partial_y + V_z (\sigma_z)_{\sigma\sigma'} \right\} \psi_{\sigma'}(y) dy. \quad (2.6)$$

Vamos trabalhar a seguir no espaço de *momentum*. Após aplicar a transformada de Fourier e usando como base os *spinores*  $\Psi_k^\dagger = (\psi_{k\uparrow}^\dagger, \psi_{k\downarrow}^\dagger)$  e  $\Psi_k = (\psi_{k\uparrow}, \psi_{k\downarrow})^T$  obtemos

$$H_0 = \int \Psi_k^\dagger \mathcal{H}_0(k) \Psi_k dk, \quad (2.7)$$

onde,

$$\mathcal{H}_0(k) = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right) I_{2 \times 2} - \alpha \sigma_x k + V_Z \sigma_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + V_Z & -\alpha k \\ -\alpha k & \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu - V_Z \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Diagonalizando a Eq. 2.8 encontramos a relação de dispersão mostrada na Fig. 9 dada por

$$\varepsilon_\pm(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \pm \sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}, \quad (2.9)$$

onde os sinais + e - representam a banda superior (curva azul) e inferior (curva verde) respectivamente. Na Fig. 9 a linha tracejada mostra o deslocamento das bandas inicialmente degeneradas em spin dos elétrons livres provocado pelo acoplamento spin-órbita. Quando fazemos  $V_Z = 0$  na Eq. 2.9, temos  $\varepsilon_\pm(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \pm \alpha |k|$ . Ao ligarmos o campo magnético  $|\vec{B}|$  um *gap* de energia se abrirá entre as bandas  $\varepsilon_+$  e  $\varepsilon_-$  em  $k = 0$  de amplitude  $2V_Z$ .

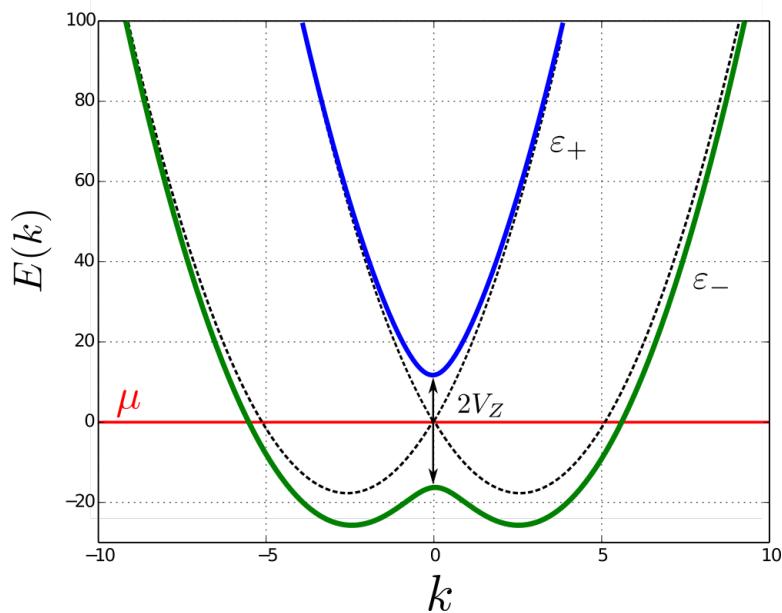


Figura 9 – Bandas spin-órbita com efeito Zeeman usando como parâmetros  $m = 1$ ,  $\alpha = 1.0$ ,  $V_Z = 2.0$  e  $\mu = 0$ . A introdução de um campo magnético provoca a abertura de um *gap* em  $k = 0$ . No regime em que  $|\mu| < 2|V_z|$  apenas a banda  $\varepsilon_-$  (verde) está ocupada.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A proximidade com um supercondutor possibilita o tunelamento dos pares de Cooper para o fio tornando-o supercondutor. Um tratamento mais rigoroso deste fenômeno está

além do escopo deste trabalho, aqui assumiremos que este fenômeno de supercondutividade induzida por proximidade pode ser descrito por um Hamiltoniano BCS da forma,

$$H_{SC} = \int \left[ \Delta \psi_{\uparrow}^{\dagger}(y) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(y) + \Delta^* \psi_{\downarrow}(y) \psi_{\uparrow}(y) \right] dy. \quad (2.10)$$

De forma análoga ao feito anteriormente podemos escrever  $H_{SC}$  na base de momento aplicando a transformada de Fourier  $\psi_{\sigma}^{\dagger}(y) = \int \psi_{k\sigma}^{\dagger} e^{-iky} dk$ ,

$$H_{SC} = \int \left[ \Delta \psi_{k\uparrow}^{\dagger} \psi_{-k\downarrow}^{\dagger} + \Delta^* \psi_{-k\downarrow} \psi_{k\uparrow} \right] dk. \quad (2.11)$$

Iremos escrever este termo na base dos auto-estados obtidos anteriormente para  $\mathcal{H}_0$ , assim podemos analisar os acoplamentos entre as bandas  $\varepsilon_{\pm}$  gerados por este termo. Representando os auto-vetores por vetores coluna  $\psi_{k+} = \begin{pmatrix} a_{k+} \\ b_{k+} \end{pmatrix}$  e  $\psi_{k-} = \begin{pmatrix} a_{k-} \\ b_{k-} \end{pmatrix}$ , escrevemos a antiga base dos auto-vetores de  $\sigma_z$ , que chamaremos de  $\psi_{k\uparrow}$  e  $\psi_{k\downarrow}$  em termos de  $\psi_{k+}$  e  $\psi_{k-}$ , relacionando-os por uma matriz unitária  $U_k$  através da relação,

$$\begin{pmatrix} \psi_{k\uparrow} \\ \psi_{k\downarrow} \end{pmatrix} = U_k^{\dagger} \begin{pmatrix} \psi_{k+} \\ \psi_{k-} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{k+}^* & a_{k-}^* \\ b_{k+}^* & b_{k-}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{k+} \\ \psi_{k-} \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

ou

$$\psi_{k\uparrow} = a_{k+}^* \psi_{k+} + a_{k-}^* \psi_{k-} \quad (2.13)$$

$$\psi_{k\downarrow} = b_{k+}^* \psi_{k+} + b_{k-}^* \psi_{k-} \quad (2.14)$$

onde elementos  $a_{k\pm}$  e  $b_{k\pm}$  podem ser encontrados resolvendo a equação de auto-valores  $\mathcal{H}_0(k)\psi_{k\pm} = \varepsilon_{k\pm}\psi_{k\pm}$ . Substituindo na expressão da Eq.2.11 temos,

$$H_{SC} = \Delta(a_{k+}\psi_{k+}^{\dagger} + a_{k-}\psi_{k-}^{\dagger})(b_{-k+}\psi_{-k+}^{\dagger} + b_{-k-}\psi_{-k-}^{\dagger}) + h.c. \quad (2.15)$$

$$= (\Delta a_{k+} b_{-k+}) \psi_{k+}^{\dagger} \psi_{-k+}^{\dagger} + (\Delta a_{k-} b_{-k-}) \psi_{k-}^{\dagger} \psi_{-k-}^{\dagger} + \quad (2.16)$$

$$+ (\Delta a_{k+} b_{-k-}) \psi_{k+}^{\dagger} \psi_{-k-}^{\dagger} + (\Delta a_{k-} b_{-k+}) \psi_{k-}^{\dagger} \psi_{-k+}^{\dagger} + h.c., \quad (2.17)$$

com os seguintes termos,

$$(\Delta a_{k+} b_{-k+}) = \frac{-i\alpha k \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}}, \quad (2.18)$$

$$(\Delta a_{k-} b_{-k-}) = \frac{-i\alpha k \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}}, \quad (2.19)$$

$$(\Delta a_{k+} b_{-k-}) = \frac{\alpha^2 k^2}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2} [\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2} - V_Z]}, \quad (2.20)$$

$$(\Delta a_{k-} b_{-k+}) = \frac{[\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2} - V_Z]^2}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2} [\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2} - V_Z]}. \quad (2.21)$$

Note que os dois últimos termos são invariantes pela mudança  $k \rightarrow -k$ , pois dependem de  $k^2$ , com isso podemos reescrever os termos  $(\Delta a_{k+} b_{-k-}) \psi_{k+}^\dagger \psi_{-k-}^\dagger + (\Delta a_{k-} b_{-k+}) \psi_{k-}^\dagger \psi_{-k+}^\dagger$  em um único termo utilizando-se da relação de anti-comutação dos operadores de férmons  $\psi_{k\pm}$  e fazendo a mudança  $k \rightarrow -k$  no último termo de forma que obtemos,

$$\Delta (a_{k+} b_{-k-} - a_{-k-} b_{k+}) \psi_{k+}^\dagger \psi_{-k-}^\dagger, \quad (2.22)$$

com

$$\Delta (a_{k+} b_{-k-} - a_{-k-} b_{k+}) = \frac{2V_Z \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}}. \quad (2.23)$$

A fim de simplificar a notação vamos definir,

$$\Delta_{++}(k) = \frac{-i\alpha k \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}}, \quad (2.24)$$

$$\Delta_{--}(k) = \frac{-i\alpha k \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}}, \quad (2.25)$$

$$\Delta_{+-}(k) = \frac{2V_Z \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}}. \quad (2.26)$$

Com isso o termo supercondutor assume a forma,

$$H_{SC} = \int \left[ \Delta_{++}(k) \psi_{k+}^\dagger \psi_{-k+}^\dagger + \Delta_{--}(k) \psi_{k-}^\dagger \psi_{-k-}^\dagger + \right. \quad (2.27)$$

$$\left. + \Delta_{+-}(k) \psi_{k+}^\dagger \psi_{-k-}^\dagger + h.c \right] dk.$$

Vamos rescrever o último termo acima por

$$\Delta_{+-}(k) \psi_{k+}^\dagger \psi_{-k-}^\dagger = \frac{1}{2} [\Delta_{+-}(k) \psi_{k+}^\dagger \psi_{-k-}^\dagger + \Delta_{+-}(-k) \psi_{k-}^\dagger \psi_{-k+}^\dagger] \quad (2.29)$$

$$= \frac{1}{2} \Delta_{+-}(k) \psi_{k+}^\dagger \psi_{-k-}^\dagger - \frac{1}{2} \Delta_{+-}(-k) \psi_{k-}^\dagger \psi_{-k+}^\dagger. \quad (2.30)$$

Para acomodarmos os termos com  $-k$  de  $H_{SC}$  devemos duplicar os graus de liberdade de  $H_0$  fazendo uso da relação de anti-comutação de férmiões e mudando  $k \rightarrow -k$  no segundo termo da seguinte forma,

$$H_0 = \varepsilon_+(k)\psi_{k+}^\dagger\psi_{k+} + \varepsilon_-(k)\psi_{k-}^\dagger\psi_{k-} \quad (2.31)$$

$$= \frac{1}{2} \left[ \varepsilon_+(k)\psi_{k+}^\dagger\psi_{k+} - \varepsilon_+(-k)\psi_{-k+}\psi_{-k+}^\dagger + \varepsilon_-(k)\psi_{k-}^\dagger\psi_{k-} - \varepsilon_-(-k)\psi_{-k-}\psi_{-k-}^\dagger \right] \quad (2.32)$$

O Hamiltoniano completo escrito na base dos operadores de Nambu  $\Psi_k^\dagger = (\psi_{k-}^\dagger, \psi_{-k-}, \psi_{k+}^\dagger, \psi_{-k+})$  assume a forma,

$$H = \frac{1}{2} \int \Psi_k^\dagger \mathcal{H}(k) \Psi_k dk \quad (2.33)$$

com

$$\mathcal{H}(k) = \mathcal{H}_0(k) + \mathcal{H}_{SC}(k) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{k-} & \Delta_{--}(k) & 0 & -\frac{1}{2}\Delta_{+-} \\ \Delta_{--}^*(k) & -\varepsilon_{k-} & \frac{1}{2}\Delta_{+-}(k) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\Delta_{+-}^*(k) & \varepsilon_{k+} & \Delta_{++}(k) \\ -\frac{1}{2}\Delta_{+-}^* & 0 & \Delta_{++}^*(k) & -\varepsilon_{k+} \end{bmatrix}. \quad (2.34)$$

Substituindo as expressões para  $\Delta_{--}(k)$ ,  $\Delta_{++}(k)$ ,  $\Delta_{+-}(k)$  e  $\varepsilon_{k\pm}$  podemos rescrever  $\mathcal{H}(k)$  utilizando as matrizes de Pauli  $\sigma$  e  $\tau$  o que facilitará o cálculo dos seus autovalores posteriormente,

$$\mathcal{H}(k) = \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right) \sigma_z \otimes \tau_0 - \sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2} \sigma_z \otimes \tau_z + \frac{\alpha k \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}} \sigma_y \otimes \tau_0 + \frac{2V_z \Delta}{\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}} \sigma_y \otimes \tau_y. \quad (2.35)$$

### 2.1.1 Origem da supercondutividade *p-wave*

É importante diferenciar a natureza dos acoplamentos gerados por  $\Delta_{++}(k)$  e  $\Delta_{--}(k)$  dos gerados por  $\Delta_{+-}(k)$ . Vamos supor que haja um termo de acoplamento  $\Delta_S(k)$  que forme pares de elétrons no estado singuleto, assim, devido ao princípio de exclusão de Pauli, teremos ao fazer a mudança de  $k \rightarrow -k$  que,

$$\Delta_S(k) (\psi_{k\uparrow}^\dagger \psi_{-k\downarrow}^\dagger - \psi_{k\downarrow}^\dagger \psi_{-k\uparrow}^\dagger) = \Delta_S(-k) (-\psi_{k\downarrow}^\dagger \psi_{-k\uparrow}^\dagger + \psi_{k\uparrow}^\dagger \psi_{-k\downarrow}^\dagger), \quad (2.36)$$

se anularia se  $\Delta_S(k)$  fosse uma função ímpar de  $k$ . Portanto a única possibilidade de formar um par de elétrons no estado de singuleto é termos  $\Delta_S(k) = \Delta_S(-k)$  par em  $k$ . Agora vamos supor que  $\Delta_P(k)$  acople elétrons em estados tripletos, de forma análoga temos,

$$\Delta_P(k) (\psi_{k\downarrow}^\dagger \psi_{-k\downarrow}^\dagger - \psi_{k\uparrow}^\dagger \psi_{-k\uparrow}^\dagger) = \Delta_P(-k) (-\psi_{k\downarrow}^\dagger \psi_{-k\downarrow}^\dagger + \psi_{k\uparrow}^\dagger \psi_{-k\uparrow}^\dagger), \quad (2.37)$$

que só não é anulo se  $\Delta_P(k) = -\Delta_P(-k)$ . Portanto para pares em estados singuleto,  $\Delta$  deve conter potências pares de  $k$  tal como  $\Delta_{+-}(k)$  e é chamada de supercondutividade do tipo *s-wave*. Já para os estados triploto,  $\Delta$  contém potências ímpares como  $\Delta_{++}(k)$  e  $\Delta_{--}(k)$  e são chamados de supercondutividade do tipo *p-wave* ou topológica. (32)

O efeito de proximidade com o supercondutor produz, portanto, não apenas um potencial de pareamento entrebandas do tipo *s-wave*  $\Delta_{+-}(k)$  mas também um potencial de pareamento interbandas do tipo *p-wave*  $\Delta_{++}(k)$  e  $\Delta_{--}(k)$  (17).

A diagonalização do Hamiltoniano da Eq. 2.34 resulta nas bandas mostradas na Fig. 10 com energia Zeeman  $V_z$ , supercondutividade induzida por proximidade  $\Delta$  e  $\mu = 0$ . Na Fig. 10 (a) fizemos  $\Delta = 0$  e  $V_z = 0$  e obtemos as típicas bandas de Rashba agora duplicadas devido ao procedimento de duplicação que fizemos no Hamiltoniano para incluir os termos de  $H_{SC}$ . Na Fig. 10 (b) ligamos o campo magnético  $\vec{B}$  perpendicular ao fio e observamos que um *gap* de  $2V_z$  surge em  $k = 0$  devido ao efeito Zeeman. Observamos na Fig. 10 (c) que o efeito da supercondutividade  $\Delta$  é abrir outro *gap* em  $k = k_f$  devido ao acoplamento das bandas  $E_\pm$  com as  $-E_\pm$  tornando o sistema “gapped” em *bulk* que se mantém até a condição  $\Delta = \sqrt{V_z^2 + \mu^2}$  [Fig. 10(d)] em que *gap* fecha em  $k = 0$ . Como veremos adiante essa condição está associada a uma transição entre fases supercondutoras que são dominadas pelo termo *p-wave* ou *s-wave*. (22)

Devido à competição entre supercondutividades do tipo *s-wave* e *p-wave* iremos a seguir explorar como os parâmetros do sistema, a saber, o potencial químico  $\mu$ , a energia de Zeeman  $V_z$ , a intensidade do acoplamento spin-órbita  $\alpha$  e o potencial supercondutor induzido  $\Delta$  devem ser escolhidos de forma a maximizar o *gap* dominado por  $\Delta_{++}(k)$  e  $\Delta_{--}(k)$  que induzem a supercondutividade do tipo *p-wave*. Seguiremos de forma mais sucinta a análise feita por ALICEA (17).

Para tornar o estado *p-wave* mais robusto, como pode ser visto na Fig.10, devemos maximizar o *gap* que ocorre no número de onda de Fermi  $k_f$  que é obtido fazendo  $\varepsilon_-(k_f) = \mu$ , e corresponde a

$$k_f = \sqrt{2m \left[ m\alpha^2 + \mu + \sqrt{V_z^2 + m\alpha^2(m\alpha^2 + 2\mu)} \right]}. \quad (2.38)$$

No limite em que  $m\alpha^2/V_z \gg 1$  temos que o termo *p-wave* em  $k_f$  é dado por  $|\Delta_{++}(k_f)| \sim \Delta/2$  enquanto o termo *s-wave* se anula  $\Delta_{+-}(k_f) \sim 0$ . Resolvendo anali-

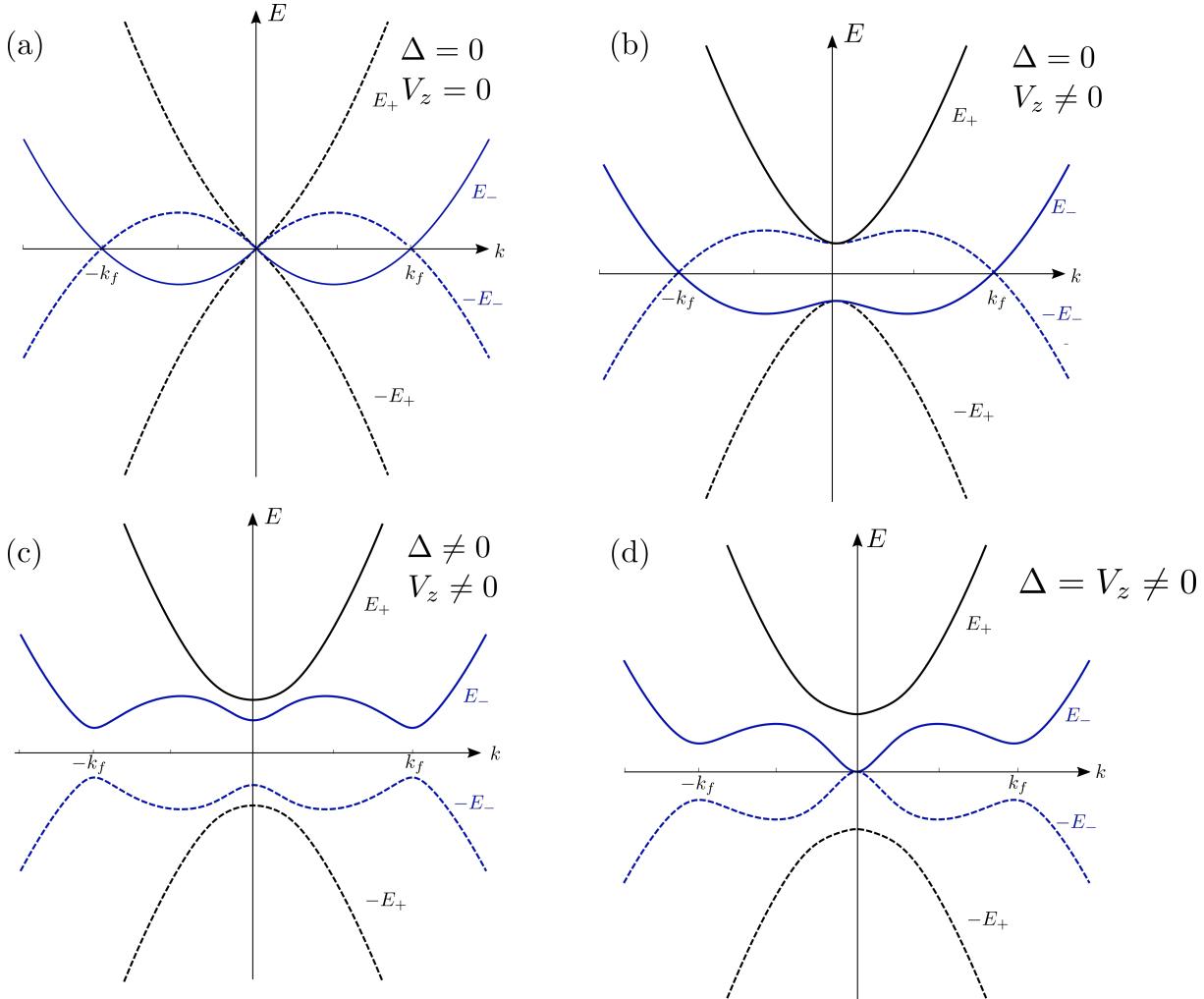


Figura 10 – Bandas de energia para um fio quântico com energia Zeeman  $V_Z$  e supercondutividade induzida por proximidade  $\Delta$  obtidas pela diagonalização da Eq. 2.34 com  $\mu = 0$ . Em (a) obtemos as típicas bandas de Rashba duplicadas fazendo  $\Delta = 0$  e  $V_z = 0$ . (b) Ao aplicarmos um campo magnético perpendicular ao fio um *gap* surge em  $k = 0$ . (c) O efeito da supercondutividade  $\Delta$  é abrir outro *gap* em  $k = k_f$  devido ao acoplamento das bandas  $E_{\pm}$  com as  $-E_{\pm}$  tornando o sistema “*gapped*” em *bulk*. Em (d) observamos o fechamento do *gap* em  $k = 0$  para  $\Delta = V_z$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

ticamente o Hamiltoniano da Eq.2.35 elevando ao quadrado e usando a propriedade de anti-comutação das matrizes de Pauli,  $\{\sigma_\alpha, \sigma_\beta\} = i\delta_{\alpha,\beta}$ , encontramos para a banda inferior  $E_-$  em  $k_f$

$$E_- (k = k_f) \sim \Delta \quad (2.39)$$

que é monotonicamente crescente com  $\Delta$ , e para  $k = 0$  encontramos

$$E_- (k = 0) = \left| V_z - \sqrt{\Delta^2 + \mu^2} \right|, \quad (2.40)$$

que é decrescente com  $\Delta$  enquanto o pareamento interbanda *s-wave* começa a se estabelecer e se anula quando  $\Delta = \sqrt{V_z^2 - \mu^2}$  [como mostrado na Fig. 10(d)] assinalando o fechamento

do *gap* de excitação  $E_g$ , definido como o menor valor entre  $E_- (0)$  e  $E_- (k_f)$ , e denota a destruição da fase supercondutora de caráter *p-wave*.

Na Fig.11 (a) mostramos o valor de  $E_g$  normalizado por  $\Delta$  em função de  $m\alpha^2/V_z$  e  $\Delta/V_z$  fixando o potencial químico em  $\mu = 0$ . Para  $\Delta/V_z < 1$  o fio se comporta como um supercondutor *p-wave* enquanto para  $\Delta/V_z > 1$  o sistema apresenta supercondutividade trivial *s-wave*. Na fase *p-wave* o *gap* é maximizado quando  $\Delta/V_z = 0,5$  e  $m\alpha^2/V_z \gg 1$ . No entanto o *gap* se anula para  $m\alpha^2/V_z \rightarrow 0$  pois o pareamento *p-wave* em  $k_f$  se anula neste limite. A Fig. 11(b) mostra fixamos  $m\alpha^2/V_z = 0.1$  e mostramos que o *gap* na fase *p-wave* permanece mesmo quando  $V_z$  excede  $m\alpha^2$  por mais de uma ordem de grandeza

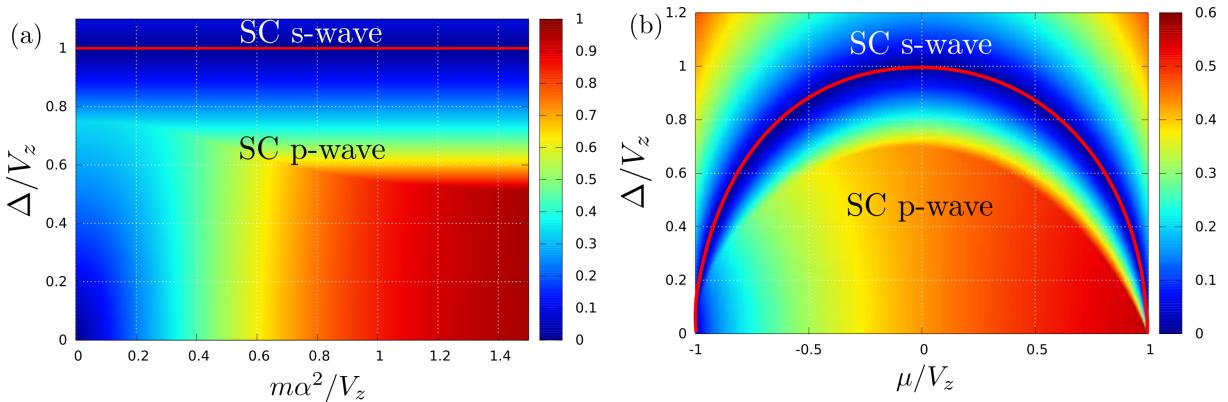


Figura 11 – Energia de excitação do *gap*  $E_g$  normalizada por  $\Delta$ . Em (a) variamos  $\Delta/V_z$  e  $m\alpha^2/V_z$  e fixamos potencial químico em  $\mu = 0$ . Para  $\Delta/V_z < 1$  o fio se comporta como um supercondutor *p-wave* (topológico) enquanto para  $\Delta/V_z > 1$  o sistema apresenta supercondutividade trivial *s-wave*. Na fase *p-wave* o *gap* é maximizado quando  $\Delta/V_z = 0,5$  e  $m\alpha^2/V_z \gg 1$ . No entanto o *gap* se anula para  $m\alpha^2/V_z \rightarrow 0$  pois o pareamento *p-wave* em  $k_f$  se anula neste limite. Em (b) fixamos  $m\alpha^2/V_z = 0.1$  e variamos  $\mu/V_z$  e  $\Delta/V_z$  para mostrar que o *gap* na fase *p-wave* permanece mesmo quando  $V_z$  excede  $m\alpha^2$  por mais de uma ordem de grandeza .

Fonte: Elaborada pelo autor.

## 2.1.2 Modelo efetivo *p-wave*

A seguir vamos obter um Hamiltoniano efetivo a partir do Hamiltoniano da Eq.2.34, para isso realizaremos o procedimento de *folding-down* descrito em LÖWDIN. (31) Inicialmente dividimos o Hamiltoniano nos blocos dos sub-espacos que definem as bandas de energia  $\pm E_-$  e  $\pm E_+$  que chamaremos respectivamente de  $H_{--}$  e  $H_{++}$ , e os acoplamentos entre eles conforme mostrado a seguir,

$$\mathcal{H}(k) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{k-} & \Delta_{--}(k) & 0 & -\frac{1}{2}\Delta_{+-}^* \\ \Delta_{--}^*(k) & -\varepsilon_{k-} & \frac{1}{2}\Delta_{+-}^*(k) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\Delta_{+-}(k) & \varepsilon_{k+} & \Delta_{++}(k) \\ -\frac{1}{2}\Delta_{+-} & 0 & \Delta_{++}^*(k) & -\varepsilon_{k+} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{--} & H_{-+} \\ H_{+-} & H_{++} \end{bmatrix}. \quad (2.41)$$

Estamos interessados nos estados do bloco  $H_{--}$  que descrevem as bandas  $\pm E_-$  mostradas em azul na Fig. 10 e queremos encontrar um modelo efetivo  $2 \times 2$  onde as bandas  $\pm E_+$  (curvas em preto na Fig. 10) possam ser ignoradas, para isso

$$\tilde{\mathcal{H}} = H_{--} + H_{-+}(E - H_{++})^{-1}H_{+-} \quad (2.42)$$

onde  $E$  representa a banda remota a partir da qual iremos calcular o *folding-down*. Expandido  $(E - H_{++})^{-1}$  em uma série de potência,

$$\frac{1}{(E - H_{++})} = \frac{1}{E} \frac{1}{\left(1 - \frac{H_{++}}{E}\right)} = \frac{1}{E} \left[1 + \frac{H_{++}}{E} + \left(\frac{H_{++}}{E}\right)^2 + \dots\right], \quad (2.43)$$

chegamos a

$$\tilde{\mathcal{H}} = H_{--} + \frac{H_{-+}}{E} \left[1 + \frac{H_{++}}{E} + \left(\frac{H_{++}}{E}\right)^2 + \dots\right] H_{+-}. \quad (2.44)$$

Substituindo os termos obtemos,

$$\tilde{\mathcal{H}}(k) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{k-} & \Delta_{--}(k) \\ \Delta_{--}^*(k) & -\varepsilon_{k-} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{|\Delta_{+-}|^2}{4E} & 0 \\ 0 & \frac{|\Delta_{+-}|^2}{4E} \end{bmatrix} + \quad (2.45)$$

$$+ \begin{bmatrix} -\frac{|\Delta_{+-}|^2 \varepsilon_{k+}}{2E^2} & -\frac{\Delta_{++}^* |\Delta_{+-}|^2}{2E^2} \\ -\frac{\Delta_{++} |\Delta_{+-}|^2}{2E^2} & \frac{|\Delta_{+-}|^2 \varepsilon_{k+}}{2E^2} \end{bmatrix} + \dots \quad (2.46)$$

Fazendo  $E = \varepsilon_{k+} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu + \sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}$ . Como discutido na seção anterior e mostrado na Fig. 10 o fechamento do *gap* em  $k = 0$  quando  $\Delta = \sqrt{V_z^2 + \mu^2}$  determina a destruição da fase *p-wave* e ocorre entre as bandas  $\pm E_-$  por esse motivo faremos a aproximação para pequenos valores de  $k$  onde nosso modelo efetivo será válido. Pela Eq.2.18 temos que  $\Delta_{++}(k) \rightarrow 0$  e

$$|\Delta_{+-}|^2 \approx \frac{\alpha^2 V_Z^2}{V_Z^2 + \alpha^2}, \quad (2.47)$$

assim,

$$\frac{|\Delta_{+-}|^2}{E} \approx \Delta \frac{\Delta}{V_Z - \mu}. \quad (2.48)$$

No regime onde  $\Delta \ll |V_Z - \mu|$ , ou seja, quando  $\Delta$  é muito menor que o *gap* proveniente do efeito Zeeman, a fase *p-wave* é dominante. Desta forma podemos abandonar os termos de ordem mais alta e mantermos apenas o primeiro termo da Eq.2.45,

$$\tilde{\mathcal{H}}(k) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{k-} & \Delta_{--}(k) \\ \Delta_{--}^*(k) & -\varepsilon_{k-} \end{bmatrix}. \quad (2.49)$$

O nosso sistema será spinless quando  $V_Z^2 \gg \alpha^2 k^2$ , isso garante que teremos a polarização de spin da banda  $\varepsilon_{k-}$  na direção do campo externo  $\vec{B}$ , e quando  $|\mu| < 2V_z$  apenas estados na banda inferior são ocupados. Assim fazemos as aproximações  $\varepsilon_{k-} \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu - V_Z$ , e renomeamos  $\tilde{\mu} = \mu + V_Z$ ,  $\xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \tilde{\mu}$  e  $\tilde{\Delta}_k = \Delta_{--}(k) = k \frac{-i\alpha\Delta}{2\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}}$ . Reduzindo o operador de Nambu de quatro componentes para duas,  $\Psi_k = \begin{pmatrix} \psi_k & \psi_{-k}^\dagger \end{pmatrix}^T$  e omitindo o sub-índice relativo as bandas  $\pm$  nosso Hamiltoniano efetivo pode ser escrito por

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} \int \Psi_k^\dagger \tilde{\mathcal{H}}(k) \Psi_k dk, \quad (2.50)$$

$$(2.51)$$

com

$$\tilde{\mathcal{H}}(k) = \begin{pmatrix} \xi_k & \tilde{\Delta}_k \\ \tilde{\Delta}_k^* & -\xi_k \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

$$= \xi_k \tau_z + \text{Re} [\tilde{\Delta}_k] \tau_x + \text{Im} [\tilde{\Delta}_k] \tau_y, \quad (2.53)$$

onde  $\tau_i$  são as matrizes de Pauli. Os auto-valores de  $\tilde{\mathcal{H}}(k)$  são

$$E_\pm(k) = \pm \sqrt{\xi_k^2 + |\tilde{\Delta}_k|^2}, \quad (2.54)$$

e estão plotados na Fig.12. O espectro de energia apresenta um *gap* para  $\Delta \neq 0$  e  $\mu \neq 0$  que se fecha quando  $\mu = 0$  indicando uma possível transição de fase.

## 2.2 Estados ligados de Majorana

Iremos mostrar que o Hamiltoniano *p-wave* efetivo que obtemos anteriormente sustenta estados ligados com energia nula em suas bordas na fase topológica e que estes

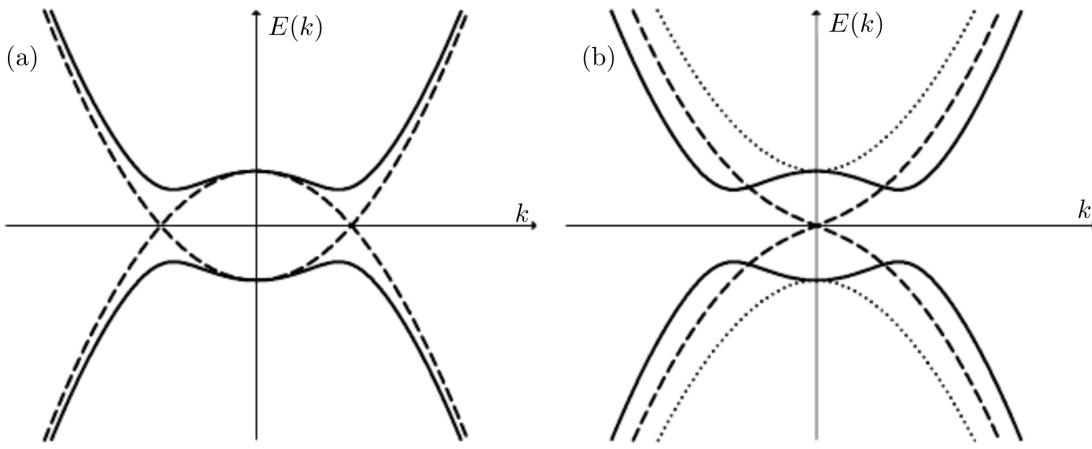


Figura 12 – Relação de dispersão do Hamiltoniano  $p$ -wave em diferentes casos. (a)  $\mu > 0$  e  $m = 1$ , a linha tracejada é para  $\Delta = 0$  enquanto a linha sólida para  $\Delta \neq 0$ . (b)  $\Delta \neq 0$ , a linha sólida corresponde a  $\mu > 0$ , a tracejada a  $\mu = 0$  e a pontilhada para  $\mu < 0$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

estados são Majoranas. Vamos considerar o Hamiltoniano da Eq.2.52 na representação de espaço real ( $k \rightarrow -i\partial_x$ ),

$$\mathcal{H} = \left( \frac{-\hbar^2 \partial_x^2}{2m} - \tilde{\mu} \right) \tau_z - i\hbar \partial_x \tilde{\Delta} \tau_x \quad (2.55)$$

com

$$\tilde{\Delta} = \frac{-i\alpha\Delta}{2\sqrt{V_Z^2 + \alpha^2 k^2}}. \quad (2.56)$$

Para o caso de um fio semi-infinito com condições de contorno do tipo *hard wall*, ou seja, onde o fio começa em  $x = 0$  e se estende para  $+\infty$  e com funções de onda se anulando para  $x = 0$ . Vamos buscar por soluções  $\varphi(x)$  de energia nula para a equação de Schrödinger independente do tempo,

$$\mathcal{H}(x) = \left[ \left( \frac{-\hbar^2 \partial_x^2}{2m} - \tilde{\mu} \right) \tau_z - i\hbar \partial_x |\tilde{\Delta}| \tau_x \right] \varphi(x) = 0. \quad (2.57)$$

Multiplicando  $\tau_z$  pela esquerda e usando a propriedade de multiplicação das matrizes de Pauli,  $\tau_a \tau_b = i\varepsilon_{abc} \tau_c + \delta_{ab} I$ , encontramos,

$$\left[ \left( \frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + \tilde{\mu} \right) \tau_0 - \hbar \partial_x |\tilde{\Delta}| \tau_y \right] \varphi(x) = 0. \quad (2.58)$$

Fica claro que podemos escrever  $\varphi(x) = \chi_\nu \phi(x)$ , onde  $\chi_\nu$  é um auto-vetor de  $\tau_y$ , ou seja,  $\tau_y \chi_\nu = \nu \chi_\nu$  com  $\nu = \pm 1$ . Desta forma a Eq.2.58 se torna uma equação diferencial,

$$\left( \frac{\hbar^2 \partial_x^2}{2m} + \tilde{\mu} - \nu \hbar |\tilde{\Delta}| \partial_x \right) \phi(x) = 0, \quad (2.59)$$

que pode ser resolvida utilizando o *ansatz*  $\phi \propto e^{-\lambda x}$ . Substituindo na Eq.2.59 encontramos a equação secular,

$$0 = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 + \nu \hbar \tilde{\Delta} \lambda + \tilde{\mu}, \quad (2.60)$$

com soluções,

$$\lambda_{\pm} = \frac{m \tilde{\Delta}}{\hbar} \left( -\nu \pm \sqrt{\nu^2 - 2 \frac{\mu}{m \tilde{\Delta}^2}} \right). \quad (2.61)$$

Como estamos buscando por soluções nas bordas, restringimos que  $\phi(0) = \phi(+\infty) = 0$ , o que nos dá a condição  $Re[\lambda_{\pm}] > 0$ . Se  $\phi$  está localizado na borda esquerda do fio ( $x = 0$ ), essa condição só poderá ser satisfeita para  $\nu = -1$  e

$$|1 - 2 \frac{\tilde{\mu}}{m \tilde{\Delta}^2}| < 1 \quad \Rightarrow \quad 0 < \tilde{\mu} < m \tilde{\Delta}^2 \quad (2.62)$$

assumindo  $m > 0$  e  $Im[\tilde{\Delta}] = 0$ . O auto-vetor de  $\tau_y$  com auto-valor  $-1$  é  $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ . Portanto a solução de estado ligado com energia nula tem a forma,

$$\varphi(x) = \frac{C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+ x} - e^{-\lambda_- x}) \quad (2.63)$$

com  $\lambda_{\pm}$  dado pela Eq.2.61 e  $C$  uma constante de normalização. Na Fig.13 está mostrado  $|\varphi(x)|^2$  e podemos perceber que a função de onda se distribui predominantemente próxima à borda e decai exponencialmente em direção ao centro do fio.

A restrição de  $\tilde{\mu}$  pode ser relaxada para  $\tilde{\mu} > 0$  se  $\lambda_{\pm}$  assumir valores complexos com sua parte real estritamente positiva,  $Re[\lambda_{\pm}] > 0$ . Essas soluções de energia nula existem para todo o domínio em que  $\tilde{\Delta} \neq 0$  e  $\tilde{\mu} > 0$ , mas apenas para um fio semi-infinito. Se o fio for finito, existirão dois estados ligados, que decairão exponencialmente de cada uma das bordas. No caso do comprimento do fio ser pequeno, haverá uma sobreposição entre as duas funções de onda e os estados irão se hibridizar.

A conexão com a definição dos operadores de Majorana pode ser vista mais facilmente ao introduzirmos uma fase global  $e^{i\pi/4}$  em  $\varphi(x)$ ,

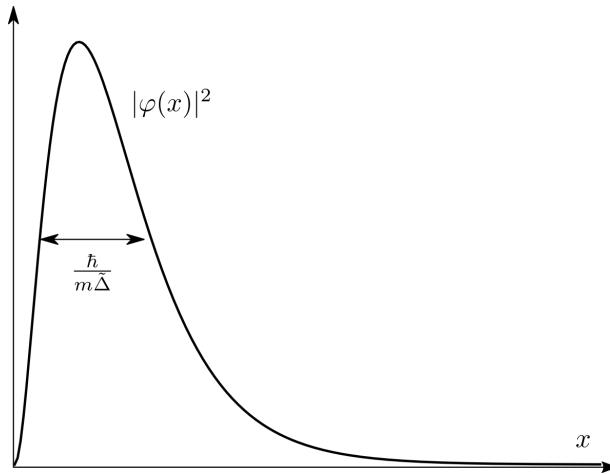


Figura 13 – Figura esquemática da densidade de probabilidade  $|\varphi(x)|^2$  do estado de energia nula em função da posição.

Fonte: Elaborada pelo autor.

$$\varphi(x) = \frac{e^{i\pi/4}C}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+x} - e^{-\lambda_-x}) \quad (2.64)$$

$$= \frac{C}{2} \begin{pmatrix} 1+i \\ 1-i \end{pmatrix} (e^{-\lambda_+x} - e^{-\lambda_-x}) \quad (2.65)$$

$$= \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (2.66)$$

onde

$$u = (1+i) \frac{C}{2} (e^{-\lambda_+x} - e^{-\lambda_-x}) \quad (2.67)$$

e

$$v = (1-i) \frac{C}{2} (e^{-\lambda_+x} - e^{-\lambda_-x}) \quad (2.68)$$

Notamos que  $u = v^*$  é a condição para que as excitações de um supercondutor spinless seja um Majorana . Escrevendo o operador de aniquilação do estado  $\varphi(x)$  em termos dos operadores de criação e destruição de elétrons na forma  $\gamma_0 = uc + vc^\dagger$  e substituindo os valores para  $u$  e  $v$  encontramos

$$\gamma_0 = Ce^{i\pi/4} (e^{-\lambda_+x} - e^{-\lambda_-x}) \frac{(c - ic^\dagger)}{\sqrt{2}}, \quad (2.69)$$

note que  $e^{i\pi/4} \frac{(c - ic^\dagger)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}(1+i)(c - ic^\dagger) = \frac{1}{2}[(1+i)c + (1-i)c^\dagger]$  mostra claramente que a condição de Majorana,  $\gamma_0 = \gamma_0^\dagger$ , é satisfeita.



# 3 Cadeia de Kitaev

Neste capítulo introduziremos o método numérico utilizado para examinar um supercondutor *p-wave* 1D obtido no Capítulo 2. Iremos inicialmente obter um modelo *tight-binding* fazendo a discretização da Eq.2.52 em seguida mostraremos que podemos mapear este modelo na cadeia de Kitaev proposto em (10). Em seguida analisaremos o surgimento dos modos de Majorana na cadeia de Kitaev , suas propriedades de *bulk* e finalizaremos com a definição de um invariante topológico que indica as fases topológicas e a presença dos Majoranas.

## 3.1 Aproximação *tight-binding*

Um modelo *tight-binding* pode ser criado mapeando o Hamiltoniano *p-wave* contínuo da Eq.2.52 para uma rede discreta, através das substituições,

$$k \rightarrow \frac{1}{a} \operatorname{sen}(ka), \quad k^2 \rightarrow \frac{4}{a^2} \operatorname{sen}^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{2}{a^2} (1 - \cos(ka)) \quad (3.1)$$

onde  $a = \frac{L}{N}$  é o espaçamento da cadeia,  $L$  é o comprimento do fio e  $N$  a quantidade de sítios. No limite para grandes comprimentos de onda  $ka \rightarrow 0$  retornamos para o caso contínuo. O modelo *tight-binding* captura a física de baixas energias relevante do modelo original e é válido no limite  $ka \ll 1$  que corresponde ao caso em que  $N$  é muito grande. Escrevemos o Hamiltoniano *p-wave* efetivo da Eq.2.52 e calculamos a transformada inversa de Fourier para o espaço real

$$\Psi_k = \begin{pmatrix} \psi_k \\ \psi_{-k}^\dagger \end{pmatrix} = \sum_i \begin{pmatrix} e^{ikR_i} c_i \\ e^{-i(-k)R_i} c_i^\dagger \end{pmatrix} = \sum_i e^{ikR_i} \begin{pmatrix} c_i \\ c_i^\dagger \end{pmatrix} = \sum_i e^{ikR_i} \mathbf{c}_i \quad (3.2)$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} \int e^{-ikR_i} \mathbf{c}_i^\dagger \left[ \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} (1 - \cos(ka)) - \tilde{\mu} \right) \tau_z + \frac{\tilde{\Delta}}{a} \operatorname{sen}(ka) \tau_x \right] e^{ikR_j} \mathbf{c}_j dk \quad (3.3)$$

onde  $R_j = aj$  ,  $j = 1, \dots, N$  é um vetor da rede direta. Agora reescrevemos os termos cosseno e seno em termos de funções exponenciais e realizamos a integração em  $k$ ,

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} \int e^{-ikR_i} \mathbf{c}_i^\dagger \left[ \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} \left( 1 - \frac{1}{2} (e^{ika} + e^{-ika}) \right) - \tilde{\mu} \right) \tau_z \right.$$
(3.4)

$$\left. - \frac{i\tilde{\Delta}}{2a} (e^{ika} - e^{-ika}) \tau_x \right] e^{ikR_j} \mathbf{c}_j dk$$
(3.5)

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathbf{c}_i^\dagger \left[ \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} \left( \delta_{i,j} - \frac{1}{2} (\delta_{i,j+1} + \delta_{i+1,j}) \right) - \tilde{\mu} \delta_{i,j} \right) \tau_z \right.$$
(3.6)

$$\left. - \frac{i\tilde{\Delta}}{2a} (\delta_{i,j+1} - \delta) \tau_x \right] \mathbf{c}_j$$
(3.7)

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} \mathbf{c}_i^\dagger \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} - \tilde{\mu} \right) \tau_z \mathbf{c}_i + \mathbf{c}_{i+1}^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \tau_z - \frac{i\tilde{\Delta}}{2a} \tau_x \right) \mathbf{c}_i$$
(3.8)

$$+ \mathbf{c}_i^\dagger \left( -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \tau_z + \frac{i\tilde{\Delta}}{2a} \tau_x \right) \mathbf{c}_{i+1}$$
(3.9)

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \mathbf{c}_i^\dagger D \mathbf{c}_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{c}_{i+1}^\dagger T \mathbf{c}_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{c}_i^\dagger T^\dagger \mathbf{c}_{i+1}$$
(3.10)

onde

$$D = \left( \frac{\hbar^2}{ma^2} - \tilde{\mu} \right) \tau_z, \quad T = \left( -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \tau_z - \frac{i\tilde{\Delta}}{2a} \tau_x \right),$$
(3.11)

para uma notação mais compacta. Nós escrevemos o Hamiltoniano como uma matriz  $2N \times 2N$  definindo o spinor de Nambu  $\vec{c} = (\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \dots, \mathbf{c}_N)^T$  de comprimento  $2N$  com elementos  $\mathbf{c}_i = (c_i, c_i^\dagger)^T$ ,

$$H = \frac{1}{2} \vec{c}^\dagger \mathcal{H} \vec{c},$$
(3.12)

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} D & T & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ T^\dagger & D & T & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & T^\dagger & D & T & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & T^\dagger & D & T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & T^\dagger & D \end{pmatrix}.$$
(3.13)

Os auto-vetores e auto-valores podem ser obtidos pela diagonalização numérica deste Hamiltoniano *tight-binding*. Na próxima seção iremos examinar este modelo em maiores detalhes e mostraremos que é equivalente ao modelo da cadeia de Kitaev. (10)

## 3.2 Cadeia de Kitaev

Iremos mostrar que o modelo *tight-binding* obtido na seção anterior é equivalente a cadeia de Kitaev (10). Para isto renomeamos os parâmetros da Eq.3.11 ,

$$\frac{\hbar^2}{ma^2} - \tilde{\mu} \rightarrow -\mu \quad , \quad \frac{\hbar^2}{2ma^2} \rightarrow t \quad , \quad \frac{i\tilde{\Delta}}{2a} \rightarrow |\Delta|e^{i\phi}, \quad (3.14)$$

e expandimos os produtos matriciais  $\mathbf{c}_i^\dagger \tau_j \mathbf{c}_k$

$$H_{kitaev} = \frac{1}{2} \sum_j \left[ -\mu \left( c_j^\dagger c_j - c_j c_j^\dagger \right) - t \left( c_{j+1}^\dagger c_j - c_{j+1} c_j^\dagger + c_j^\dagger c_{j+1} - c_j c_{j+1}^\dagger \right) \right] \quad (3.15)$$

$$+ |\Delta| e^{-i\phi} \left( c_{j+1}^\dagger c_j^\dagger - c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger \right) + |\Delta| e^{i\phi} \left( c_{j+1} c_j - c_j c_{j+1} \right) \quad (3.16)$$

e usando as relações de anti-comutação dos operadores de férmons obtemos,

$$H_{kitaev} = \sum_j \left[ -\mu \left( c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right) - t \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - |\Delta| \left( e^{-i\phi} c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + e^{i\phi} c_{j+1} c_j \right) \right] \quad (3.17)$$

que é equivalente ao modelo descrito em (10).

### 3.2.1 Casos especiais

Vamos escrever o Hamiltoniano da cadeia de Kitaev na representação dos operadores de Majoranas, para isso redefinimos os operadores de férmons,

$$c_j = \frac{e^{-i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j} + i\gamma_{A,j}) \quad , \quad c_j^\dagger = \frac{e^{i\phi/2}}{2} (\gamma_{B,j} - i\gamma_{A,j}), \quad (3.18)$$

com

$$\{\gamma_{\alpha,j}, \gamma_{\beta,k}\} = 2\delta_{\alpha,\beta}\delta_{j,k} \quad e \quad \gamma_{\alpha j}^\dagger = \gamma_{\alpha j}. \quad (3.19)$$

Após substituir na Eq.3.17, obtemos

$$\bar{H}_{kitaev} = -\frac{i}{2} \sum_{j=1}^N \mu \gamma_{B,j} \gamma_{A,j} + \frac{i}{2} \sum_{j=1}^{N-1} [(\Delta| - t) \gamma_{B,j} \gamma_{A,j+1} + (\Delta| + t) \gamma_{A,j} \gamma_{B,j+1}]. \quad (3.20)$$

Nesta representação iremos analisar dois casos limites especiais:

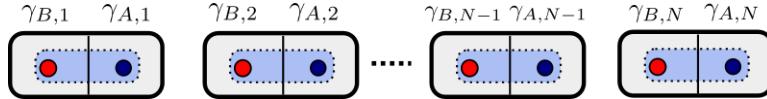


Figura 14 – Diagrama ilustrativo dos sítios da cadeia de Kitaev na representação de Majorana para  $\Delta = t = 0$  e  $\mu \neq 0$ . Cada retângulo representa um sítio eletrônico  $c_j$  que comporta dois operadores de Majorana  $\gamma_{B,j}$  (círculo vermelho) e  $\gamma_{A,j}$  (círculo azul). Os acoplamentos entre Majoranas no mesmo sitio está representado pelos retângulos azuis.

Fonte: Elaborada pelo autor.

- Para  $|\Delta| = t = 0$  e  $\mu \neq 0$ , a Eq.3.20 fica,

$$H = -\frac{i\mu}{2} \sum_{j=1}^N \gamma_{B,j} \gamma_{A,j} \quad (3.21)$$

onde apenas os operadores de Majorana do mesmo sítio estão acoplados entre si. Esse regime corresponde a uma cadeia *tight-binding* onde não há hoping entre os elétrons e apresenta duas bandas planas,

$$H = -\mu \sum_j \left( c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right). \quad (3.22)$$

- Para  $|\Delta| = t$  e  $\mu = 0$ , encontramos,

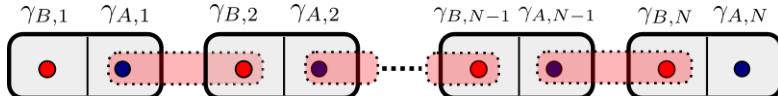


Figura 15 – Diagrama ilustrativo dos sítios da cadeia de Kitaev na representação de Majorana para  $\Delta = t$  e  $\mu = 0$ . Cada retângulo representa um sítio eletrônico  $c_j$  que comporta dois operadores de Majorana,  $\gamma_{B,j}$  (círculo vermelho) e  $\gamma_{A,j}$  (círculo azul). Os acoplamentos entre Majoranas de sítios vizinhos está representado pelos retângulos rosa. Note que os operadores  $\gamma_{B,1}$  e  $\gamma_{A,N}$  estão desacoplados do restante da cadeia.

Fonte: Elaborada pelo autor.

$$H = it \sum_{j=1}^{N-1} \gamma_{A,j} \gamma_{B,j+1} \quad (3.23)$$

que contém apenas termos com operadores de Majorana de sítios diferentes. Note que os Majoranas  $\gamma_{B,1}$  e  $\gamma_{A,N}$  localizados em pontas opostas do fio (Fig.15) não aparecem em  $H$ . Todos os estados que não se localizam nas pontas dos fios tem energia  $\pm |t|$  devido a fusão de Majoranas entre sítios vizinhos (retângulos rosas), independentemente do comprimento do fio. Os Majoranas **desacoplados**  $\gamma_{B,1}$  e  $\gamma_{A,N}$  formam um estado fermiônico com energia

zero. A estabilidade desta fase não se restringe a apenas  $\mu = 0$ , para estudarmos o intervalo de  $\mu$  que apresenta Majoranas desacoplados e portanto em energia zero usaremos a Eq.3.17 e calcularemos numericamente os auto-valores para uma cadeia de  $N = 50$  sítios usando  $|\Delta| = t$  e variando  $\mu$ . Como pode ser visto na Fig.16, os auto-valores nulos, que correspondem ao par de Majoranas das pontas, persistem para uma ampla gama de  $\mu$ , se dividindo em energia quando  $\mu \approx 2t$ . O mesmo comportamento ocorre quando variamos  $\mu$  negativamente até  $\mu \approx -2t$ .

Os Majoranas se dividem apenas quando os estados de *bulk*, inicialmente separados em energia por um *gap* de  $2t$  se aproximam de zero. Portanto os modos de Majorana são estados protegidos enquanto o *gap* for finito.

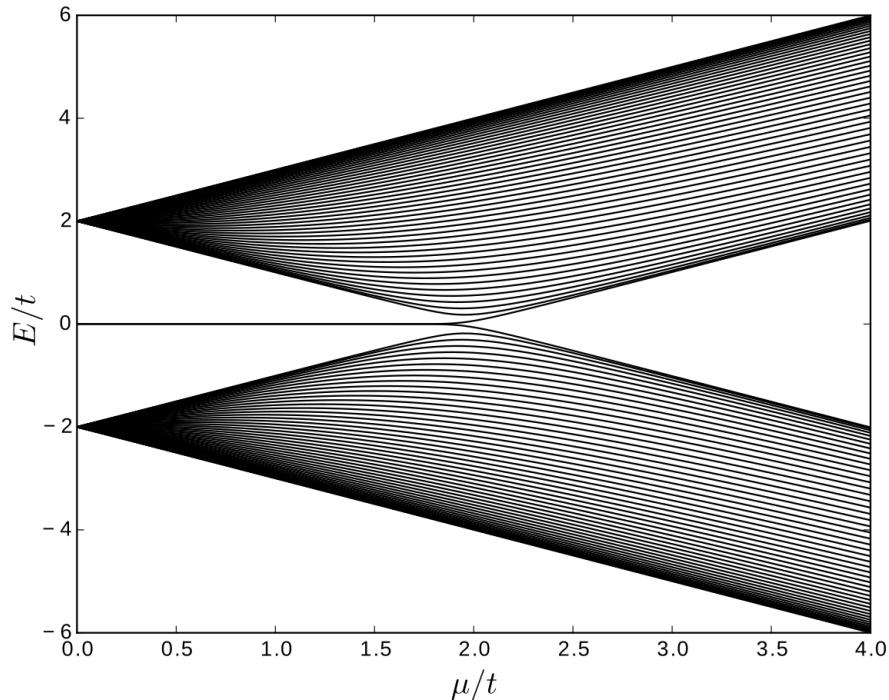


Figura 16 – Auto-valores para uma cadeia de Kitaev com  $N = 50$  sítios em função do potencial químico  $\mu$ . Usando como parâmetros  $|\Delta| = t$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos definir um novo conjunto de operadores de férmiões,

$$d_j = \frac{1}{2} (\gamma_{B,j} + i\gamma_{A,j+1}) \quad , \quad d_j^\dagger = \frac{1}{2} (\gamma_{B,j} - i\gamma_{A,j+1}) \quad (3.24)$$

em termos destes novos operadores, o Hamiltoniano assume a forma,

$$H = 2t \sum_{j=1}^{N-1} \left( d_j^\dagger d_j - \frac{1}{2} \right) \quad (3.25)$$

com auto-estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  que satisfaz a relação,

$$d_j |\psi_0\rangle = 0 \quad \text{para} \quad j = 1, \dots, N-1 \quad (3.26)$$

Os dois operadores de Majorana que estão ausentes no Hamiltoniano da Eq.3.23,  $\gamma_{B,1}$  e  $\gamma_{A,N}$  permitem encontrarmos dois estados ortogonais  $|\psi_0\rangle$  e  $|\psi_1\rangle$  que satisfaçam a condição da Eq.3.26 e estão relacionados com os novos operadores de férmiões da seguinte maneira,

$$d_0 = \frac{1}{2} (\gamma_{B,1} + i\gamma_{A,N}) \quad , \quad d_0^\dagger = \frac{1}{2} (\gamma_{B,1} - i\gamma_{A,N}) \quad (3.27)$$

através de

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{2} (\gamma_{B,1} + i\gamma_{A,N}) |\psi_1\rangle = d_0 |\psi_1\rangle \quad (3.28)$$

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} (\gamma_{B,1} - i\gamma_{A,N}) |\psi_0\rangle = d_0^\dagger |\psi_0\rangle \quad (3.29)$$

Essas relações entre os dois estados fundamentais revelam que o estado fermiônico criado por  $d_0^\dagger$  é não-local pois envolve operadores de Majorana de cada extremidade da cadeia. A ortogonalidade destes estados pode ser conferida calculando

$$\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{4} \langle \psi_1 | (\gamma_{B,1} + i\gamma_{A,N}) (\gamma_{B,1} - i\gamma_{A,N}) |\psi_0\rangle \quad (3.30)$$

$$= \frac{1}{4} \langle \psi_1 | \gamma_{B,1}^2 - \gamma_{A,N}^2 - i\gamma_{B,1}\gamma_{A,N} - i\gamma_{A,N}\gamma_{B,1} |\psi_0\rangle \quad (3.31)$$

$$= -\frac{i}{4} \langle \psi_1 | \gamma_{B,1}\gamma_{A,N} - \gamma_{B,1}\gamma_{A,N} |\psi_0\rangle = 0. \quad (3.32)$$

Como mencionado anteriormente não é possível definir um número de ocupação de um modo de Majorana usando os operadores de Majorana, precisamos necessariamente calcular a ocupação de estados fermiônicos que possuem um número definido de férmiões e são auto-estados do operador paridade definido por,

$$\hat{P} = \prod_{j=1}^N -i\gamma_{B,j}\gamma_{A,j} = \prod_{j=0}^{N-1} (1 - 2d_j^\dagger d_j) \quad (3.33)$$

com auto-valor  $-1$  se o estado estiver ocupado ou  $+1$  se estiver vazio. Notando que,

$$\left\{ \hat{P}, d_j^\dagger \right\} = \hat{P}d_j^\dagger + d_j^\dagger \hat{P} = 0 \quad (3.34)$$

encontramos,

$$\hat{P}|\psi_0\rangle = d_0|\psi_1\rangle = -d_0\hat{P}|\psi_1\rangle = (-d_0)(\pm|\psi_1\rangle) = \mp|\psi_0\rangle \quad (3.35)$$

de onde concluímos que  $|\psi_0\rangle$  e  $|\psi_1\rangle$  tem paridades opostas. Isto significa que os dois estados fundamentais degenerados constituem um estado fermiônico que pode estar vazio ou ocupado por um elétron.

Devido a simetria de partícula-buraco do Hamiltoniano de Kitaev, o espectro deve ser simétrico em torno do zero de energia, havendo sempre pares com energias  $+E$  e  $-E$ . Como os modos de Majorana constituem estados degenerados com energia zero, e estando afastados espacialmente entre si, não haveria como hibridizá-los. A única forma de “destruí-los” seria fechar o *gap* e isto acontece em  $\mu = \pm 2t$ .

### 3.2.2 Caso geral

O Hamiltoniano geral da cadeia de Kitaev na Eq.3.17 pode ser escrito na forma matricial utilizando as relações de anti-comutação dos operadores  $\gamma$ . Para simplificar a notação de soma utilizaremos  $\gamma_{A,j} \equiv \gamma_{2j-1}$  e  $\gamma_{B,j} \equiv \gamma_{2j}$  onde agora  $j = 1, \dots, 2N$ .

$$H_{kitaev} = \frac{i}{4} \sum_{j,l=1}^{2N} A_{jl} \gamma_j \gamma_l = \sum_{j,l=1}^{2N} M_{jl} \gamma_j \gamma_l \quad (3.36)$$

onde  $A$  é uma matriz real anti-simétrica (ou seja,  $iA = (iA)^\dagger$  ou  $A^* = A = -A^T$ ) e  $M$  é uma matriz hermitiana. Podemos resolver o problema de auto-valores encontrando a transformação ortogonal  $WAW^T$  que deixe o Hamiltoniano na forma canônica,

$$H_{kitaev} = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^N E_j b'_j b''_j = \sum_{j=1}^N E_j \left( d_j^\dagger d_j - \frac{1}{2} \right), \quad (3.37)$$

onde

$$d_j = \frac{1}{2} (b'_j + i b''_j), \quad d = \frac{1}{2} (b'_j - i b''_j) \quad (3.38)$$

são operadores de férmions e  $b'_j$  e  $b''_j$  são combinações lineares dos operadores de Majorana  $\gamma_{A,k}$  e  $\gamma_{B,k}$ . Podemos escrever as matrizes,

$$\begin{pmatrix} b'_1 \\ b''_1 \\ \vdots \\ b'_N \\ b''_N \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \vdots \\ \gamma_{2N-1} \\ \gamma_{2N} \end{pmatrix}, \quad WAW^T = \begin{pmatrix} 0 & E_1 \\ -E_1 & 0 \\ & \ddots \\ & & 0 & E_N \\ & & -E_N & 0 \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

onde  $W$  é uma matriz ortogonal  $2N \times 2N$  cujas linhas são auto-vetores de  $A$  (10). Os auto-valores aparecem em pares  $\pm E_j$  devido a simetria de partícula-buraco do Hamiltoniano. Se os estados de energia zero existem, eles são da forma escritos por KITAEV, (10),

$$b' = \sum_j (\alpha'_+ x_+^{-j} + \alpha'_- x_-^{-j}) \gamma_{2j-1} \quad (3.40)$$

$$b'' = \sum_j (\alpha''_+ x_+^{-j} + \alpha''_- x_-^{-j}) \gamma_{2j} \quad (3.41)$$

com

$$x^\pm = \frac{-\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4t^2 + 4\Delta^2}}{2(t + \Delta)} \quad (3.42)$$

onde os coeficientes  $\alpha'_+$ ,  $\alpha'_-$ ,  $\alpha''_+$  e  $\alpha''_-$  são determinados pelas condições de contorno. A condição de contorno do tipo *hard wall* em  $j = 0$  e  $j = N + 1$  obriga que as funções de onda se anulem nesses dois pontos. No caso do nosso modelo *tight-binding* o equivalente seria garantir que para  $j = 0$  e  $j = N + 1$  os termos da Eq. 3.41 se anulem para qualquer parâmetro do Hamiltoniano. Com isso obtemos quatro equações,

$$\alpha'_+ + \alpha'_- = 0 \quad (3.43)$$

$$\alpha''_+ + \alpha''_- = 0 \quad (3.44)$$

$$\alpha'_+ x_+^{-(N+1)} + \alpha'_- x_-^{-(N+1)} = 0 \quad (3.45)$$

$$\alpha''_+ x_+^{-(N+1)} + \alpha''_- x_-^{-(N+1)} = 0 \quad (3.46)$$

Vamos considerar os dois domínios em que  $|\mu| > 2|t|$  e  $|\mu| < 2|t|$  a fim de determinarmos se um estado de energia zero na forma da Eq. 3.41 possa satisfazer essas condições de contorno. Em ambos casos assumimos  $\Delta \neq 0$ .

1. No domínio  $|\mu| > 2|t|$  temos,

$$|x_+| = \left| \frac{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{2t}{\mu}\right)^2 + \left(\frac{2\Delta}{\mu}\right)^2}}{\frac{2t}{|\mu|} + \frac{2\Delta}{|\mu|}} \right| > \left| \frac{1 + \frac{2\Delta}{|\mu|}}{\frac{2t}{|\mu|} + \frac{2\Delta}{|\mu|}} \right| > \left| \frac{1 + \frac{2\Delta}{|\mu|}}{1 + \frac{2\Delta}{|\mu|}} \right| = 1 \quad (3.47)$$

$$|x_+x_-| = \left| \frac{\mu^2 - \mu^2 + 4t^2 - 4\Delta^2}{4(t + \Delta)^2} \right| = \left| \frac{t - \Delta}{t + \Delta} \right| < 1, \quad (3.48)$$

onde usamos que  $\frac{2t}{|\mu|} < 1$ . Dessas duas equações deduzimos que  $|x_-| < 1$ . Para  $\mu > 0$  teremos que  $|x_+| < 1$  e  $|x_-| > 1$  e portanto a série trigonométrica não converge e não podemos encontrar uma solução normalizada para valores de  $\alpha'_-$  e  $\alpha'_+$  (ou de  $\alpha''_-$  e  $\alpha''_+$ ) não nulos. Assim concluímos que esta fase não contém estados de energia zero.

2. Para  $|\mu| < 2|t|$  temos que  $|x_+|, |x_-| < 1$  o que garante a convergência da série e permite que haja estados de energia zero da forma dada pela Eq.3.41 que satisfazem as condições de contorno com  $\alpha'_-$  e  $\alpha'_+$  (e  $\alpha''_-$  e  $\alpha''_+$ ) não nulos.

### 3.3 Propriedades de *bulk* e diagrama de fase

As propriedades de *bulk* podem ser analisadas ao aplicarmos condições periódicas de contorno e reescrever a cadeia de Kitaev (Eq.3.17) no espaço de *momentum*. Aplicando a transformada de Fourier definida por,

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikR_j} c_j \quad , \quad c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR_j} c_k \quad (3.49)$$

e substituindo na Eq.3.17, obtemos,

$$\begin{aligned} H = & \sum_j \left[ \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{i(k-k')R_j} \left( -\mu c_k^\dagger c_{k'} \right) - \right. \\ & - t \left( \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{i(k-k')R_j} e^{-ik'a} c_k^\dagger c_{k'} + \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{i(k'-k)R_j} e^{-ika} c_k^\dagger c_{k'} \right) + \\ & \left. + |\Delta| e^{-i\phi} \left( \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{i(k+k')R_j} e^{ika} c_k^\dagger c_{k'}^\dagger \right) + |\Delta| e^{i\phi} \left( \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{-i(k+k')R_j} e^{ik'a} c_k c_{k'} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.50)$$

que após algumas manipulações algébricas

$$H_k = \sum_k [-\mu - 2t \cos(ka)] c_k^\dagger c_k + |\Delta| e^{-i\phi} \sum_k e^{-ika} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger + |\Delta| e^{i\phi} \sum_k e^{ika} c_k c_{-k} \quad (3.51)$$

utilizando as seguintes relações

$$\sum_k e^{-ika} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger = -i \sum_k \operatorname{sen}(ka) c_{-k}^\dagger c_k^\dagger \quad \text{e} \quad \sum_k e^{ika} c_k c_{-k} = i \sum_k \operatorname{sen}(ka) c_k c_{-k} \quad (3.52)$$

chegamos finalmente à expressão,

$$H = \sum_k \left\{ -[\mu + 2t \cos(ka)] c_k^\dagger c_k - i|\Delta| e^{-i\phi} \operatorname{sen}(ka) c_{-k}^\dagger c_k^\dagger + i|\Delta| e^{i\phi} \operatorname{sen}(ka) c_k c_{-k} \right\} \quad (3.53)$$

A menos de uma constante, este hamiltoniano pode ser escrito no formalismo de Bogoliubov-de Gennes, usando como base os *spinors* de Nambu  $\begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix}$  da seguinte maneira,

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & \tilde{\Delta}_k^* \\ \tilde{\Delta}_k & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

onde  $\tilde{\Delta}_k = i|\Delta| e^{i\phi} \operatorname{sen}(ka)$  e  $\xi_k = -[\mu + 2t \cos(ka)]$ . Com relação de dispersão,

$$E_\pm(k) = \pm \sqrt{(2t \cos(k) + \mu)^2 + (2\Delta \operatorname{sen}(k))^2}. \quad (3.55)$$

Queremos encontrar as condições para as quais o *gap* se fecha, ou seja, condições para que haja excitações *gapless*, pela Eq. 3.55 fazendo  $E_\pm(k) = 0$  encontramos,

$$4(t^2 - \Delta^2) \cos^2(k) + 4\mu t \cos(k) + \mu^2 + 4\Delta^2 = 0 \quad (3.56)$$

que para ser satisfeita para qualquer valor de  $\Delta \neq 0$  precisamos que os termos  $-4\Delta^2 \cos^2(k)$  e  $4\Delta^2$  se anulem mutualmente, o que ocorre para  $\cos(k) = \pm 1$ , ou seja, para  $k = \pm\pi$  e  $k = 0$ ,

$$\begin{cases} (2t - \mu)^2 = 0, & \text{para } k = \pm\pi \\ (2t + \mu)^2 = 0, & \text{para } k = 0 \end{cases} \quad (3.57)$$

Dessa forma, concluímos que na cadeia de Kitaev há dois pontos  $k$  onde o *gap* se fecha, um em  $k = 0$  para  $\mu = -2t$  e outro em  $k = \pm\pi$  para  $\mu = 2t$  que no modelo *tight-binding* da Seção 3.1 correspondem a  $\tilde{\mu} = 0$  e a  $\tilde{\mu} = \frac{2}{ma^2}$  respectivamente.

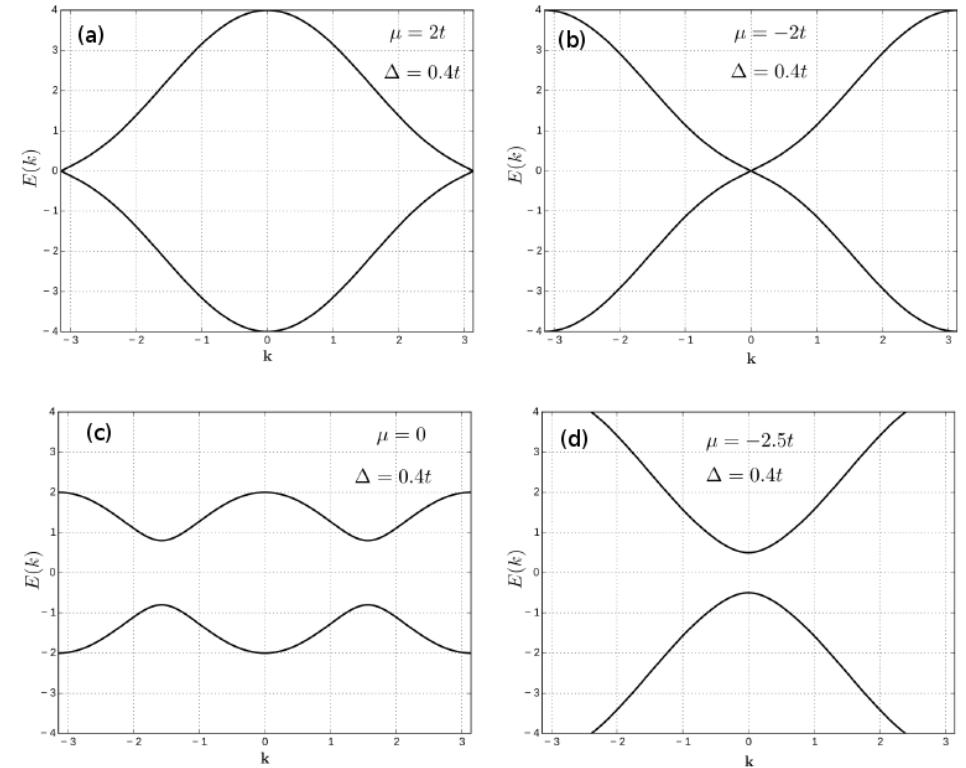


Figura 17 – Relações de dispersão  $E(k)$  para a cadeia de Kitaev para  $\Delta = 0.4t$  e vários valores de  $\mu$ . Em (a) vemos o fechamento do *gap* para  $\mu = 2t$  em  $k = 0$  e em (b) o fechamento para  $\mu = -2t$  em  $k = \pm\pi$ . Esses dois valores de  $\mu$  definem duas fases *gapped* distintas. Como podemos ver em (c) e (d) temos que  $|\mu| < 2t$  e  $|\mu| > 2t$  respectivamente correspondem a duas fases com *gap* porém qualitativamente distintas. Importante salientar que não podemos variar  $\mu$  entre estas fases continuamente sem fechar do *gap* (o fechamento sempre ocorre para  $\mu = \pm 2t$ ).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos definir duas fases, uma para  $|\mu| > 2t$  e outra para  $|\mu| < 2t$ , separadas pelo fechamento do *gap* como mostrado na Fig. 17 que são denominadas por fase topológica trivial e não-trivial. Está além do escopo deste trabalho definir com rigor as propriedades topológicas que as bandas destas fases possuem, nos restringimos a apresentar no Apêndice C a definição de um invariante topológico ( $\nu = \pm 1$ ) que caracteriza as duas fases discutidas neste capítulo.

Como verificamos pela diagonalização da cadeia de Kitaev e mostrado na Fig. 16 quando  $|\mu| < 2t$  ocorre o surgimento de Majoranas no sistema finito (mostramos os cálculos para uma cadeia com  $N = 50$  sítios) e portanto a denominada fase topológica não-trivial está associada à presença de Majoranas no sistema. Essa associação entre fase topológica definida em *bulk* (calculado para condições de contorno periódicas) e o surgimento de *edge-states*, que na cadeia de Kitaev são os modos de Majorana, para o sistema finito é conhecida como correspondência *bulk-edge*. (33)



# 4 Desenvolvimento

Neste capítulo vamos apresentar o sistema que iremos estudar nesta dissertação composto por um ponto quântico de um nível eletrônico *spinless* não-interagente acoplado a duas cadeias de Kitaev. Inicialmente mostraremos como obter as funções de Green que serão calculadas numericamente através de um algoritmo iterativo. Posteriormente escreveremos o Hamiltoniano do nosso sistema no formalismo de Bogoliubov-de Gennes e teremos dessa forma acesso a todos os auto-estados de excitação do nosso sistema.

## 4.1 Formalismo das funções de Green

O sistema que iremos analisar neste trabalho consiste em um ponto quântico de um nível *spinless* acoplado lateralmente a duas cadeias de Kitaev e conectado a dois contatos metálicos, como mostrado na Fig. 18.

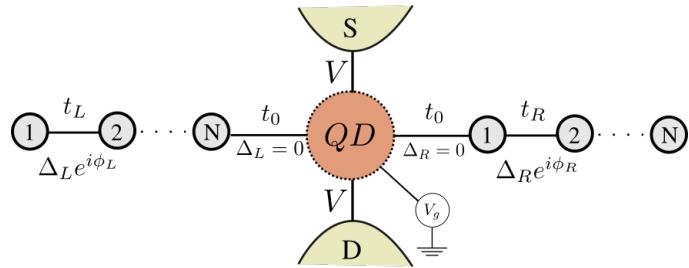


Figura 18 – Sistema composto por um quantum-dot conectado a dois contatos metálicos e acoplado lateralmente a duas cadeias de Kitaev.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O Hamiltoniano que o descreve é dado por:

$$H = H_{dot} + H_{leads} + H_{chains} + H_{dot-leads} + H_{dot-chains}, \quad (4.1)$$

onde,

$$H_{dot} = \varepsilon_{dot} d^\dagger d, \quad (4.2)$$

descreve o quantum-dot em que  $d^\dagger$  e  $d$  são operadores de criação e aniquilação de um elétron no nível do ponto  $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ , este controlado pela voltagem de gate ( $V_g$ ).

$$H_{leads} = \sum_{k,l=S,D} (\varepsilon_{k,l} - \varepsilon_f) c_{k,l}^\dagger c_{k,l}, \quad (4.3)$$

os dois contatos metálicos (S=source e D=drain), são descritos como dois reservatórios de elétrons livres. O termo

$$H_{chains} = - \sum_{c=R,L} \sum_{j=1}^N \mu_c \left( c_{j,c}^\dagger c_{j,c} - \frac{1}{2} \right) - \sum_{c=R,L} \sum_{j=1}^{N-1} \left( t_c c_{j,c}^\dagger c_{j+1,c} + |\Delta_c| e^{i\phi_c} c_{j,c}^\dagger c_{j+1,c}^\dagger + H.C. \right), \quad (4.4)$$

corresponde as duas cadeias de Kitaev, direita (R) e esquerda(L), em que  $\mu_c$  são os potenciais químicos,  $t_c$  os termos de *hopping* e  $\Delta_c e^{i\phi_c}$  os potenciais de pareamento supercondutor. Os termos de acoplamento do ponto quântico com os contatos e as cadeias são, respectivamente,

$$H_{dot-leads} = \sum_{k,l=S,D} (V_{k,l} d^\dagger c_{l,k} + V_{k,l}^* c_{l,k}^\dagger d), \quad (4.5)$$

$$H_{dot-chains} = t_{0,L} (d^\dagger c_{N,L} + c_{N,L}^\dagger d) + t_{0,R} (d^\dagger c_{1,R} + c_{1,R}^\dagger d), \quad (4.6)$$

os termos  $V_{k,l}$  representam o tunelamento de um elétron entre o ponto e os contatos, e  $t_{0,c}$  o tunelamento entre o ponto e as cadeias de Kitaev.

Antes de prosseguirmos para o cálculo das funções de Green, reescreveremos os Hamiltonianos das cadeias de Kitaev e do ponto em termos de operadores de Majorana. Com as seguintes substituições, em que a fase supercondutora  $e^{i\phi_c}$  é incorporada na definição dos operadores de Majorana,

$$c_{j,c} = \frac{e^{i\phi_c/2}}{2} (\gamma_{j,c}^B + i\gamma_{j,c}^A), \quad (4.7)$$

$$c_{j,c}^\dagger = \frac{e^{-i\phi_c/2}}{2} (\gamma_{j,c}^B - i\gamma_{j,c}^A), \quad (4.8)$$

em que os operadores  $\gamma_{j,c}^\alpha$  obedecem  $\{\gamma_{i,c}^\alpha, \gamma_{j,c}^\beta\} = 2\delta_{\alpha,\beta}\delta_{i,j}$  e  $\gamma_{j,c}^\alpha = (\gamma_{j,c}^\alpha)^\dagger$ , obtemos

$$H_{chains} = -\frac{\mu}{2} \sum_{c=R,L} \sum_{j=1}^N \left( 1 + i\gamma_{j,c}^B \gamma_{j,c}^A \right) - \frac{i}{2} \sum_{c=R,L} \sum_{j=1}^{N-1} \left[ (|\Delta_c| + t) \gamma_{j,c}^B \gamma_{j+1,c}^A + (|\Delta_c| - t) \gamma_{j,c}^A \gamma_{j+1,c}^B \right]. \quad (4.9)$$

Para os operadores do ponto quântico fazemos as seguintes substituições,

$$d = \frac{1}{2} (\gamma_d^B + i\gamma_d^A), \quad (4.10)$$

$$d^\dagger = \frac{1}{2} (\gamma_d^B - i\gamma_d^A), \quad (4.11)$$

e obtemos,

$$H_{dot} = \frac{\varepsilon_{dot}}{2} (1 + i\gamma_d^B \gamma_d^A), \quad (4.12)$$

$$H_{dot-leads} = \sum_k \sum_{l=S,D} \left[ \frac{V_{l,k}}{2} (\gamma_d^B - i\gamma_d^A) c_{l,k} + \frac{V_{l,k}^*}{2} c_{l,k}^\dagger (\gamma_d^B + i\gamma_d^A) \right], \quad (4.13)$$

$$H_{dot-chains} = -\frac{i}{2} \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,c} \left[ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) (\gamma_d^B \gamma_\alpha^A - \gamma_d^A \gamma_\alpha^B) + \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) (\gamma_d^B \gamma_\alpha^B - \gamma_d^A \gamma_\alpha^A) \right], \quad (4.14)$$

onde o índice  $\alpha$  corresponde aos sítios N-ésimo da cadeia da esquerda (L) e o primeiro sítio da cadeia da direita (R) que estão acoplados ao ponto quântico. A função de Green retardada para o ponto quântico é definida por,

$$G_{d,d}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{d(t), d^\dagger(t')\} \rangle \quad (4.15)$$

onde  $\theta(t - t')$  é a função de Heaviside e a média  $\langle \dots \rangle$  pode ser calculada tanto como uma média termodinâmica de equilíbrio quanto como um valor esperado medido em  $T = 0$ . Usando as relações Eq.4.10 e Eq.4.11 podemos relacionar a função de Green para elétrons e Majoranas,

$$G_{d,d}^r(t, t') = \frac{1}{4} \left[ G_{Ad,Ad}^r(t, t') + G_{Bd,Bd}^r(t, t') - i \left( G_{Ad,Bd}^r(t, t') + G_{Bd,Ad}^r(t, t') \right) \right], \quad (4.16)$$

onde  $G_{\beta d, \delta d}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{\gamma_d^\beta(t), \gamma_d^\delta(t')\} \rangle$  é a função de Green de Majorana. Substituindo na Eq.A.50, obtemos pela equação de movimento, a seguinte expressão para  $G_{Ad,Ad}^r$  (de agora em diante omitiremos o sobrescrito a fim de não sobrecarregar a notação),

$$\varepsilon \langle \langle \gamma_d^A, \gamma_d^A \rangle \rangle = \langle \{ \gamma_d^A, \gamma_d^A \} \rangle + \langle \langle [\gamma_d^A, H]; \gamma_d^A \rangle \rangle \quad (4.17)$$

onde usamos a notação de Zubarev, (34)  $G_{Ad,Ad} \equiv \langle \langle \gamma_d^A, \gamma_d^A \rangle \rangle$  que será adotada de agora em diante. Para calcularmos a função de Green, precisamos calcular o comutador do segundo termo. Utilizando a relação de anti-comutação dos operadores de Majorana  $\{\gamma_d^A, \gamma_d^A\} = 2$ , obtemos,

$$[\gamma_d^A, H] = \frac{i}{2} \varepsilon_{dot} [\gamma_d^A, \gamma_d^B \gamma_d^A] + \frac{i}{2} \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,s} \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) \left( [\gamma_d^A, \gamma_d^B \gamma_\alpha^A] - [\gamma_d^A, \gamma_d^A \gamma_\alpha^B] \right) + \quad (4.18)$$

$$+ \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) \left( [\gamma_d^A, \gamma_d^B \gamma_\alpha^B] - [\gamma_d^A, \gamma_d^A \gamma_\alpha^A] \right) + \sum_{k,l=S,D} \left\{ \frac{i}{2} \left( V_{k,l} c_{k,l}^\dagger - V_{k,l} c_{k,l} \right) [\gamma_d^A, \gamma_d^A] \right\} + \quad (4.19)$$

$$+ \left\{ \frac{i}{2} \left( V_{k,l}^* c_{k,l}^\dagger - V_{k,l} c_{k,l} \right) [\gamma_d^A, \gamma_d^B] \right\} \quad (4.20)$$

como  $[\gamma_d^A, \gamma_d^B \gamma_{1,c}^A] = 0$ ,  $[\gamma_d^A, \gamma_d^A \gamma_{1,c}^B] = 2\gamma_{1,c}^B$ ,  $[\gamma_d^A, \gamma_d^B \gamma_{1,c}^B] = 0$ ,  $[\gamma_d^A, \gamma_d^A \gamma_{1,c}^A] = 2\gamma_{1,c}^A$  e  $[\gamma_d^A, \gamma_d^A] = 0$ , obtemos,

$$\varepsilon \langle \langle \gamma_d^A, \gamma_d^A \rangle \rangle = 2 - i \varepsilon_{dot} \langle \langle \gamma_d^B, \gamma_d^A \rangle \rangle - i \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,c} \left[ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) \langle \langle \gamma_\alpha^B, \gamma_d^A \rangle \rangle + \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) \langle \langle \gamma_\alpha^A, \gamma_d^A \rangle \rangle \right] \quad (4.21)$$

$$- i \sum_{k,l} \left( V_{k,l}^* \langle \langle c_{k,l}^\dagger, \gamma_d^A \rangle \rangle + V_{k,l} \langle \langle c_{k,l}, \gamma_d^A \rangle \rangle \right) \quad (4.22)$$

precisamos, agora, encontrar as funções de Green  $G_{lk,Ad} \equiv \langle \langle c_{k,l}, \gamma_d^A \rangle \rangle$  e  $\tilde{G}_{lk,Ad} \equiv \langle \langle c_{k,l}^\dagger, \gamma_d^A \rangle \rangle$ . Novamente substituindo-as na Eq.A.50, encontramos pela equação de movimento,

$$\varepsilon \langle \langle c_{k,l}^\dagger; \gamma_d^A \rangle \rangle = \langle [c_{k,l}^\dagger, \gamma_d^A]_+ \rangle + \langle \langle [c_{k,l}^\dagger, H]_+; \gamma_d^A \rangle \rangle \quad (4.23)$$

$$= -\varepsilon_{k,l} \langle \langle c_{k,l}^\dagger; \gamma_d^A \rangle \rangle + \frac{V_{k,l}}{2} \left( \langle \langle \gamma_d^B; \gamma_d^A \rangle \rangle - i \langle \langle \gamma_d^A; \gamma_d^A \rangle \rangle \right) \quad (4.24)$$

e

$$\varepsilon \langle \langle c_{k,l}; \gamma_d^A \rangle \rangle = \langle [c_{k,l}, \gamma_d^A]_+ \rangle + \langle \langle [c_{k,l}, H]_+; \gamma_d^A \rangle \rangle \quad (4.25)$$

$$= \varepsilon_{k,l} \langle \langle c_{k,l}; \gamma_d^A \rangle \rangle - \frac{V_{k,l}^*}{2} \left( \langle \langle \gamma_d^B; \gamma_d^A \rangle \rangle + i \langle \langle \gamma_d^A; \gamma_d^A \rangle \rangle \right) \quad (4.26)$$

substituindo na Eq.4.22, chegamos a

$$\varepsilon G_{Ad,Ad} = 2 - i \varepsilon_{dot} G_{Bd,Ad} - i \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,s} \left[ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{B\alpha,Ad} + \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{A\alpha,Ad} \right] \quad (4.27)$$

$$- \frac{i}{2} \sum_{k,l} \left[ \frac{-V_{k,l}^* V_{k,l}}{\varepsilon - \varepsilon_{k,l}} (G_{Bd,Ad} - iG_{Ad,Ad}) + \frac{V_{k,l}^* V_{k,l}}{\varepsilon - \varepsilon_{k,l}} (G_{Bd,Ad} - iG_{Ad,Ad}) \right] \quad (4.28)$$

agrupando os termos iguais,

$$\left\{ \varepsilon - \sum_{k,l} \frac{|V_{k,l}|^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{k,l}} + \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_{k,l}} \right] \right\} G_{Ad,Ad} = \quad (4.29)$$

$$2 - i \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,s} \left[ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{B\alpha,Ad} + \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{A\alpha,Ad} \right] - \quad (4.30)$$

$$- i \left\{ \varepsilon_{dot} + \sum_{k,l} \frac{|V_{k,l}|^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{k,l}} + \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_{k,l}} \right] \right\} G_{Bd,Ad} \quad (4.31)$$

podemos simplificar a notação definindo

$$\Sigma_L = \sum_{k,l} \frac{|V_{k,l}|^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{k,l}} + \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_{k,l}} \right] \quad (4.32)$$

e

$$\mu_0 = \varepsilon_{dot} - \sum_{k,l} \frac{|V_{k,l}|^2}{2} \left[ \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{k,l}} + \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_{k,l}} \right] \quad (4.33)$$

repetindo este procedimento para as funções  $G_{Ad,Bd}$ ,  $G_{Bd,Ad}$  e  $G_{Bd,Bd}$ , chegamos a um sistema de equações acopladas,

$$(\varepsilon - \Sigma_L) G_{Ad,Ad} = 2 + i\mu_0 G_{Bd,Ad} - i \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,c} \left[ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{B\alpha,Ad} + \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{A\alpha,Ad} \right] \quad (4.34)$$

$$(\varepsilon - \Sigma_L) G_{Bd,Ad} = -i\mu_0 G_{Ad,Ad} + i \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,c} \left[ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{A\alpha,Ad} + \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{B\alpha,Ad} \right], \quad (4.35)$$

$$(\varepsilon - \Sigma_L) G_{Ad,Bd} = i\mu_0 G_{Bd,Bd} - i \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,c} \left[ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{B\alpha,Bd} + \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{A\alpha,Bd} \right], \quad (4.36)$$

$$(\varepsilon - \Sigma_L) G_{Bd,Bd} = 2 - i\mu_0 G_{Ad,Bd} + i \sum_{\alpha=N,L;1,R} t_{0,s} \left[ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{A\alpha,Bd} + \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) G_{B\alpha,Bd} \right] \quad (4.37)$$

Estas equações podem ser reescritas em forma matricial, definindo

$$\bar{G}_{d,d}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} G_{Ad,Ad} & G_{Ad,Bd} \\ G_{Bd,Ad} & G_{Bd,Bd} \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

$$\bar{G}_{\alpha,d}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} G_{A\alpha,Ad} & G_{A\alpha,Bd} \\ G_{B\alpha,Ad} & G_{B\alpha,Bd} \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

$$V_0 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i\mu_0 \\ -i\mu_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.40)$$

e

$$W_{0,c} = -\frac{it_{0,c}}{2} \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) & -\cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\phi_c}{2}\right) & \sin\left(\frac{\phi_c}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

onde  $j = 1\dots N$  corresponde ao índice do sítio e  $s = L, R$  indica a cadeia. Reescrevendo em forma matricial, obtemos

$$\bar{G}_{d,d}(\varepsilon) = \bar{g}_d(\varepsilon) + \bar{g}_d(\varepsilon) W_{0,R}^\dagger \bar{G}_{1R,d}(\varepsilon) + \bar{g}_d(\varepsilon) W_{0,L}^\dagger \bar{G}_{1L,d}(\varepsilon) \quad (4.42)$$

em que

$$\bar{g}_d(\varepsilon) = \frac{g_d(\varepsilon)}{I_{2 \times 2} - g_d(\varepsilon)V_0}, \quad (4.43)$$

corresponde à função de Green do ponto quântico na presença dos dois contatos metálicos, com

$$g_d(\varepsilon) = \frac{2}{\varepsilon - \Sigma_L - i\eta} I_{2 \times 2}. \quad (4.44)$$

Como podemos ver na Eq.4.42, para se calcular a função  $\bar{G}_{d,d}(\varepsilon)$  precisamos das funções não-locais  $\bar{G}_{1R,d}(\varepsilon)$  e  $\bar{G}_{1L,d}(\varepsilon)$ , que relacionam operadores do ponto quântico e das duas cadeias. No entanto antes de obtermos  $\bar{G}_{d,d}(\varepsilon)$  precisamos calcular a função de Green de cada cadeia separadamente. Vamos começar o cálculo com a cadeia da direita ( $c = R$ ). Consideramos apenas o N-ésimo sitio isolado e em seguida adicionamos o (N-1)-ésimo sítio . Aplicando a equação de movimento para este sistema obtemos,

$$\bar{G}_{(N-1)R,(N-1)R}(\varepsilon) = \bar{g}_{(N-1)R,(N-1)R}(\varepsilon) + \bar{g}_{(N-1)R,(N-1)R}(\varepsilon)W_R\bar{G}_{NR,L(N-1)R}(\varepsilon), \quad (4.45)$$

onde

$$\bar{g}_{jR,jR}(\varepsilon) = \frac{g(\varepsilon)}{I_{2 \times 2} - g(\varepsilon)V_s}, \quad (4.46)$$

$$g(\varepsilon) = \frac{2}{\varepsilon - i\eta} I_{2 \times 2}, \quad (4.47)$$

$$V_R = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i\mu_R \\ -i\mu_R & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.48)$$

e

$$W_R = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & i(\Delta_R + t) \\ i(\Delta_R - t) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.49)$$

Calculando  $\bar{G}_{NR,(N-1)R}(\varepsilon)$ ,

$$\bar{G}_{NR,(N-1)R}(\varepsilon) = \bar{g}_{NR,NR}W_R^\dagger\bar{G}_{(N-1)R,(N-1)R}(\varepsilon) \quad (4.50)$$

e substituindo na Eq. 4.45 chegamos a

$$\bar{G}_{(N-1)R,(N-1)R}(\varepsilon) = [I_{2 \times 2} - \bar{g}_{(N-1)R,(N-1)R} W_R \bar{g}_{NR,NR} W_c^\dagger]^{-1} \bar{g}_{(N-1)R,(N-1)R}, \quad (4.51)$$

que pode ser calculado já que  $\bar{g}_{NR,NR} = \bar{G}_{NR,NR}(\varepsilon) = \bar{g}_R(\varepsilon)$  é a função de Green para um sítio da cadeia isolado. Para o próximo sítio, substituímos  $\bar{g}_{(N-1)R,(N-1)R} \rightarrow \bar{G}_{(N-1)c,(N-1)c}(\varepsilon)$  e desta forma o processo iterativo é estabelecido, como mostrado esquematicamente na Fig. 19. Após  $N$  repetições obtemos a função de Green para o primeiro sítio da cadeia  $\bar{G}_{1R,1R}(\varepsilon)$ .

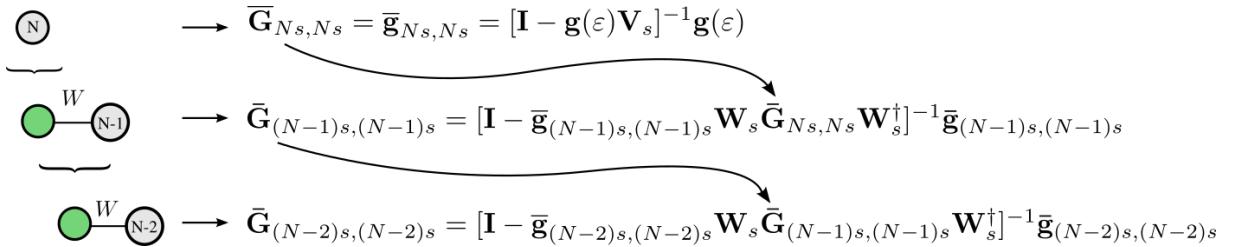


Figura 19 – Processo iterativo utilizado para se calcular as funções de Green de uma cadeia finita.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para obtermos a cadeia da esquerda ( $c = L$ ) seguimos o mesmo procedimento, porém começamos com o sítio 1 isolado e adicionamos o sítio 2. Ao final chegamos a seguinte relação, semelhante a obtida anteriormente porém note que temos o complexo conjugado das matrizes de acoplamento, onde, para o cálculo da cadeia da direita tínhamos  $W_R$  agora obtemos  $W_L^\dagger$ ,

$$\bar{G}_{2L,2L}(\varepsilon) = [I_{2 \times 2} - \bar{g}_{2L,2L} W_L^\dagger \bar{g}_{1L,1L} W_L]^{-1} \bar{g}_{2L,2L} \quad (4.52)$$

Novamente após  $N$  repetições, obtemos  $\bar{G}_{NL,NL}(\varepsilon)$ . Agora de posse das funções de Green das duas cadeias podemos calcular a função para o ponto quântico,

$$\bar{G}_{d,d}(\varepsilon) = [I_{2 \times 2} - \bar{g}_d(\varepsilon) W_{0,R} \bar{G}_{1R,1R}(\varepsilon) W_{0,R}^\dagger] \bar{g}_d(\varepsilon) \quad (4.53)$$

fazendo  $\bar{G}_{d,d}(\varepsilon) \rightarrow \bar{g}_d$  para assim chegarmos à função de Green no ponto quântico para o sistema completo,

$$\tilde{G}_{d,d}(\varepsilon) = [I_{2 \times 2} - \bar{g}_d(\varepsilon) W_{0,L} \bar{G}_{NL,NL}(\varepsilon) W_{0,L}^\dagger] \bar{g}_d(\varepsilon). \quad (4.54)$$

## 4.2 Formalismo de Bogoliubov-de Gennes

Nesta seção mostraremos a construção do Hamiltoniano no formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) inicialmente de uma única cadeia de Kitaev para em seguida montarmos o

Hamiltoniano para o sistema composto de duas cadeias e um ponto quântico.

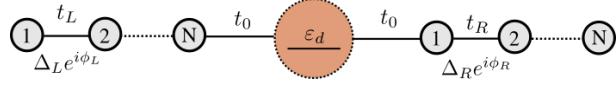


Figura 20 – Diagrama do sistema composto por um ponto quântico não-interagente *spinless* com um nível com energia  $\varepsilon_d$  acoplado a duas cadeias de Kitaev através de  $t_0$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

#### 4.2.1 Ponto quântico acoplado a uma cadeia

Queremos passar o Hamiltoniano da cadeia de Kitaev para o formalismo de Bogoliubov-de Gennes no espaço real, de forma que possamos escrever  $H_{kitaev} = \frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger \mathcal{H}_{BdG} \mathbf{C}$ , com vetor coluna  $\mathbf{C} = (c_1, \dots, c_N, c_1^\dagger, \dots, c_N^\dagger)^T$ . Para isso escreveremos a matriz  $\mathcal{H}_{BdG}$  que é  $2N \times 2N$ , onde  $N$  é o número de sítios da cadeia, de forma compacta usando as matrizes de Pauli  $\tau$  que atuam no espaço de partícula-buraco e usando como base o vetor  $|n\rangle = (0, \dots, 1, 0, \dots)^T$  que corresponde ao  $n$ -ésimo sítio da cadeia. Reescreveremos o Hamiltoniano da cadeia de Kitaev (Eq.3.17),

$$H_{kitaev} = -\mu \sum_i c_i^\dagger c_i - t \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) - \sum_i (\Delta c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + \Delta^* c_{i+1} c_i), \quad (4.55)$$

por

$$\mathcal{H}_{BdG} = - \sum_i \mu \tau_z \otimes |n\rangle \langle n| - \sum_i [(t \tau_z + i \Delta \tau_y) \otimes |n\rangle \langle n+1| + H.c.]. \quad (4.56)$$

Expandindo a primeira somatória encontramos,

$$\sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} + \dots + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (4.57)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} + \dots + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}_{N \times N} \quad (4.58)$$

e os termos da segunda somatória

$$\sum_{n=1}^{N-1} |n\rangle\langle n+1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}_{N \times N} \quad (4.59)$$

$$\sum_{n=1}^{N-1} |n+1\rangle\langle n| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix}_{N \times N} \quad (4.60)$$

Podemos agora escrever a forma matricial de  $\mathcal{H}_{kitaev}$ ,

$$\mathcal{H}_{BdG} = \left( \begin{array}{cc|cc} -\mu & -t & 0 & -\Delta \\ -t & -\mu & -t & \Delta^* \\ -t & \ddots & \ddots & \Delta^* \\ \ddots & \ddots & -t & \ddots & \ddots & -\Delta \\ \hline & -t & -\mu & & & \Delta^* & 0 \\ 0 & \Delta & & \mu & t & & \\ -\Delta^* & 0 & \Delta & t & \mu & t & \\ -\Delta^* & \ddots & \ddots & t & \ddots & \ddots & \\ \ddots & \ddots & \Delta & \ddots & \ddots & t & \\ -\Delta^* & 0 & & t & \mu & & \end{array} \right)_{2N \times 2N} \quad (4.61)$$

$$= \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{p} \\ \mathbf{p}^\dagger & -\mathbf{h} \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

onde

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} -\mu & -t & & \\ -t & -\mu & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -t \\ & & -t & -\mu \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta & & \\ \Delta^* & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -\Delta \\ & & \Delta^* & 0 \end{pmatrix} \quad (4.63)$$

Se considerarmos condições periódicas de contorno devemos adicionar os termos  $\mathbf{h}_{1,N} = \mathbf{h}_{N,1} = -t$  e  $\mathbf{p}_{1,N} = -\mathbf{p}_{N,1} = -\Delta$  nas matrizes acima. O Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{BdG}$  possui

a simetria de partícula-buraco definida pelo seguinte operador anti-unitário ,

$$\Xi = \tau_x K, \quad \Xi^2 = 1 \quad (4.64)$$

onde  $\tau_x$  é a matriz de Pauli que atua no espaço partícula-buraco. Vamos calcular a atuação deste operador no Hamiltoniano,

$$\begin{aligned} \Xi \mathcal{H}_{BdG} \Xi^{-1} &= (\tau_x K) \mathcal{H}_{BdG} (\tau_x K)^{-1} \\ &= \tau_x \mathcal{H}_{BdG}^* K (\tau_x K)^{-1} \\ &= \tau_x \mathcal{H}_{BdG}^* K K^{-1} \tau_x \\ &= \tau_x \mathcal{H}_{BdG}^* \tau_x \end{aligned} \quad (4.65)$$

utilizando a expressão para  $\mathcal{H}_{BdG}$  obtida anteriormente encontramos que a condição  $\Xi \mathcal{H}_{BdG} \Xi^{-1} = -\mathcal{H}_{BdG}$  é satisfeita uma vez que as relações  $\mathbf{p}^\dagger = -\mathbf{p}^*$  e  $\mathbf{h}^\dagger = \mathbf{h}$  são válidas. Vamos demonstrar a seguinte propriedade proveniente desta simetria de partícula-buraco: Se  $\varepsilon$  é um auto-valor de  $\mathcal{H}_{BdG}$  com  $\vec{V} = \left( u_1, \dots, u_N, v_1, \dots, v_N \right)^T$  como auto-vetor, então  $-\varepsilon$  também é um auto-valor com o seguinte auto-vetor  $\vec{V}' = \left( v_1^*, \dots, v_N^*, u_1^*, \dots, u_N^* \right)^T$ . Da equação de auto-valores  $\mathcal{H}_{BdG} \vec{V} = \varepsilon \vec{V}$  obtemos

$$\begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{p} \\ \mathbf{p}^\dagger & -\mathbf{h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix}, \quad (4.66)$$

que pode ser escrita por

$$\mathbf{h}_{ij} u_j + \mathbf{p}_{ij} v_j = \varepsilon u_j, \quad (4.67)$$

$$-\mathbf{p}_{ij}^* u_j - \mathbf{h}_{ij} v_j = \varepsilon v_j, \quad (4.68)$$

Como demonstramos anteriormente que  $\mathbf{p}^\dagger = -\mathbf{p}^*$  e  $\mathbf{h}^\dagger = \mathbf{h}$ , após conjugar e multiplicar por  $-1$  as equações acima encontramos

$$\mathbf{h}_{ij} v_j^* + \mathbf{p}_{ij} u_j^* = -\varepsilon v_j^*, \quad (4.69)$$

$$-\mathbf{p}_{ij}^* v_j - \mathbf{h}_{ij} u_j^* = -\varepsilon u_j^*, \quad (4.70)$$

escrevendo na forma matricial chegamos a

$$\begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{p} \\ \mathbf{p}^\dagger & -\mathbf{h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ \mathbf{u}^* \end{pmatrix} = -\varepsilon \begin{pmatrix} \mathbf{v}^* \\ \mathbf{u}^* \end{pmatrix}, \quad (4.71)$$

que corresponde a equação de auto-valores  $\mathcal{H}_{BdG} \vec{V}' = -\varepsilon \vec{V}'$ . Portanto uma consequência do formalismo de Bogoliubov-de Gennes é a duplicação do espectro de energia de  $\mathcal{H}_{BdG}$ .

### 4.2.2 Ponto quântico acoplado a duas cadeias

A seguir iremos montar nosso modelo composto por duas cadeias de Kitaev com  $N$  sítios cada e acopladas a um ponto quântico de um nível descrito pelo Hamiltoniano

$$H = H_{dot} + H_{kitaevs} + H_{dot-kitaevs}, \quad (4.72)$$

$$(4.73)$$

onde

$$H_{dot} = \varepsilon_d c_d^\dagger c_d, \quad (4.74)$$

corresponde ao termo do ponto quântico não-interagente em energia  $\varepsilon_d$ ,

$$H_{kitaevs} = -\mu \sum_{i,s} c_{i,s}^\dagger c_{i,s} - t \sum_{i,s} \left( c_{i,s}^\dagger c_{i+1,s} + c_{i+1,s}^\dagger c_{i,s} \right) - \sum_{i,s} \left( \Delta_s c_{i,s}^\dagger c_{i+1,s}^\dagger + \Delta_s^* c_{i+1,s} c_{i,s} \right) \quad (4.75)$$

descreve as duas cadeias de Kitaev onde o índice  $s = L, R$  indica o lado da cadeia com relação ao ponto como mostrado na Fig. 20 e  $i = 1 \dots N$  indica o sítio,

$$H_{dot-kitaevs} = t_{0,L} (d^\dagger c_{N,L} + c_{N,L}^\dagger d) + t_{0,R} (d^\dagger c_{1,R} + c_{1,R}^\dagger d), \quad (4.76)$$

descreve os acoplamentos entre o ponto e as cadeias que ocorrem nos sítios  $N$  da cadeia L e no sitio 1 da cadeia R. Seguindo o procedimento feito na seção anterior vamos rescrever o Hamiltoniano  $H$  dado anteriormente por

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{C}^\dagger \cdot \mathcal{H}_{BdG} \cdot \mathbf{C}, \quad (4.77)$$

onde

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} c_{1,L} & \dots & c_d & \dots & c_{NR} & c_{1L}^\dagger & \dots & c_d^\dagger & \dots & c_{NR}^\dagger \end{pmatrix}^T, \quad (4.78)$$

$$\mathcal{H}_{BdG} = \begin{pmatrix} \mathbf{h} & \mathbf{p} \\ \mathbf{p}^\dagger & -\mathbf{h} \end{pmatrix}_{(4N+2) \times (4N+2)} \quad (4.79)$$

onde definimos os seguintes blocos,

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} -\mu & -t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & -\mu & -t_{0,L} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_{0,L} & -\varepsilon_d & -t_{0,R} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_{0,R} & -\mu & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & -t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t & -\mu \end{pmatrix}_{2N+1} \quad (4.80)$$

e

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta_L & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_L^* & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & -\Delta_R \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_R^* & 0 \end{pmatrix}_{2N+1} \quad (4.81)$$

É importante notar que  $\mathcal{H}_{BdG}$  ainda possui simetria de partícula-buraco discutido anteriormente mesmo contendo duas cadeias de Kitaev e o ponto quântico e portanto obteremos um espectro duplicado ao diagonalizarmos, por conveniência iremos utilizar apenas o espectro com  $\varepsilon \geq 0$  nesta dissertação.

### 4.3 Conclusões

Neste capítulo utilizamos dois formalismos para descrever nosso sistema. Com as funções de Green obtidas na Seção 4.1 iremos calcular no capítulo seguinte a densidade de estados no ponto quântico e a condutância medida através deste por dois terminais de forma numérica. Como o sistema que estamos considerando não possui interações somos capazes de resolver exatamente através da diagonalização do Hamiltoniano escrito no formalismo de Bogoliubov-de Gennes mostrado na Seção 4.2. Dessa forma teremos acesso a todos o espectro e poderemos estudar o que ocorre com estados distantes do ponto quântico o que não seria possível apenas com as funções de Green. No Capítulo 5 vamos apresentar os resultados obtidos através dos dois formalismos aqui expostos.

# 5 Resultados

Neste capítulo apresentaremos os resultados obtidos para o sistema composto de um ponto quântico acoplado lateralmente a duas cadeias de Kitaev utilizando a técnica da função de Green com a finalidade de estudar o comportamento do modo de Majorana neste sistema. Inicialmente faremos uma revisão dos principais resultados obtidos para um ponto quântico acoplado a apenas dois contatos metálicos e em seguida acoplaremos uma única cadeia de Kitaev a fim de reproduzirmos os resultados apresentados em VERNEK et al. (1) Este é um caso particular do nosso sistema quando fazemos por exemplo  $t_{0,L} = 0$  na Eq.4.6.

Em seguida consideraremos as duas cadeias acopladas ao ponto quântico e estudaremos o surgimento dos modos de Majorana e sua dependência com a diferença de fase  $\Delta\phi$  entre as duas cadeias calculando a função de Green para o ponto quântico numericamente. Compararemos os resultados obtidos numericamente com um modelo efetivo que possui solução analítica onde poderemos desenvolver alguma intuição acerca dos modos de Majorana presentes no sistema.

Na última seção calcularemos numericamente as funções de onda dos modos de Majorana do nosso sistema através da diagonalização do Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes construído na Seção 4.2.

## 5.1 Ponto quântico acoplado a dois contatos metálicos

Vamos analisar alguns casos que apresentam solução analítica. Consideraremos, inicialmente, apenas um ponto quântico *spinless* não-interagente contendo um nível acoplado a dois contatos metálicos, como mostrado na Fig.21. O Hamiltoniano deste sistema consiste em tomarmos  $t_{0,s} = 0$  para ambas as cadeias na Eq. 4.1 na representação de Majorana,

$$H = H_{dot} + H_{leads} + H_{dot-leads} \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\varepsilon_{dot}}{2} (1 + i\gamma_d^B \gamma_d^A) + \sum_{k,l=S,D} (\varepsilon_{k,l} - \varepsilon_f) c_{k,l}^\dagger c_{k,l} + \\ &+ \sum_{k,l=S,D} \left[ \frac{V_{l,k}}{2} (\gamma_d^B - i\gamma_d^A) c_{l,k} + \frac{V_{l,k}^*}{2} c_{l,k}^\dagger (\gamma_d^B + i\gamma_d^A) \right], \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde a energia do ponto  $\varepsilon_{dot}$  é controlada pela voltagem aplicada  $V_g$  através da relação  $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ . Aplicando a técnica da equação de movimento neste Hamiltoniano obtemos as funções de Green dos operadores de Majorana do ponto quântico (ver Eq. da Seção 4.1). Vamos supor que  $V_{l,k} \equiv V_L$  seja independente de  $k$ , esta aproximação corresponde ao limite

de banda-larga (Wide-Band Limit) como mostrado no Apêndice B.2 e que os contatos são simétricos  $\Gamma_S = \Gamma_d$ .

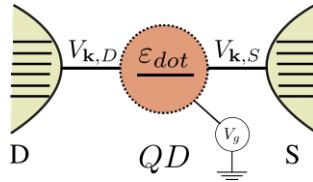


Figura 21 – Diagrama esquemático de um ponto quântico de um nível (spinless) acoplado a dois contatos metálicos

Fonte: Elaborada pelo autor.

$$\bar{G}_{d,d}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} G_{Ad,Ad} & G_{Ad,Bd} \\ G_{Bd,Ad} & G_{Bd,Bd} \end{pmatrix} = \frac{g_d(\varepsilon)}{(I_{2 \times 2} - g_d(\varepsilon)V_0)}, \quad (5.3)$$

com

$$g_d(\varepsilon) = \frac{2}{\varepsilon - \Sigma_L} I_{2 \times 2} \quad e \quad V_0 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i\mu_0 \\ -i\mu_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

onde  $\Sigma_L$  é a auto-energia dos contatos dada pela Eq.4.32. Para obtermos a função de Green do ponto quântico na representação de elétrons a partir da representação de Majorana, escrevemos,

$$G_{d,d}(\varepsilon) = \langle\langle d; d^\dagger \rangle\rangle \quad (5.5)$$

$$= \frac{1}{4} \langle\langle (\gamma_d^B + i\gamma_d^A); (\gamma_d^B - i\gamma_d^A) \rangle\rangle \quad (5.6)$$

$$= \frac{1}{4} [G_{Bd,Bd}(\varepsilon) + G_{Ad,Ad}(\varepsilon) + i(G_{Ad,Bd}(\varepsilon) + G_{Bd,Ad}(\varepsilon))]. \quad (5.7)$$

Substituindo os elementos de matriz da Eq. 5.3 na equação acima chegamos ao resultado

$$G_{d,d}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{dot} - \Lambda(\varepsilon) + i\Gamma_L(\varepsilon) + i\eta}, \quad (5.8)$$

onde  $\Lambda(\varepsilon) = 2|V_L|^2 Re[G_L(\varepsilon)]$  desloca o pólo da função de Green e  $\Gamma_L(\varepsilon) = 2\pi|V_L|^2\rho_L(\varepsilon)$  alarga o nível do ponto (*broadening*);  $G_L(\varepsilon)$  é a função de Green para os contatos, que estamos tomando como sendo simétricos.

De posse da função de Green  $G_{d,d}(\varepsilon)$  a densidade de estados no ponto quântico pode ser calculada por

$$\rho_{dot}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} Im[G_{d,d}(\varepsilon)] \quad (5.9)$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_L}{(\varepsilon - \varepsilon_{dot} - \Lambda_L)^2 + \Gamma_L^2}. \quad (5.10)$$

A condutância do sistema em resposta linear entre dois terminais é de acordo com MEIR et al (35),

$$G = \frac{e^2}{h} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{\Gamma_S \Gamma_D}{\Gamma_S + \Gamma_D} \{-2\text{Im } G_{d,d}(\varepsilon)\} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right). \quad (5.11)$$

que no limite  $T \rightarrow 0$  se torna

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{\Gamma_S \Gamma_D}{\Gamma_S + \Gamma_D} \{\text{Im } G_{d,d}(\varepsilon_f)\} \quad (5.12)$$

após substituir os valores encontramos (PENTEADO (36)),

$$G[e^2/h] = \frac{\Gamma_L^2}{(\varepsilon_{dot} + \Lambda_L(0))^2 + \Gamma_L^2}. \quad (5.13)$$

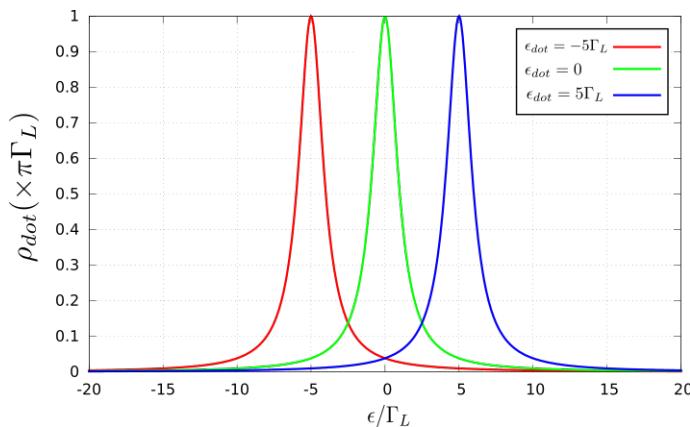


Figura 22 – Densidade de estados do ponto  $\rho_{dot}(\varepsilon)$  acoplado a dois contatos metálicos. Observamos que  $\rho_{dot}(\varepsilon)$  tem a forma de uma Lorentziana centrada em  $\varepsilon_{dot} + \Lambda_L$ , onde  $\varepsilon_{dot}$  é a energia do ponto controlada pela voltagem  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ). O alargamento dos picos é proporcional a  $\Gamma_L$ . No gráfico assumimos três valores distintos para  $\varepsilon_{dot}$ :  $-5\Gamma_L$  (linha vermelha), 0 (linha verde) e  $5\Gamma_L$  (linha azul) com  $t = 10 \text{ meV}$ ,  $\Gamma_L = 0,004t = 40 \mu\text{eV}$ ,  $\Lambda_L = 0.1t = 1 \text{ meV}$  e  $\varepsilon_f = 0$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.22 mostramos a densidade de estados do ponto quântico via Eq.5.10. Observamos que  $\rho_{dot}(\varepsilon)$  tem a forma de uma Lorentziana centrada em  $\varepsilon_{dot} + \Lambda_L$ , onde  $\varepsilon_{dot}$  é a energia do ponto controlada pela voltagem  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ). O alargamento dos picos é proporcional ao acoplamento com os contatos  $\Gamma_L$  devido à existência de um contínuo de estados metálicos. No gráfico assumimos três valores distintos para  $\varepsilon_{dot}$ :  $-5\Gamma_L$  (linha vermelha), 0 (linha verde) e  $5\Gamma_L$  (linha azul) com  $t = 10 \text{ meV}$ ,  $\Gamma_L = 0.004t = 40 \mu\text{eV}$ ,  $\Lambda_L = 0.1t = 1 \text{ meV}$  e  $\varepsilon_f = 0$ .

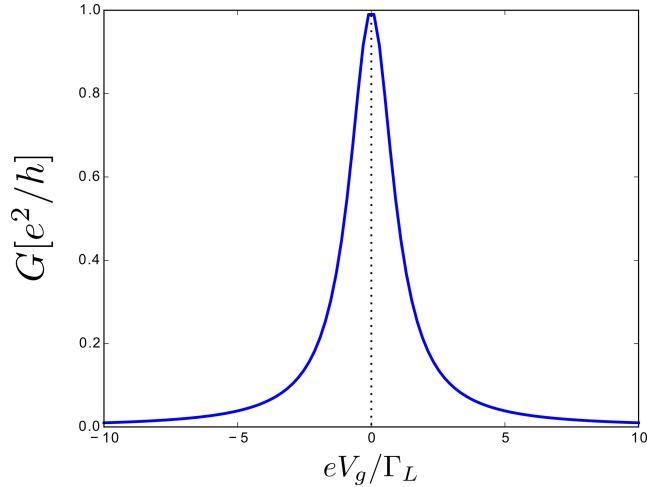


Figura 23 – Condutância no ponto quântico em função da potencial aplicado  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ). O pico da Lorentziana está centrado em  $\varepsilon_{dot} = 0$  quando o nível do ponto está alinhado com a energia de Fermi dos contatos  $\varepsilon_f = 0$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Na Fig.23 mostramos a condutância do ponto quântico em função do potencial  $V_g$  que controla a energia do nível  $\varepsilon_{dot}$ . O pico da Lorentziana é centrado em  $\varepsilon_{dot} = 0$  e corresponde a ressonância com o nível de Fermi dos contatos  $\varepsilon_f = 0$ .

## 5.2 Resultados numéricos

Vamos considerar agora um ponto quântico acoplado a dois contatos metálicos e acoplado lateralmente a uma única cadeia de Kitaev como mostrado na Fig.24. Nossa objetivo aqui é reproduzir os principais resultados previstos por VERNEK et al.(1) a fim de validarmos nossos cálculos e programas numéricos para em seguida estendermos o modelo adicionando uma segunda cadeia.

Foi previsto em VERNEK et al.(1) que enquanto a cadeia de Kitaev estiver na fase topológica, ou seja, com  $|\mu| < 2t$  e  $|\Delta| \neq 0$ , o modo de Majorana presente na extremidade da cadeia acoplada “vazará” para o ponto quântico e permanecerá no nível de Fermi dos contatos metálicos ( $\varepsilon_f = 0$ ), mesmo quando a energia do ponto ( $\varepsilon_{dot}$ ), controlada através da voltagem  $V_g$  aplicada, estiver muito abaixo ou acima de  $\varepsilon_f$ , ou seja, fora de ressonância. A presença deste modo de Majorana dentro do ponto quântico é verificada por sua assinatura característica na condutância, onde esta assume o valor  $\frac{1}{2} \frac{e^2}{h}$  (37) para uma ampla gama de  $V_g$  formando um plateau para a condutância.

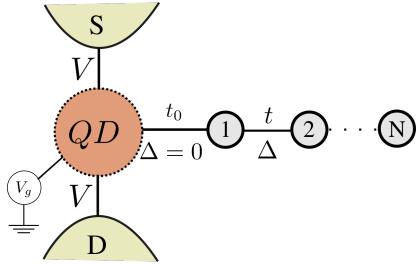


Figura 24 – Diagrama de um ponto quântico *spinless* de um nível sem interação acoplado lateralmente a uma cadeia de Kitaev e a dois contatos metálicos. A energia do ponto é controlada pela voltagem  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ).

Fonte: Elaborada pelo autor.

As funções de Green deste sistema podem ser obtidas seguindo os procedimentos descritos na Seção 4.1 considerando apenas uma cadeia. Fazendo por exemplo  $t_{0,L} = 0$  na Eq.4.6 ficaremos apenas com a cadeia da direita acoplada. Por se tratar de apenas um supercondutor temos a liberdade de escolher a fase  $\phi_R$ . Assim, podemos fazer uma transformação de *gauge*  $c_{j,R} \rightarrow e^{i\frac{\phi_R}{2}} c_{j,R}$  de forma que a fase  $\phi_R$  seja nula. Embora a escolha de outro valor para  $\phi_R$  resulte em funções de Green distintas, os resultados dos observáveis permanecem inalterados. Além disso, para simplificar a notação, chamaremos  $t_{0,R}$  de  $t_0$  de agora em diante. As funções de Green que obtemos para uma cadeia recaí nas funções estudadas em maiores detalhes em PENTEADO. (36)

Utilizando o método recursivo calculamos inicialmente a função de Green apenas da cadeia de Kitaev desacoplada do ponto quântico, isto é fazendo também  $t_{0,R} = 0$  na Eq. 4.6. Para a escolha dos parâmetros vamos utilizar como base os resultados obtidos em simulações realistas e experimentos (23),(38) e (39), assumindo  $\varepsilon_f = 0$ ,  $t = 10 \text{ meV}$ ,  $\Gamma_L = 40 \mu\text{eV}$ ,  $V_{S/D} = 0.1t = 1 \text{ meV}$  e  $\Delta_R = 0.2t = 2 \text{ meV}$ .

### 5.2.1 Densidade de estados

Calculamos a densidade de estados do primeiro sítio que chamaremos de  $\rho_{edge}(\varepsilon)$  e de um sítio situado no centro da cadeia que chamaremos de  $\rho_{bulk}(\varepsilon)$  para uma cadeia com 30.000 sítios. Assumindo os parâmetros  $\mu = 0$ ,  $\Delta = 0.2t$  e  $t = 10 \text{ meV}$  obtemos os resultados mostrados na Fig.25.

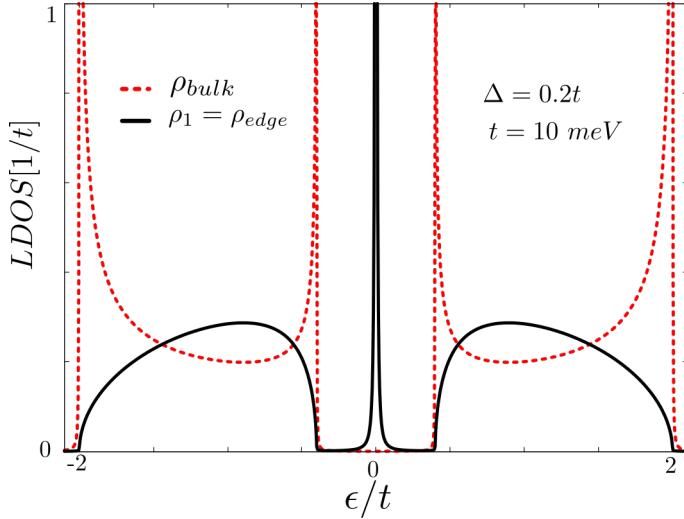


Figura 25 – Densidade de estados de *bulk*  $\rho_{bulk}$  (curva tracejada vermelha) e do primeiro sítio  $\rho_{edge}$  (curva sólida preta) de uma cadeia de Kitaev desacoplada do ponto quântico na fase topológica com  $\mu = 0$ . O termo de supercondutividade  $\Delta$  gera a abertura de um *gap* em torno da energia de Fermi  $\varepsilon_f = 0$  presente tanto na densidade de estados de *bulk* quanto na das extremidades. No primeiro sítio observamos o surgimento de um pico no meio do *gap* em  $\varepsilon = 0$  que corresponde ao modo de Majorana.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para a cadeia na fase topológica ( $|\mu| < 2t$ ), a emergência do modo de Majorana no meio do *gap* em  $\varepsilon = 0$  é evidente no primeiro sítio como mostrado pela curva sólida preta na Fig.25 ( $\rho_{edge}$ ). A densidade de estados para o *bulk* (curva tracejada vermelha da Fig.25) no entanto, não apresenta estados dentro do *gap*.

Quando acoplamos o ponto quântico ao primeiro sítio da cadeia e variamos este acoplamento  $t_0$  observamos o progressivo surgimento do pico em  $\varepsilon = 0$  na densidade de estados do ponto quântico, enquanto ocorre a diminuição da amplitude do pico em  $\varepsilon = 0$  e o surgimento de picos laterais no primeiro sítio da cadeia. Isto ocorre mesmo para um ponto quântico cuja energia esteja distante do nível de Fermi dos contatos metálicos ( $\varepsilon_f = 0$ ) em conformidade com os resultados obtidos em (1). Na Fig.26 utilizamos  $\varepsilon_{dot} = -5\Gamma_L$ .

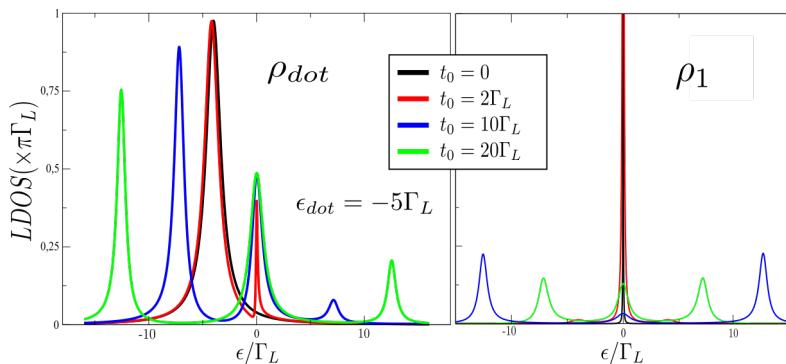


Figura 26 – Densidade de estados do ponto quântico (a) e do primeiro sítio da cadeia (b) em função da energia  $\varepsilon$  para diferentes valores de  $t_0$ , com  $\varepsilon_{dot} = -5\Gamma_L$ ,  $\Delta = 0.2t$ ,  $\Gamma_L = 0.004t$  e  $t = 10$  meV.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos confirmar esse “vazamento” do modo de Majorana presente inicialmente no primeiro sítio da cadeia para o ponto quântico ao compararmos as amplitudes dos picos de Majorana na densidade local de estados do ponto em  $\varepsilon = 0$ ,  $\rho_{dot}(0)$ , e no primeiro sítio da cadeia também em  $\varepsilon = 0$ ,  $\rho_{edge}(0)$ . Chamaremos de  $\tilde{\rho}_{dot}$  e  $\tilde{\rho}_{edge}$  as alturas destes picos normalizadas pelos respectivos valores máximos que estes assumem ao variarmos o acoplamento  $t_0$ . Como mostrado na Fig.27 a amplitude do pico em  $\varepsilon = 0$  da cadeia (curva vermelha) decresce a medida que  $t_0$  aumenta, enquanto isso um pico em  $\varepsilon = 0$  surge no ponto (curva verde). Para  $t_0/\Gamma_L > 10$  a densidade de estados em  $\varepsilon = 0$  na cadeia é nula enquanto é máximo no ponto.

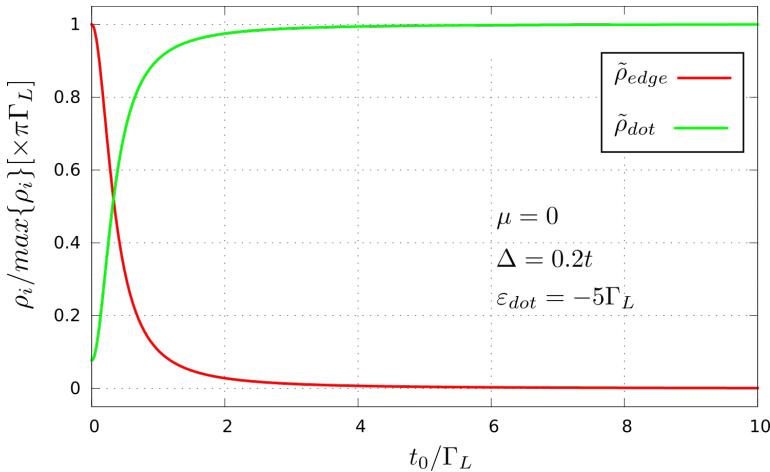


Figura 27 – O “vazamento” do modo de Majorana inicialmente presente no primeiro sítio da cadeia de Kitaev para o ponto quântico pode ser observado ao variarmos o acoplamento  $t_0$  entre a cadeia e o ponto e plotarmos as alturas máximas dos pico em  $\varepsilon = 0$  em ambos. À medida que o acoplamento entre a cadeia e o ponto ( $t_0$ ) aumenta observamos a diminuição do pico de Majorana em  $\tilde{\rho}_{edge}$  (linha vermelha) e o progressivo surgimento deste pico no ponto,  $\tilde{\rho}_{dot}$  (linha verde).

Fonte: Elaborada pelo autor.

A robustez deste modo de Majorana pode ser comprovada pela persistência do pico em  $\varepsilon = 0$  na densidade de estados do ponto quântico para  $\varepsilon_{dot}$  fora da ressonância com o nível de Fermi  $\varepsilon_f$  dos contatos metálicos (Fig.28). Uma possível explicação para este pico seria o efeito Kondo em pontos quânticos que dá origem a um nível fixo em  $\varepsilon = 0$  semelhante ao obtido, no entanto este efeito ocorre apenas para  $\varepsilon_{dot}$  abaixo de  $\varepsilon_f$  (40), ao contrário do obtido para o pico de Majorana que apresenta uma simetria tanto para  $\varepsilon_{dot} < \varepsilon_f$  quanto para  $\varepsilon_{dot} > \varepsilon_f$ . No entanto não temos acesso direto ao efeito Kondo para descartá-lo definitivamente no nosso sistema por este ser *spinless*, porém estudo recente (2) levando em consideração um ponto quântico *spinfull* com interação acoplado a uma cadeia de Kitaev mostrou que o pico em  $\varepsilon = 0$  de amplitude  $0.5\pi\Gamma_L$  é uma combinação do efeito Kondo com o Majorana, no entanto pela aplicação de campo magnético externo é possível extinguir o efeito Kondo restando apenas contribuição do Majorana no pico também de amplitude  $0.5\pi\Gamma_L$ .

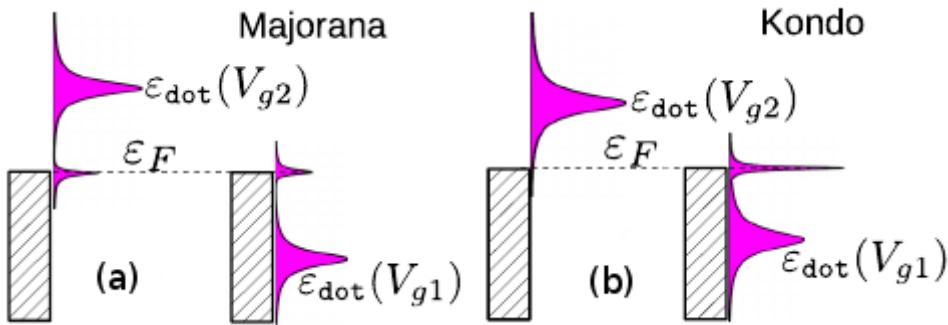


Figura 28 – Diagramas das densidades locais de estados para um ponto quântico com as ressonâncias de Majorana (a) e Kondo (b). Embora o nível fixo em  $\varepsilon_f$  (nível de Fermi dos contatos) produza um pico na condutância de  $e^2/h$  nos dois casos, ao contrário do efeito Kondo este nível só permanece fixo em  $\varepsilon_f$  para valores de  $\varepsilon_{dot}$  acima de  $\varepsilon_f$  quando existe Majorana.

Fonte: Adaptada de VERNEK, et al. (1)

Nos gráficos das Fig.30(a) e Fig.30(b) estão mostradas as densidades de estados calculadas para as funções de Green de Majorana . Observamos que o pico em  $\varepsilon = 0$  se origina do Majorana “A” do ponto, além disso, podemos notar que a densidade de estados do Majorana “B” do ponto, Fig.30(b), apresenta dois picos para  $eV_g = 0$  da ordem de  $\varepsilon \approx 7\Gamma_L$  que correspondem ao desdobramento da energia devido a fusão entre o modo da cadeia e o Majorana “B” do ponto, proporcional a  $t_0 = 10\Gamma_L$  usado nos cálculos.

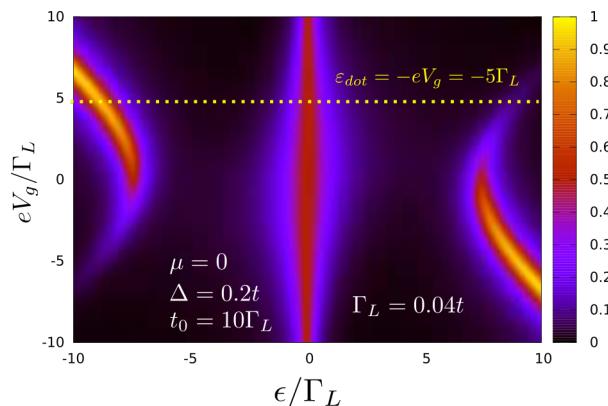


Figura 29 – Mapa de cores da densidade local de estados do ponto  $\rho_{dot}$  vs.  $\varepsilon$  e  $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ . Com a cadeia na fase topológica ( $\mu = 0 < t = 1$ ) e acoplamento dot-cadeia  $t_0 = 10\Gamma_L$ . A linha tracejada corresponde ao gráfico (a) da Fig.26.

Fonte: Elaborada pelo autor.

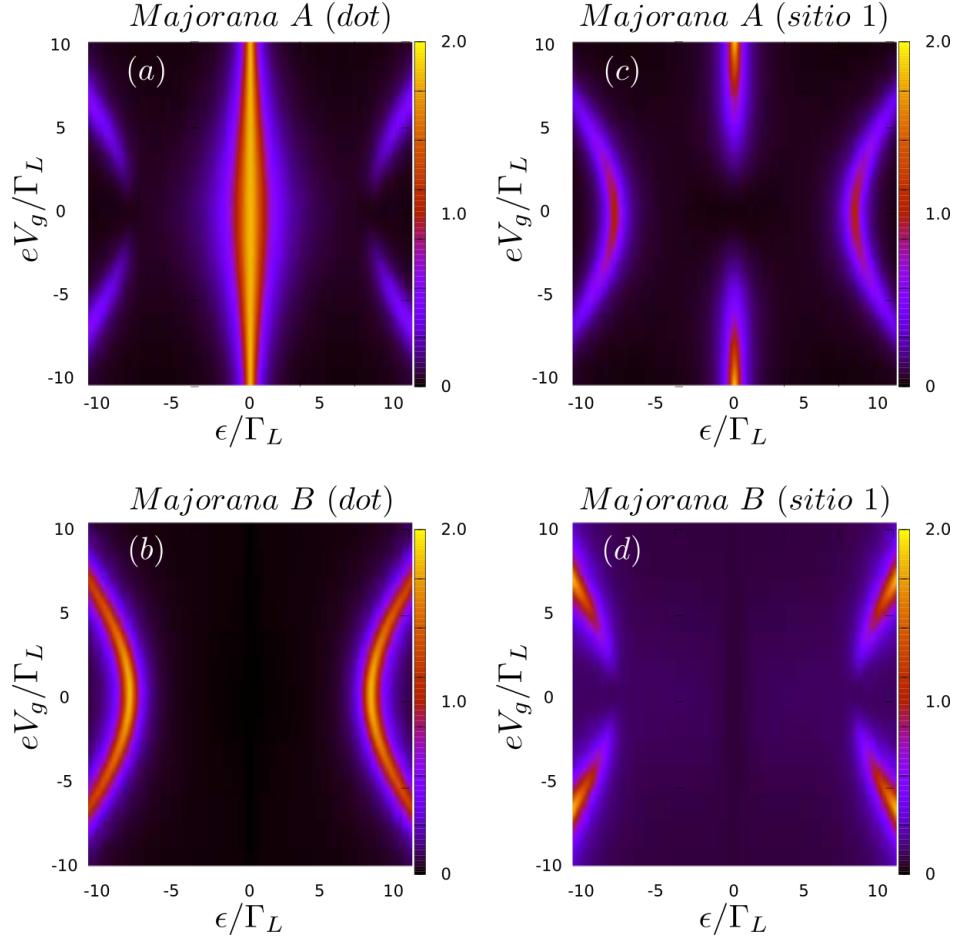


Figura 30 – Mapa de cores da densidade local de estados para Majoranas “A” e “B” no ponto quântico (a) e (b) e no primeiro sítio da cadeia (c) e (d), respectivamente como função de  $\epsilon$  e  $eV_g$  para  $t = 10 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0.2t$ ,  $\Gamma_L = 40 \mu\text{eV}$ ,  $t_0 = 10\Gamma_L$  e  $\mu = 0$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para entendermos o surgimento de um modo de Majorana no ponto quântico a nível de Hamiltoniano faremos a seguir uma análise simplificada do sistema considerado anteriormente, composto de um ponto quântico *spinless* de um nível acoplado a uma cadeia de Kitaev com apenas dois sítios. Escrevendo em termos dos operadores de Majorana o Hamiltoniano da Eq. 4.1 com  $t_{0,L} = 0$  e  $N = 2$  obtemos

$$H = C^\dagger \mathcal{H} C, \quad (5.14)$$

com  $C = (\gamma_d^A, \gamma_d^B, \gamma_1^A, \gamma_1^B, \gamma_2^A, \gamma_2^B)^T$  e

$$\mathcal{H} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{dot} & 0 & t_0 & 0 & 0 \\ -\varepsilon_{dot} & 0 & -t_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_0 & 0 & \mu & 0 & (t - \Delta) \\ -t_0 & 0 & -\mu & 0 & -(t + \Delta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (t + \Delta) & 0 & \mu \\ 0 & 0 & -(t - \Delta) & 0 & -\mu & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Os acoplamentos entre os operadores de Majorana dos sítios estão mostrados esquematicamente na Fig.31. Ao fazermos  $\mu = 0$  e  $\Delta = t$  colocamos a cadeia na fase topológica. Quando temos apenas uma cadeia de Kitaev isolada (ver Capítulo 3) vimos que os operadores  $\gamma_1^A$  e  $\gamma_2^B$  constituem os dois modos de Majorana presentes, no entanto o acoplamento de um ponto quântico a uma das extremidades altera a forma destes modos de Majorana (devem conter agora uma combinação linear com os operadores do ponto,  $\gamma_d^A$  e  $\gamma_d^B$ ). A seguir vamos diagonalizar analiticamente o Hamiltoniano de uma cadeia com  $N = 2$  sítios acoplada a um ponto quântico para demonstrar a estrutura do modo de Majorana e termos uma intuição sobre os resultados numéricos apresentados na Fig.30.

Para simplificar vamos fazer  $\varepsilon_{dot} = 0$  na Eq.5.15. Com os parâmetros considerados anteriormente  $\gamma_2^B$  constitui um modo de Majorana na extremidade desacoplada da cadeia, assim a última linha e coluna da Eq.5.15 são nulos e obtemos a matriz,

$$\mathcal{H} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_0 & 0 & 0 \\ 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_0 & 0 & 0 & 0 & -2t \\ 0 & 0 & 0 & 2t & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.16)$$

Através da troca da primeira pela terceira linhas e colunas deixamos o Hamiltoniano bloco diagonal,

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & t_0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & t_0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_0 & 0 & -2t \\ 0 & 0 & 0 & 2t & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

escrito na base rotacionada  $\tilde{C} = (\gamma_1^A, \gamma_d^B, \gamma_d^A, \gamma_1^B, \gamma_2^A)^T$ . Diagonalizando o bloco inferior direito obtemos o polinômio característico de terceira ordem,

$$\varepsilon^3 - \left( t^2 + \frac{t_0^2}{4} \right) \varepsilon = 0 \quad (5.18)$$

com soluções  $\varepsilon_1 = 0$ ,  $\varepsilon_2 = \sqrt{t^2 + \frac{t_0^2}{4}}$  e  $\varepsilon_3 = -\sqrt{t^2 + \frac{t_0^2}{4}}$ . O auto-estado associado a  $\varepsilon_1$  é  $\psi_1 = \gamma_2^A - \frac{2t}{t_0} \gamma_d^A$  a menos de uma constante de normalização e corresponde a um modo de Majorana, com  $\psi_1 = \psi_1^\dagger$ . As outras duas soluções com energia  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_3$  são formadas pelas respectivas combinações de operadores,  $\psi_2 = \left( \frac{t_0}{2t} \gamma_d^A + \gamma_2^A \right) - i\sqrt{1 + \left( \frac{t_0}{2t} \right)^2} \gamma_1^B$  e  $\psi_3 = \left( \frac{t_0}{2t} \gamma_d^A + \gamma_2^A \right) + i\sqrt{1 + \left( \frac{t_0}{2t} \right)^2} \gamma_1^B$  e constituem modos fermiônicos com energia finita.

O bloco superior esquerdo corresponde a um sistema de dois níveis fermiônicos acoplados via  $t_0$  que dá origem aos estados fermiônicos  $\psi_4 = \gamma_1^A - i\gamma_d^B$  e  $\psi_5 = \gamma_1^A + i\gamma_d^B$  com energias  $\varepsilon_4 = t_0/2$  e  $\varepsilon_5 = -t_0/2$  respectivamente.

Assim podemos entender que o pico em  $\varepsilon = 0$  no ponto quântico para  $eV_g = 0$  da Fig. 30(a) corresponde ao modo de Majorana  $\psi_1$  e envolve  $\gamma_d^A$ . Os dois picos laterais da Fig. 30(b) com energia finita estão associados aos estados fermiônicos  $\psi_4$  e  $\psi_5$  com energias  $\varepsilon = \pm t_0/2$  resultantes da hibridização de  $\gamma_d^B$  com  $\gamma_1^A$ . Importante salientar que ambos operadores de Majorana do ponto quântico  $\gamma_d^A$  e  $\gamma_d^B$  também devem apresentar peso espectral devido aos estados  $\psi_2$  e  $\psi_3$ , porém não aparecem como picos na Fig. 30 pois  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_3$  estão situados fora do intervalo de energia considerado nos gráficos.

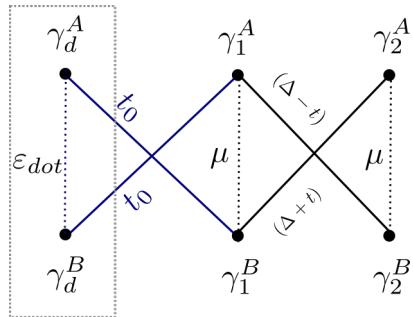


Figura 31 – Diagrama dos acoplamentos em termos dos operadores de Majorana para o sistema composto de um ponto quântico com nível em  $\varepsilon_{dot}$  acoplado através de  $t_0$  a uma cadeia de Kitaev com  $N = 2$  sítios. Eq.5.15.

Fonte: Elaborada pelo autor.

### 5.2.2 Condutância através do ponto quântico

A seguir vamos investigar a condutância de dois terminais (S e D na Fig.24) através do ponto quântico na presença do modo de Majorana utilizando a expressão da Eq. 5.11 que rescreveremos aqui para facilitar,

$$G = \frac{e^2}{h} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{\Gamma_D \Gamma_S}{\Gamma_D + \Gamma_S} \left\{ -2Im [G_{d,d}(\varepsilon)] \right\} \left( -\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right). \quad (5.19)$$

Para  $T = 0$  temos em unidades de  $e^2/h$ ,

$$G[e^2/h] = \frac{\Gamma_D \Gamma_S}{\Gamma_D + \Gamma_S} \{Im[G_{d,d}(0)]\}. \quad (5.20)$$

Como mostrado na Fig.32 , a condutância  $G[e^2/h]$  na fase trivial ( $|\mu| > 2t$ ) apresenta um pico cujo máximo corresponde a  $\varepsilon_{dot}$  cruzando o nível de Fermi dos contatos metálicos  $\varepsilon_F = 0$ . O pico não se encontra exatamente em  $eV_g = 0$  mas levemente deslocado devido à parte real da auto-energia na função de Green do ponto quântico, pois a cadeia de Kitaev em

sua fase trivial se comporta como um terceiro contato metálico acoplado ao ponto quântico, como mostrado no Apêndice B.3. Já para valores de  $\mu$  em que a cadeia esteja na sua fase topológica não-trivial,  $|\mu| < 2t$ , a condutância se apresenta quase constante, formando um *plateau* em  $G \approx e^2/2h$  para diferentes valores de  $eV_g$ .

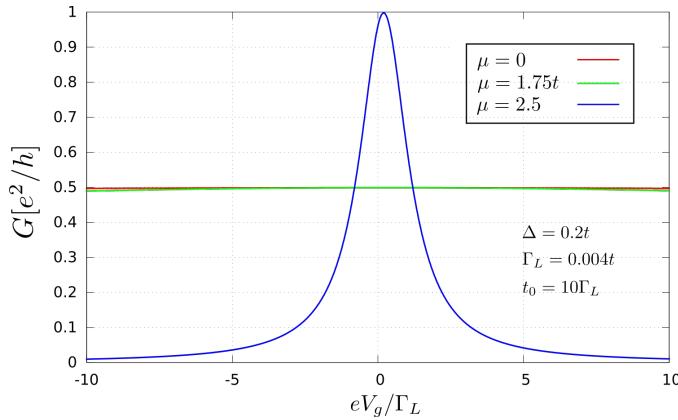


Figura 32 – Condutância  $G[e^2/h]$  medida através do ponto quântico em função de  $eV_g$  para diferentes valores de  $\mu$ . As curvas verde e vermelha mostram o plateau de condutância fixa em  $e^2/2h$  para uma cadeia de Kitaev na fase topológica ( $\mu < 2t$ ). A curva azul corresponde  $\mu = 2.5t$  mostrando o perfil de ressonância apresentando um pico de condutância em  $e^2/h$  quando o nível de energia do ponto coincide com a energia de Fermi dos contatos  $eV_g = 0$ . Neste regime a cadeia de Kitaev está na fase trivial e portanto não há Majorana acoplado ao ponto quântico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O comportamento da condutância diante da transição de fase topológica pode ser melhor visualizado ao plotarmos a condutância  $G[e^2/h]$  calculada pela Eq.5.20 em função de  $\mu$ . A condutância apresenta um *plateau* em  $e^2/2h$  sempre que  $|\mu| < 2t$  para  $\Delta \neq 0$ . Nas Fig.33(a) e Fig.33(c), mantendo  $\Delta = 0.2t$ ,  $\varepsilon_{dot} = 0$  e  $t_0 = 10\Gamma_L$ , observamos que para  $\varepsilon_{dot} = 0$ , no limite onde  $|\mu| \gg 2t$ , a condutância tende para  $e^2/h$ , consequência do nível do ponto quântico estar em ressonância com a energia de Fermi dos contatos metálicos  $\varepsilon_F = 0$ . Para valores maiores de  $\varepsilon_{dot}$ , a condutância vai para zero, uma vez que não há mais ressonância do nível do ponto quântico para  $\varepsilon_{dot} \neq \varepsilon_F = 0$ .

Nas Fig. 33 (b) e Fig. 33 (d) desligamos o termo de supercondutividade  $\Delta = 0$ . Neste regime a cadeia de Kitaev se torna uma cadeia tight-binding convencional, representando um terceiro contato metálico no ponto quântico. Embora não haja modos de Majorana neste sistema, observamos para o caso específico  $t_0 = 15.8\Gamma_L$  que há um pico de condutância em  $e^2/2h$  para  $|\mu| < 2t$  indistinguível do caso onde há modo de Majorana nas Fig. 33(a) e Fig. 33(c), porém para  $\varepsilon_{dot} \neq 0$  esse pico de condutância não se mantém fixo. Isso sugere que para identificarmos o modo de Majorana devemos variar a energia do ponto quântico para fora da ressonância com os contatos ( $\varepsilon_{dot} \neq 0$ ).

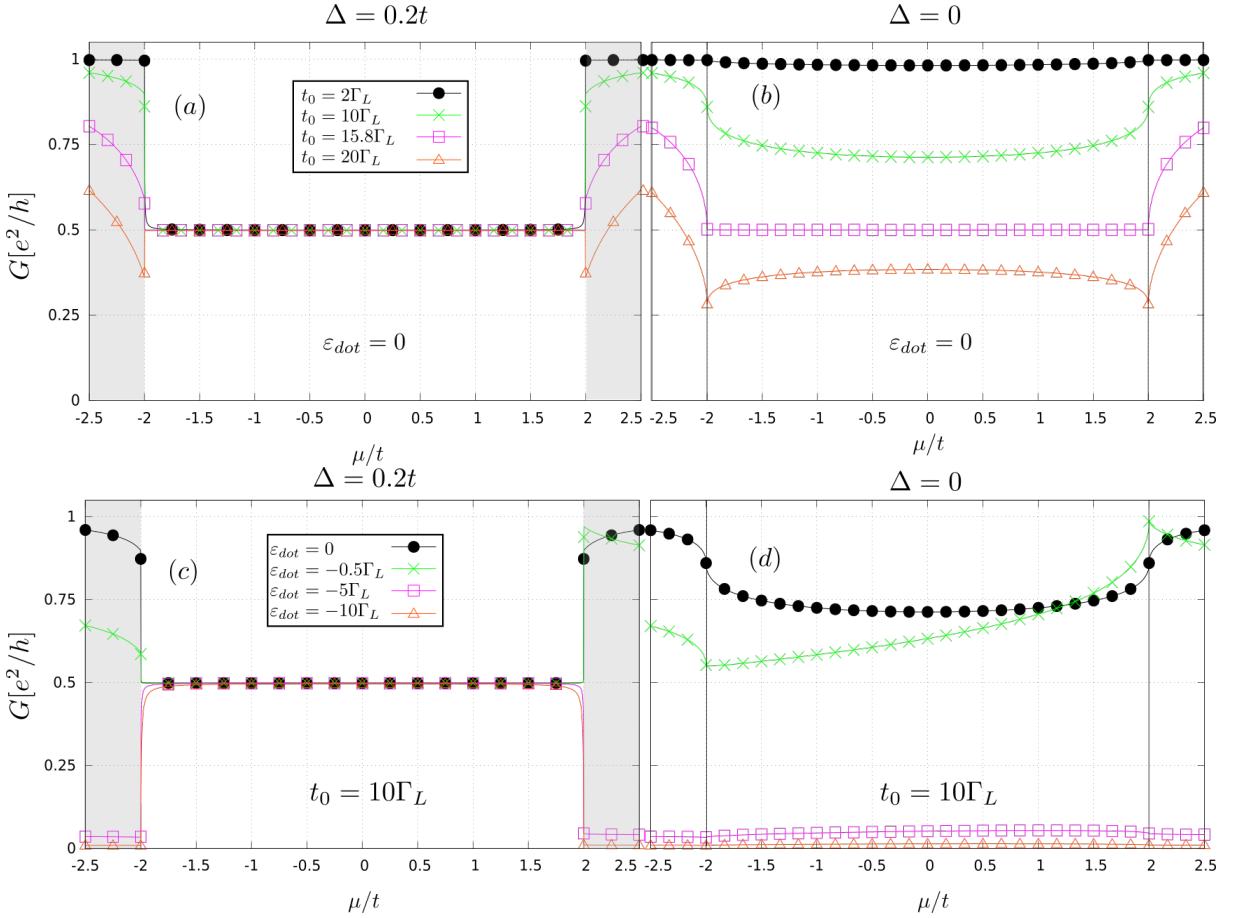


Figura 33 – Condutância G em função do potencial químico  $\mu$ . Em (a)  $\varepsilon_{dot} = 0$  e  $\Delta = 0.2t$  para diferentes valores de  $t_0$  e em (b)  $\varepsilon_{dot} = 0$  e  $\Delta = 0$  não há modo de Majorana e a cadeia se torna um terceiro contato metálico. Neste caso para  $t_0 = 15.8\Gamma_L$  obtemos um pico de condutância de  $e^2/2h$  idêntico ao de Majorana. Em (c) fixamos  $t_0 = 10\Gamma_L$  e variamos  $\varepsilon_{dot}$  para  $\Delta = 0.2t$  e o mesmo em (d) para  $\Delta = 0$ . As regiões sombreadas correspondem a fases triviais ( $\mu > 2t$ ).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Com isto reproduzimos os principais resultados de VERNEK et al. (1) a partir do nosso modelo no caso específico em que apenas uma cadeia está acoplada ao ponto e validamos nosso modelo. Na próxima seção iremos trataremos o problema de duas cadeias acopladas ao ponto que é o objetivo deste trabalho.

## 5.3 Ponto quântico acoplado a duas cadeias de Kitaev

### 5.3.1 Densidade de estados

Nesta seção vamos analisar o sistema alvo de estudo desta dissertação utilizando o modelo com duas cadeias de Kitaev obtido no Cap. 4. Adotamos  $t_L = t_R = t$ ,  $\Delta_R = \Delta_L = \Delta$  e  $t_{0,R} = t_{0,L} = t_0$  nas Eq. 4.9 e Eq. 4.6 de forma que obtemos duas cadeias idênticas a menos de suas fases  $\phi_R$  e  $\phi_L$  com o mesmo acoplamento ao ponto quântico.

Inicialmente vamos calcular a densidade de estados no ponto quântico  $\rho_{dot}(\varepsilon)$  para o caso limite em que as cadeias são idênticas com mesma fase, portanto  $\Delta\phi = \phi_R - \phi_L = 0$  e tomaremos o caso em que o ponto quântico se assemelha a um sitio da cadeia fazendo  $t_0 = t$  e  $\mu_0 = \mu$ . Embora não haja supercondutividade no ponto quântico esperamos que isto tenha pouca relevância no limite que estamos adotando devido a grande quantidade de sítios nas duas cadeias (estamos usando  $N = 30.000$  sitios para cada cadeias). Queremos estudar este caso específico como forma de validarmos nossos cálculos numéricos.

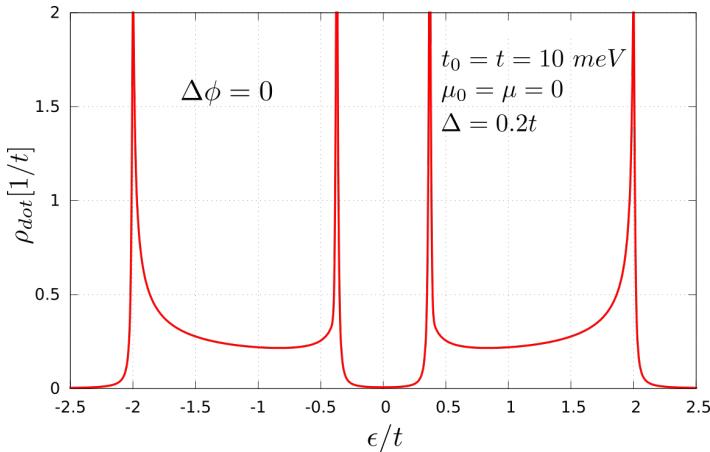


Figura 34 – Densidade de estados no ponto quântico  $\rho_{dot}[1/t]$  vs.  $\varepsilon$  acoplado a duas cadeias idênticas com  $\Delta\phi = 0$ ,  $\mu = 0$  e  $t_0 = t = 10 \text{ meV}$ . Fazemos  $\varepsilon_{dot} = \mu$  de forma que nível de energia do ponto seja igual ao dos sitios das cadeias de Kitaev. Nestas condições o ponto se comporta como um sitio de *bulk* de uma única cadeia na fase topológica como mostrada na Fig. 25(linha tracejada).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Podemos verificar na Fig. 34 que a densidade de estados no ponto realmente se assemelha a de um sitio de *bulk* de uma cadeia de Kitaev na fase topológica semelhante a mostrada na Fig. 25(linha tracejada) para apenas uma cadeia. Neste caso entendemos que os dois modos de Majorana internos se fundem e formam um estado fermiônico com energia fora do *gap* junto com os níveis de energia do restante das cadeias.

Vamos a seguir variar a diferença de fase  $\Delta\phi$  entre as duas cadeias e estudar o surgimento dos modos de Majorana calculando a densidade local de estados no ponto quântico  $\rho_{dot}(\varepsilon)$  fazendo  $\Delta\phi$  de 0 a  $\pi$ . Na Fig. 35 observamos um pico em  $\varepsilon = 0$  quando  $\Delta\phi = \pi$  (curva verde) resultante do aparecimento de um modo de Majorana efetivo composto pelos dois modos de Majorana internos das cadeias (iremos discutir este caso em maiores detalhes na Seção 5.4). Neste caso específico não há fusão entre os dois Majoranas em um férmion convencional. No entanto observamos que para  $\Delta\phi \neq \pi$  ocorre a fusão dos Majoranas em estados fermiônicos com energia finita.

O surgimento do modo de Majorana dentro do ponto quântico assume periodicidade de  $2\pi$  em  $\Delta\phi$  como mostrado no mapa de cor da densidade de estados na Fig. 36. Para  $\Delta\phi = (2n + 1)\pi$  com  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  ocorre um pico em  $\varepsilon = 0$  que se desdobra em dois picos laterais como mostrado na Fig. 35 decorrente da fusão do modo de Majorana quando variamos  $\Delta\phi$ .

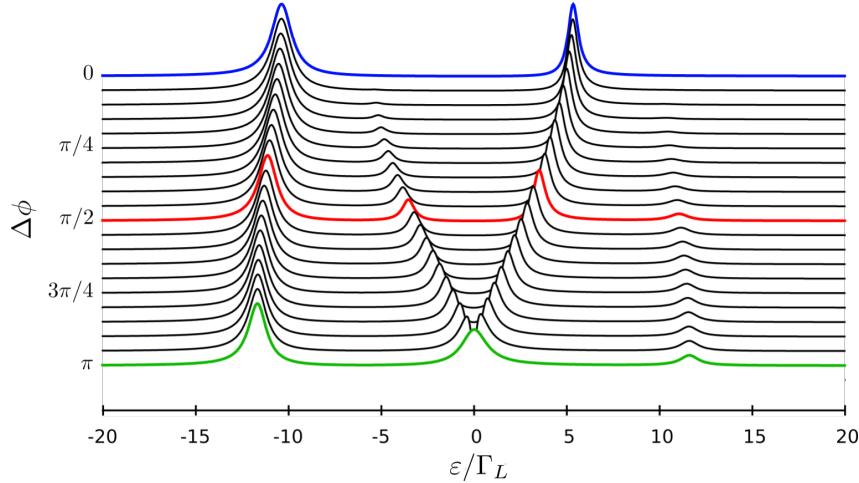


Figura 35 – Densidade de estados no ponto quântico  $\rho_{dot}[\times\pi\Gamma_L]$  acoplado a duas cadeias de Kitaev em função de  $\Delta\phi$  com  $t_0 = 10\Gamma_L$ ,  $\varepsilon_{dot} = -5\Gamma_L$ ,  $\Gamma_L = 0.004t$  e  $t = 10 \text{ meV}$ . A curva verde corresponde a  $\Delta\phi = \pi$  e apresenta um pico de Majorana em  $\varepsilon = 0$  semelhante ao da Fig. 26 (a) quando há apenas uma cadeia acoplada ao ponto. Demonstramos que esse pico corresponde a um Majorana efetivo formado pelos dois modos de Majorana das cadeias acoplados ao ponto. A medida que variamos  $\Delta\phi$  o pico de Majorana se desdobra em dois laterais, o que corresponde à hibridização dos dois Majoranas que estão acoplados ao ponto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

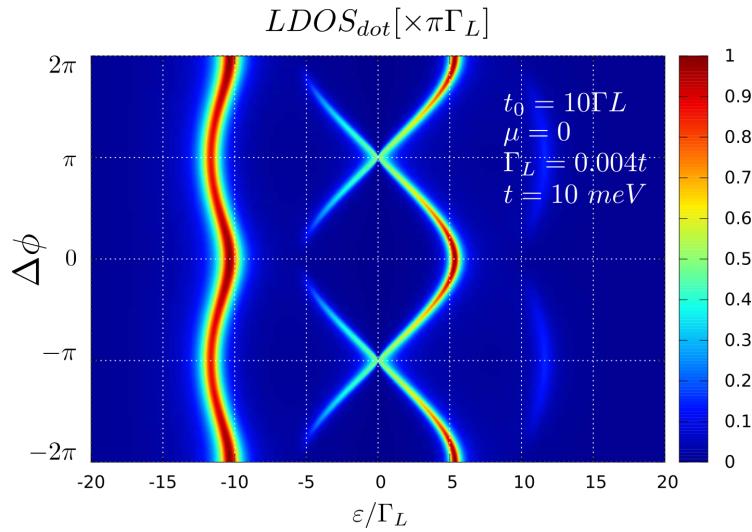


Figura 36 – Mapa de cor da densidade de estados no ponto quântico  $\rho_{dot}$  (escala de cor) vs.  $\varepsilon/\Gamma_L$  variando  $\Delta\phi$ . Observamos a periodicidade de  $2\pi$  no surgimento do pico de Majorana em  $\varepsilon = 0$  para  $\Delta\phi = (2n + 1)\pi$  com  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  seguido do fusão deste modo em um sistema de dois níveis como mostrado na Fig. 35. Como parâmetros usamos  $\mu = 0$  para as duas cadeias,  $t_0 = 10\Gamma_L$ ,  $\Gamma_L = 0.004t$  e  $t = 10 \text{ meV}$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para afirmarmos que o pico em  $\varepsilon = 0$  para  $\Delta\phi = \pi$  na Fig. 35 (curva verde) corresponde à um modo de Majorana iremos variar a energia do ponto quântico ( $\varepsilon_{dot}$ ) via  $V_g$  para fora da ressonância com a energia de Fermi dos contatos metálicos  $\varepsilon_f = 0$ .

Na Fig. 37 plotamos os mapas de cores para a densidade de estados no ponto  $\rho_{dot}(\varepsilon)$  em função de  $eV_g$  para  $\Delta\phi = \pi$  (a),  $\Delta\phi = \pi/2$  (b) e  $\Delta\phi = 0$  (c). As linhas horizontais

tracejadas em  $eV_g/\Gamma_L = 5$  em (a), (b) e (c) da Fig.37 correspondem, respectivamente, às curvas verde, vermelha e azul na Fig.35. Observamos que o pico central em  $\varepsilon = 0$  permanece fixo quando  $\Delta\phi = \pi$ , Fig.37(a), tanto para valores de  $eV_g$  acima ou abaixo de  $\varepsilon_f$  (de  $-10\Gamma_L$  até  $10\Gamma_L$ ) o que elimina a possibilidade deste pico ser resultado da ressonância Kondo já que esta ocorre apenas para  $\varepsilon_{dot}$  abaixo de  $\varepsilon_f$  e resulta em um pico de magnitude  $e^2/h$  ao invés de  $e^2/2h$  como obtido (40). Já os picos laterais resultantes da hibridização dos Majoranas apresentam uma dependência com o nível  $\varepsilon_{dot}$ , Fig.37(b) e Fig.37(c).

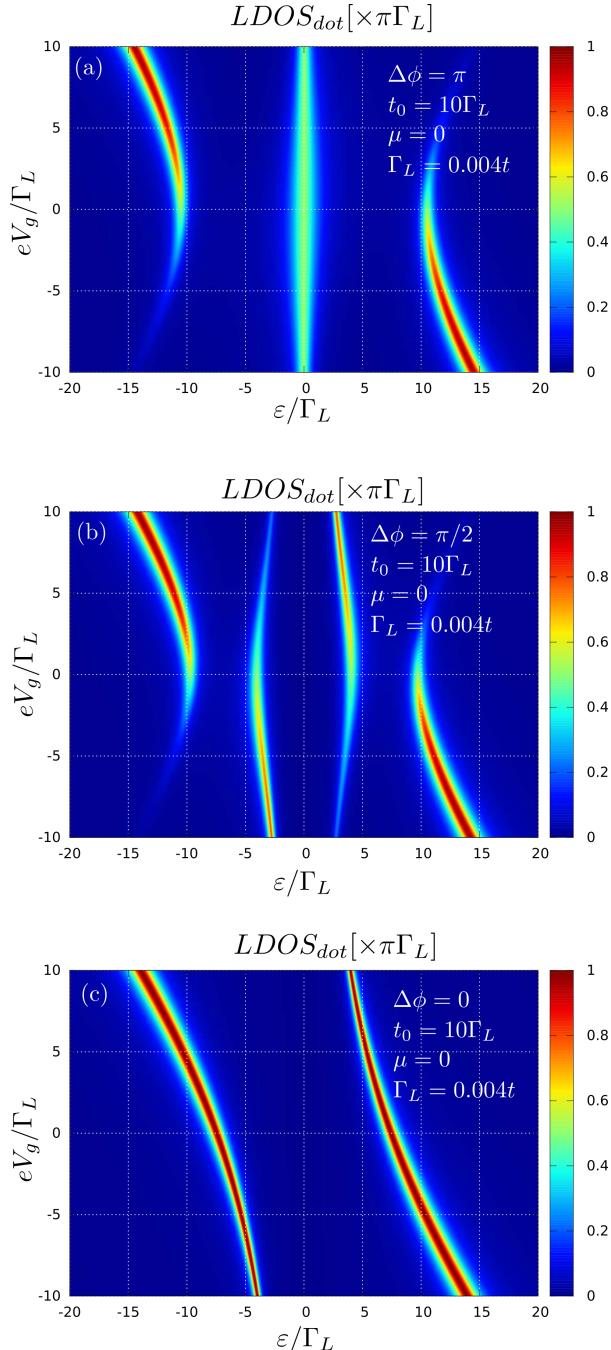


Figura 37 – Mapas de cor da densidade de estados no ponto quântico  $\rho_{dot}$  (escala de cor) vs.  $\varepsilon/\Gamma_L$  variando a energia do ponto através de  $V_g$  ( $\varepsilon_{dot} = -eV_g$ ). Em (a) fixamos  $\Delta\phi = \pi$  e observamos a existência do pico de Majorana em  $\varepsilon = 0$  para todos os valores de  $V_g$  calculados. Em (b) fixamos  $\Delta\phi = \pi/2$  e estão presentes dois picos laterais resultantes da hibridização do modo de Majorana, em (c)  $\Delta\phi = 0$ . A linha tracejada em  $eV_g/\Gamma_L = 5$  de (a), (b) e (c) corresponde respectivamente às curvas verde, vermelha e azul da Fig.35.

Fonte: Elaborada pelo autor.

### 5.3.2 Condutância

Para duas cadeias acopladas simetricamente ao ponto quântico observamos um *plateau* na condutância em  $e^2/2h$  apenas quando  $\Delta\phi = \pi$ . Como discutimos anteriormente para  $\Delta\phi = \pi$  ocorre o surgimento de um modo de Majorana dentro do ponto que permanece fixo em  $\varepsilon = 0$  independentemente de  $eV_g$  como mostrado na Fig. 37(a). Este modo dá origem a uma condutância de  $e^2/2h$  tal como reproduzimos na Sec. 5.2 os resultados de VERNEK, et. al. (1) para uma única cadeia acoplada ao ponto.

Na Fig. 38 mostramos a condutância através do ponto quântico  $G$  em unidades de  $e^2/h$  em função de  $\mu$  para diferentes valores de acoplamento entre o ponto e as cadeia  $t_0$ . Quando  $\Delta\phi = 0$  [Fig. 38 (a)] observamos que a condutância permanece nula para  $|\mu| < 2t$  independentemente de  $t_0$ . Apenas para  $\Delta\phi = \pi$  [Fig. 38(b)] surge um *plateau* na condutância em  $e^2/2h$  quando as cadeias estão na fase topológica ( $|\mu| < 2t$ ) para todos valores de  $t_0$  considerados.

Para verificar a robustez deste *plateau* na condutância fixamos o acoplamento  $t_0$  e variamos a energia do ponto através da tensão de *gate*  $V_g$  para diferentes valores de  $\mu$ . Encontramos que o *plateau* em  $e^2/2h$  persiste quando as cadeias estão na fase topológica ( $|\mu| < 2t$ ) e  $\Delta\phi = \pi$  (Fig. 39).

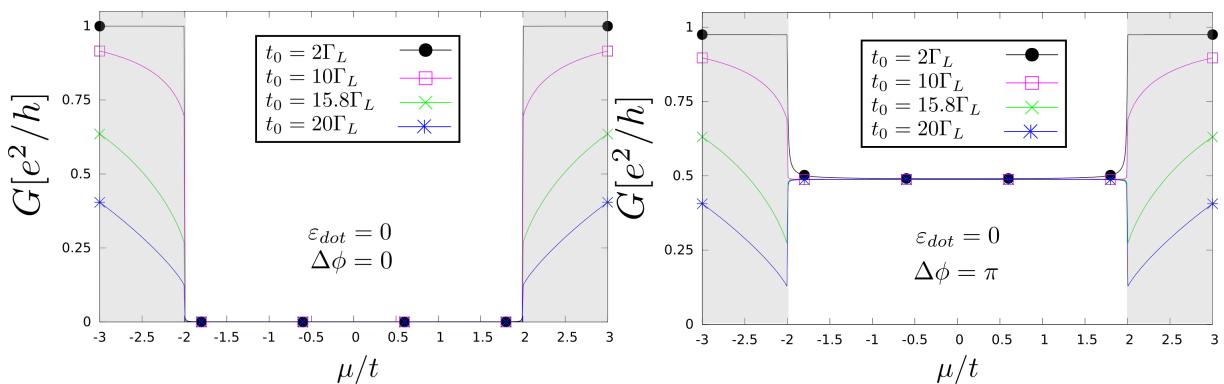


Figura 38 – Condutância através do ponto quântico  $G[e^2/h]$  em função de  $\mu$  para diferentes valores de acoplamento entre o ponto e as cadeia  $t_0$ . Quando  $\Delta\phi = 0$  (a) observamos que a condutância permanece nula para  $|\mu| < 2t$  independentemente de  $t_0$ . Já para  $\Delta\phi = \pi$  surge um *plateau* na condutância em  $e^2/2h$  quando as cadeias estão na fase topológica ( $|\mu| < 2t$ ) para todos valores de  $t_0$  considerados.

Fonte: Elaborada pelo autor.

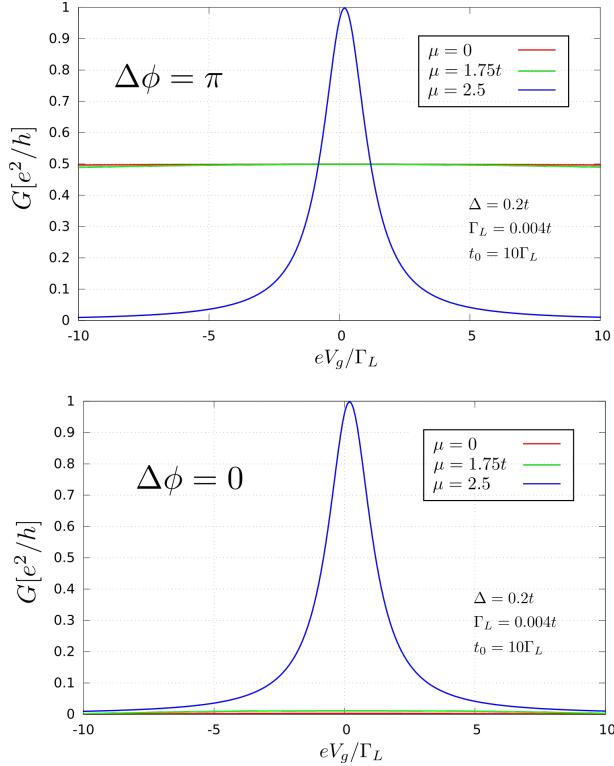


Figura 39 – Condutância através do ponto quântico  $G[e^2/h]$  em função de  $V_g$  para diferentes valores de  $\mu$ . Acima: para  $\Delta\phi = \pi$  observamos um *plateau* na condutância em  $e^2/2h$  quando as cadeias estão na fase topológica ( $\mu < 2t$ ). Abaixo: para  $\Delta\phi = 0$  a condutância é nula quando  $\mu < 2t$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para  $\Delta\phi \neq \pi$  ocorre a fusão dos Majoranas que estão acoplados ao ponto e o estado de Majorana em  $\varepsilon = 0$  se desdobra. Pela expressão da condutância expressa na Eq. 5.20 para  $T = 0$  observamos que apenas a densidade de estados em  $\varepsilon = 0$  contribui para a condutância, dessa forma quando ocorre a fusão dos Majoranas e os níveis de energia se desdobram obtemos uma condutância nula. A periodicidade no surgimento do modo de Majorana no ponto quântico de  $2\pi$  em  $\Delta\phi$  reflete-se no cálculo da condutância. Como mostrado na Fig. 40 a condutância assume o valor de  $e^2/2h$  apenas quando  $\Delta\phi = (2n + 1)\pi$  onde  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  quando as duas cadeias estão na fase topológica. Desta forma a medida de picos na condutância de amplitude  $e^2/2h$  com período  $2\pi$  quando se varia  $\Delta\phi$  constitui uma assinatura do modo de Majorana dentro do ponto quântico.

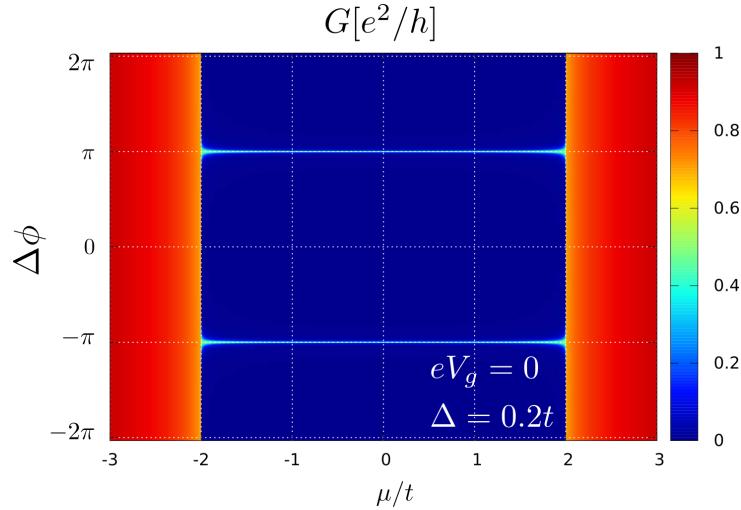


Figura 40 – Mapa de cores da condutância  $G[e^2/h]$  através do ponto quântico em função de  $\Delta\phi$  e  $\mu$  para duas cadeias simétricas com  $eV_g = 0$ ,  $\Delta = 0.2t$  e  $t = 10$  meV. A condutância apresenta periodicidade de  $2\pi$  assumindo o valor de  $e^2/2h$  sempre que  $\Delta\phi = (2n + 1)\pi$  onde  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Fonte: Elaborada pelo autor.

## 5.4 Resultados analíticos

Motivados pela solução analítica da função de Green para um sistema composto por um estado de Majorana acoplado a um ponto quântico *spinless* de um nível (37), estendemos esta abordagem para um sistema efetivo composto por dois modos de Majorana com diferentes fases acoplados a um ponto quântico com a finalidade de comparar com os resultados numéricos obtidos na Seção 5.3.

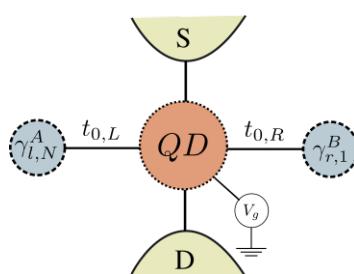


Figura 41 – Diagrama do modelo efetivo composto por um ponto quântico *spinless* de um nível em  $\varepsilon_{dot}$  controlado pela voltagem  $V_g$  e acoplado a dois contatos metálicos (S e D) modelados por duas cadeias *tight-binding* e lateralmente acoplado a dois modos de Majoranas ( $\gamma_{l,N}^A$  e  $\gamma_{r,1}^B$ ) com fases  $\phi_L$  e  $\phi_R$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Partimos do seguinte Hamiltoniano,

$$H_{eff} = \varepsilon_{dot} d^\dagger d + t_{0,L} (d^\dagger c_L - dc_L^\dagger) + t_{0,R} (d^\dagger c_R - dc_R^\dagger) \quad (5.21)$$

$$+ \sum_{k,l=S,D} (\varepsilon_{k,l} - \varepsilon_f) c_{k,l}^\dagger c_{k,l} + \sum_{k,l=S,D} (V_{k,l} d^\dagger c_{l,k} + V_{k,l}^* c_{l,k}^\dagger d) \quad (5.22)$$

$$(5.23)$$

que consiste nos termos  $H_{dot}$ ,  $H_{dot-chains}$ ,  $H_{leads}$  e  $H_{dot-leads}$  da Seção 4.1 para um sitio em cada cadeia. Vamos supor que apenas os operadores de Majorana  $\gamma_{l,N}^A$  e  $\gamma_{r,1}^B$  das cadeias estejam acoplados ao ponto quântico. Lembramos que para cadeias com um número arbitrário de sítios na fase topológica em  $\Delta = t$  e  $\mu = 0$  estes operadores de Majorana constituem dois modos de Majorana com energia zero, o que justifica usarmos este modelo efetivo para estudar o modelo completo quando as duas cadeias estão na fase topológica. Com estas considerações, temos,

$$H_{eff} = \varepsilon_{dot} d^\dagger d + \lambda_L (e^{-i\frac{\phi_L}{2}} d^\dagger - e^{i\frac{\phi_L}{2}} d) \gamma_{l,N}^A + i\lambda_R (e^{-i\frac{\phi_R}{2}} d^\dagger + e^{i\frac{\phi_R}{2}} d) \gamma_{r,1}^B + \quad (5.24)$$

$$+ \sum_{k,l=S,D} (\varepsilon_{k,l} - \varepsilon_f) c_{k,l}^\dagger c_{k,l} + \sum_{k,l=S,D} (V_{k,l} d^\dagger c_{l,k} + V_{k,l}^* c_{l,k}^\dagger d), \quad (5.25)$$

onde  $\lambda_L = it_{0,L}/2$  e  $\lambda_R = it_{0,R}/2$ . Para simplificar a notação chamaremos  $\gamma_{l,N}^A \rightarrow \gamma_L$  e  $\gamma_{r,1}^B \rightarrow \gamma_R$ . Com esta expressão de  $H_{eff}$  aplicamos a técnica da equação de movimento e encontramos

$$(\omega - i\eta - \varepsilon_{dot} + i\Gamma_L) \langle\langle d; d^\dagger \rangle\rangle = 1 - \lambda_L e^{-i\phi_L/2} \langle\langle \gamma_L; d^\dagger \rangle\rangle + i\lambda_R e^{-i\phi_R/2} \langle\langle \gamma_R; d^\dagger \rangle\rangle \quad (5.26)$$

e

$$\begin{cases} \varepsilon \langle\langle \gamma_L; d^\dagger \rangle\rangle &= -2\lambda_L e^{i\phi_L/2} \langle\langle d; d^\dagger \rangle\rangle + 2\lambda_L e^{-i\phi_L/2} \langle\langle d^\dagger; d^\dagger \rangle\rangle \\ \varepsilon \langle\langle \gamma_R; d^\dagger \rangle\rangle &= 2i\lambda_R e^{i\phi_R/2} \langle\langle d; d^\dagger \rangle\rangle + 2i\lambda_R e^{-i\phi_R/2} \langle\langle d^\dagger; d^\dagger \rangle\rangle. \end{cases} \quad (5.27)$$

Para prosseguirmos precisamos calcular  $\langle\langle d^\dagger; d^\dagger \rangle\rangle$ , aplicando novamente a equação de movimento chegamos a

$$(\varepsilon - i\eta + \varepsilon_{dot} + i\Gamma) \langle\langle d^\dagger; d^\dagger \rangle\rangle = -\lambda_L e^{i\phi_L/2} \langle\langle \gamma_L; d^\dagger \rangle\rangle + i\lambda_R e^{i\phi_R/2} \langle\langle \gamma_R; d^\dagger \rangle\rangle, \quad (5.28)$$

substituindo esta expressão na Eq.5.27 encontramos,

$$\langle\langle \gamma_L; d^\dagger \rangle\rangle = -\frac{2\lambda_L e^{i\phi_L/2}}{\omega + 2\lambda_L^2 k(\omega)} \langle\langle d; d^\dagger \rangle\rangle + \frac{2i\lambda_L \lambda_R k(\omega) e^{i\Delta\phi/2}}{\omega + 2\lambda_L^2 k(\omega)} \langle\langle \gamma_R; d^\dagger \rangle\rangle \quad (5.29)$$

e

$$\langle\langle\gamma_R; d^\dagger\rangle\rangle = \frac{2i\lambda_R e^{i\phi_R/2}}{\omega + 2\lambda_R^2 k(\omega)} \langle\langle d; d^\dagger\rangle\rangle - \frac{2i\lambda_L\lambda_R k(\omega) e^{-i\Delta\phi/2}}{\omega + 2\lambda_R^2 k(\omega)} \langle\langle\gamma_L; d^\dagger\rangle\rangle, \quad (5.30)$$

onde definimos

$$k(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - i\eta + \varepsilon_{dot} + i\Gamma} \quad \text{e} \quad \Delta\phi = \phi_R - \phi_L. \quad (5.31)$$

Resolvendo as equações acopladas, chegamos a

$$\langle\langle\gamma_L; d^\dagger\rangle\rangle = \frac{-2\lambda_L\chi_L(\varepsilon) e^{i\phi_L/2} - 4\lambda_L\lambda_R^2\chi_L(\varepsilon)\chi_R(\varepsilon)k(\varepsilon) e^{i\Delta\phi/2} e^{i\phi_R/2}}{1 - 4\lambda_L^2\lambda_R^2\chi_L(\varepsilon)\chi_R(\varepsilon)k^2(\varepsilon)} \langle\langle d; d^\dagger\rangle\rangle \quad (5.32)$$

e

$$\langle\langle\gamma_R; d^\dagger\rangle\rangle = \frac{2i\lambda_R\chi_R(\varepsilon) e^{i\phi_R/2} + 4i\lambda_L^2\lambda_R\chi_L(\varepsilon)\chi_R(\varepsilon)k(\varepsilon) e^{-i\Delta\phi/2} e^{i\phi_L/2}}{1 - 4\lambda_L^2\lambda_R^2\chi_L(\varepsilon)\chi_R(\varepsilon)k^2(\varepsilon)} \langle\langle d; d^\dagger\rangle\rangle, \quad (5.33)$$

com

$$\chi_L(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - i\eta + 2\lambda_L^2 k(\varepsilon)} \quad , \quad \chi_R(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - i\eta + 2\lambda_R^2 k(\varepsilon)}. \quad (5.34)$$

Finalmente substituindo estas duas expressões na Eq.5.26 obtemos a função de Green exata para o ponto quântico

$$\begin{aligned} G_{dot}(\varepsilon) &= \langle\langle d; d^\dagger\rangle\rangle \\ &= \left\{ \varepsilon - i\eta - \varepsilon_{dot} + i\Gamma + \left[ \frac{2\lambda_L^2\chi_L(\varepsilon) + 2\lambda_R^2\chi_R(\varepsilon) + 8\lambda_L^2\lambda_R^2\chi_L(\varepsilon)\chi_R(\varepsilon)k(\varepsilon)\cos(\Delta\phi)}{1 - 4\lambda_L^2\lambda_R^2\chi_L(\varepsilon)\chi_R(\varepsilon)k^2(\varepsilon)} \right] \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

No limite em que  $\lambda_L \rightarrow 0$ , por exemplo, recaímos no modelo descrito em (37) que consiste em apenas um Majorana acoplado ao ponto quântico. Nesta situação, reproduzimos o principal resultado com relação à condutância. Fazendo  $\varepsilon_{dot} = 0$  e  $\lambda_L = 0$  na Eq.5.35 obtemos  $G_{dot}(\varepsilon \rightarrow 0) = \{2i\Gamma\}^{-1}$ . Utilizando este resultado na expressão da condutância na Eq. 5.20 para  $T = 0$ , chegamos a

$$G_{pico} = -\frac{e^2}{h} \Gamma Im [G_{dot}(\varepsilon \rightarrow 0)] = \frac{e^2}{2h}. \quad (5.36)$$

Este resultado é distinto do caso em que o ponto quântico está acoplado à um estado fermiônico regular em que  $G_{pico} = 0$ , ou quando está desacoplado em que  $G_{pico} = e^2/h$ .

Assim  $G_{pico} = e^2/2h$  indica uma assinatura na condutância da presença de um único Majorana

Utilizando a Eq.5.35 podemos calcular a densidade de estados no ponto quântico para diferentes valores de  $\Delta\phi$  Fig. 42. Observamos o mesmo comportamento mostrado na Fig.35 obtida numericamente, onde o pico de Majorana presente apenas para  $\Delta\phi = \pi$  se desdobra em dois picos laterais quando variamos  $\Delta\phi$ , decorrente da hibridização dos Majoranas em um férmion regular com energia finita.

Podemos desenvolver alguma intuição do efeito de  $\Delta\phi$  no estado acoplado ao ponto quântico observando os operadores presentes no termo de acoplamento  $H_{dot-chains}$  assumido anteriormente com  $\lambda_L = \lambda_R = \lambda$ ,

$$H_{dot-chains} = \lambda \left( e^{-i\frac{\phi_L}{2}} d^\dagger - e^{i\frac{\phi_L}{2}} d \right) \gamma_L + i\lambda \left( e^{-i\frac{\phi_R}{2}} d^\dagger + e^{i\frac{\phi_R}{2}} d \right) \gamma_R \quad (5.37)$$

$$= \lambda \left[ d^\dagger \left( e^{-i\frac{\phi_L}{2}} \gamma_L + ie^{-i\frac{\phi_R}{2}} \gamma_R \right) - d \left( e^{i\frac{\phi_L}{2}} \gamma_L - ie^{i\frac{\phi_R}{2}} \gamma_R \right) \right] \quad (5.38)$$

$$= \lambda \left[ d^\dagger \left( \gamma_L + ie^{-i\frac{\Delta\phi}{2}} \gamma_R \right) - d \left( \gamma_L - ie^{i\frac{\Delta\phi}{2}} \gamma_R \right) \right]. \quad (5.39)$$

Na última linha fizemos uma transformação de *gauge*  $d \rightarrow e^{-i\frac{\phi_L}{2}} d$ . Para  $\Delta\phi = (2n + 1)\pi$ , com  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , podemos definir um novo operador  $\eta = \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_L + \gamma_R)$  que satisfaça a condição de Majorana,  $\eta = \eta^\dagger$  e a relação de anti-comutação  $\{\eta, \eta\} = 2$ . Desta maneira concluímos que o ponto quântico está acoplado a apenas um Majorana efetivo

$$H_{dot-chains} = \frac{\lambda}{2} (d^\dagger \eta + \eta d). \quad (5.40)$$

o que justifica o surgimento de um pico em  $\varepsilon = 0$  na densidade de estados Fig. 42. Já para o caso em que  $\Delta\phi = 2n\pi$ , particularmente para  $\Delta\phi = 0$ , encontramos

$$\begin{aligned} H_{dot-chains} &= \lambda \left[ d^\dagger \left( \gamma_L + ie^{-i\frac{\Delta\phi}{2}} \gamma_R \right) - d \left( \gamma_L - ie^{i\frac{\Delta\phi}{2}} \gamma_R \right) \right] \\ &= 2\lambda (d^\dagger f - df^\dagger) \end{aligned} \quad (5.41)$$

assim, o ponto quântico se acopla a um férmion regular definido por  $f = \frac{1}{2} (\gamma_L + i\gamma_R)$  e  $f^\dagger = \frac{1}{2} (\gamma_L - i\gamma_R)$  com  $\{f, f^\dagger\} = 1$ . Desta forma obtemos um sistema de dois níveis fermiônicos acoplados com dois picos laterais na densidade de estados como mostrado na Fig.42 na curva para  $\Delta\phi = 0$ .

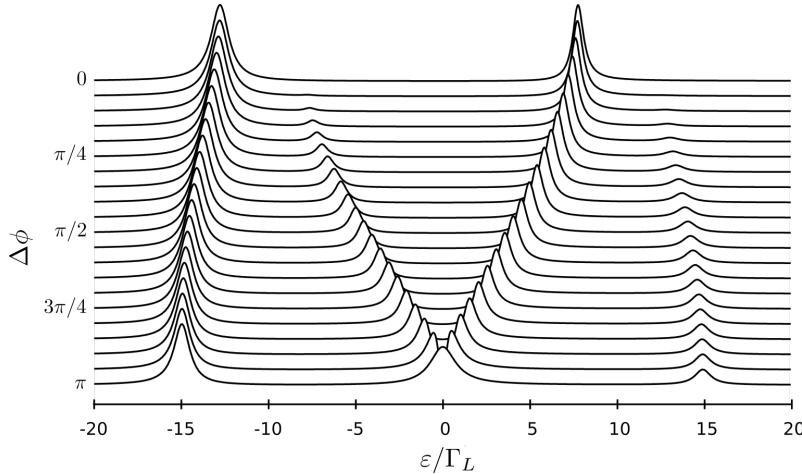


Figura 42 – Densidade de estados no ponto quântico usando a Eq.5.35,  $\rho_{dot}(\omega) = -(1/\pi) \operatorname{Im} [G_{dot}(\omega)]$  para  $t_{0,R} = t_{0,L} = 5\Gamma_L$  e  $\varepsilon_{dot} = 0$ . De forma coerente com os resultados obtidos numericamente na Fig.35 da Seção 5.2, observamos um pico em  $\omega = 0$  para  $\Delta\phi = \pi$  que sofre um desdobramento resultante da fusão dos modos de Majorana no ponto.

Fonte: Elaborada pelo autor.

## 5.5 Diagonalização do Hamiltoniano no formalismo de Bogoliubov-de Gennes

Nesta seção iremos mostrar os resultados obtidos através da diagonalização numérica do Hamiltoniano no formalismo de Bogoliubov-de Gennes obtido na Seção 4.2. Como  $\Delta_{R/L} = |\Delta_{R/L}|e^{i\phi_{R/L}}$ , definimos a diferença de fase supercondutora por  $\Delta\phi = \phi_R - \phi_L$  e adotamos  $|\Delta_{R/L}| = \Delta$ . Além disso estamos considerando que os acoplos entre o ponto e as duas cadeias são idênticos, ou seja,  $t_{0R} = t_{0L} = t_0$ .

Devido à redundância do formalismo (temos o dobro dos graus de liberdade ao escrevermos  $\mathcal{H}_{BdG}$ ) consideramos apenas os auto-estados com energia  $\varepsilon \geq 0$ . Diagonalizando numericamente a matriz  $\mathcal{H}_{BdG}$  com ambas as cadeias na fase topológica, escolhendo como parâmetros  $\mu = 0$  e  $\Delta = t$  para ambas, observamos o surgimento de dois auto-estados com energia zero quando  $\Delta\phi = \pi$ . Um deles localizado no ponto quântico e outro localizado nas extremidades das cadeias. Quando  $\Delta\phi \neq \pi$  o estado centrado no ponto quântico assume uma energia finita com o máximo ocorrendo para  $\Delta\phi = 0$ , resultante da fusão dos dois Majoranas presentes próximos ao ponto.

Na Fig.43 mostramos as energias dos auto-estados obtidos numericamente ordenados por ordem crescente. Os pontos em vermelho correspondem aos auto-estados com energia zero e a linha laranja corresponde ao gap efetivo  $\Delta_{eff}$  que separa os estados formados pelos Majoranas do quasicontínuo.

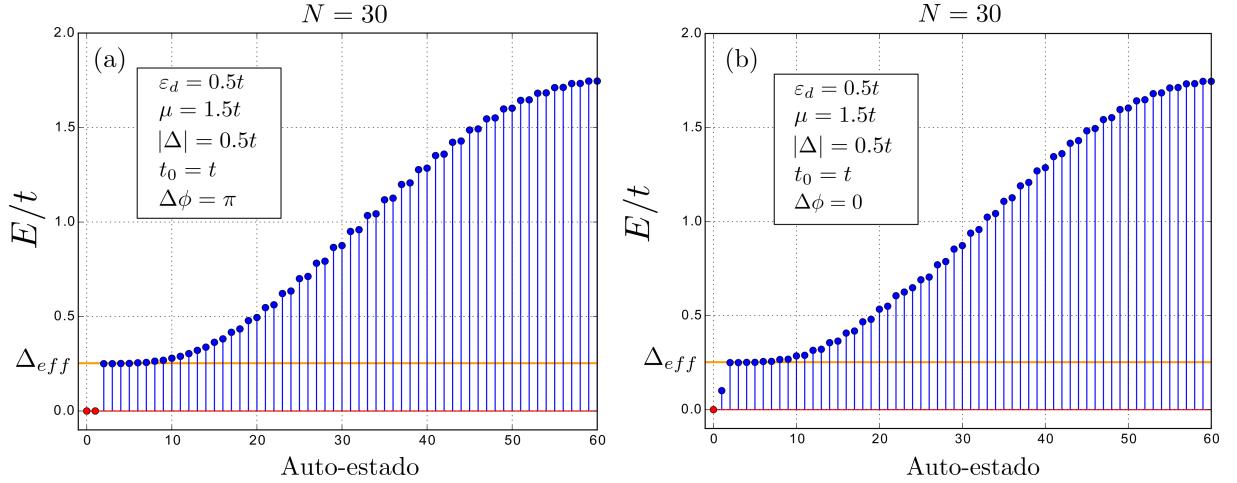


Figura 43 – Energia dos auto-estados para  $N = 30$  sitios em cada cadeia com  $\varepsilon_{dot} = 0.5t$ ,  $\mu = 1.5t$   $|\Delta| = 0.5t$ ,  $t_0 = 1.0t$  e  $t = 10\text{meV}$ . Observamos que para  $\Delta\phi = \pi$  (a) existem dois auto-estados com energia zero enquanto para  $\Delta\phi = 0$  (a) apenas um se mantém e outro estado assume energia finita. A distribuição espacial destes estados está mostrada na Fig. 44.

Fonte: Elaborada pelo autor.

As soluções obtidas pela diagonalização de  $\mathcal{H}_{BdG}$  correspondem a excitações fermiônicas do sistema com energia  $\varepsilon_n$  que satisfazem  $\mathcal{H}_{BdG}\psi_n = \varepsilon_n\psi_n$ , onde  $\psi_n = (u_1^n, \dots, u_{2N+1}^n, v_1^n, \dots, v_{2N+1}^n)$  para duas cadeias com  $N$  sitios cada e um ponto quântico. Na Fig.44 calculamos a distribuição espacial  $|\psi_n|^2 = |u^n|^2 + |v^n|^2$  apenas dos auto-estados com energia zero que chamaremos de  $\psi_1$  e  $\psi_2$  e correspondem aos pontos em vermelho na Fig.43. Verificamos que  $\psi_1$  se localiza apenas nas extremidades das cadeias enquanto  $\psi_2$  se localiza em torno do ponto quântico. Quando variamos a diferença de fase para  $\Delta\phi = 0$  apenas  $\psi_1$  permanece com energia zero localizado nas extremidades do sistema (Fig.44).

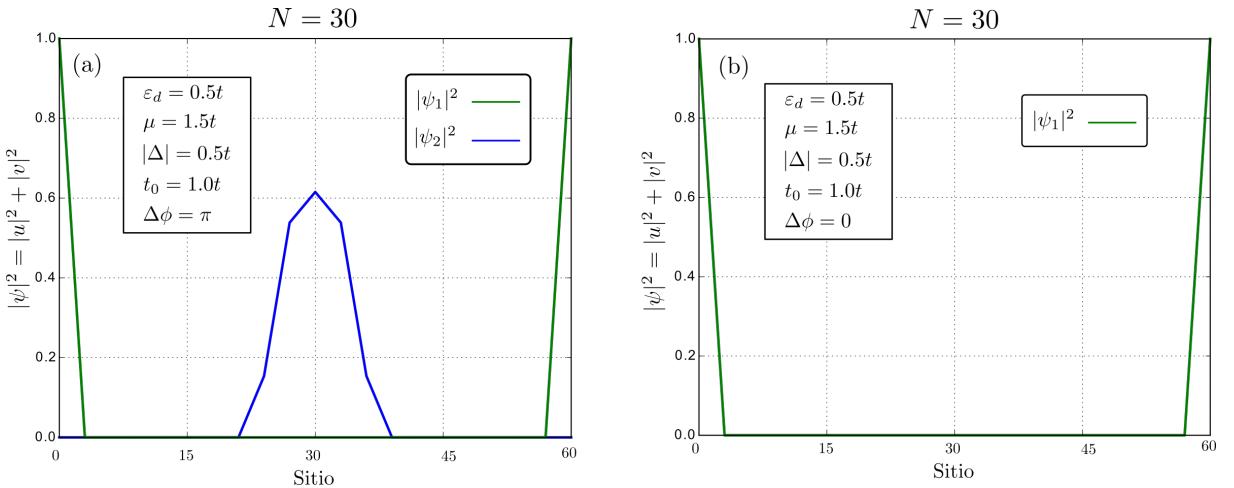


Figura 44 – Distribuição espacial da função de onda dos auto-estados de energia nula para  $N = 30$  sitios em cada cadeia, com  $\varepsilon_d = 0.5t$ ,  $\mu = 1.5t$ ,  $|\Delta| = 0.5t$ ,  $t_0 = 1.0t$  e  $t = 10\text{ meV}$ . Em (a) para  $\Delta\phi = \pi$ ,  $\psi_1$  se localiza nas extremidades externas das cadeias enquanto  $\psi_2$  se localiza em torno do ponto. Quando  $\Delta\phi = 0$ ,  $\psi_2$  assume energia finita devido a hibridização dos Majoranas em torno do ponto, enquanto  $\psi_1$  permanece com energia zero.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Os auto-estados de energia zero persistem no ponto quântico com  $\Delta\phi = \pi$  enquanto as cadeias estão na fase topológica, ou seja, para valores de  $|\mu| \lesssim 2t$  em ambas as cadeias como mostrado na Fig. 45 onde variamos  $\mu$  para  $N = 30$  sítios em cada cadeia com  $\Delta\phi = \pi$  Fig. 45(a). O desdobramento em energia tende a ocorrer próximo de  $2t$  quanto maior o número de sítios das cadeias. Para  $\Delta\phi = 0$  Fig. 45(b) observamos que a energia finita de  $\psi_2$  sofre uma variação com  $\mu$ .

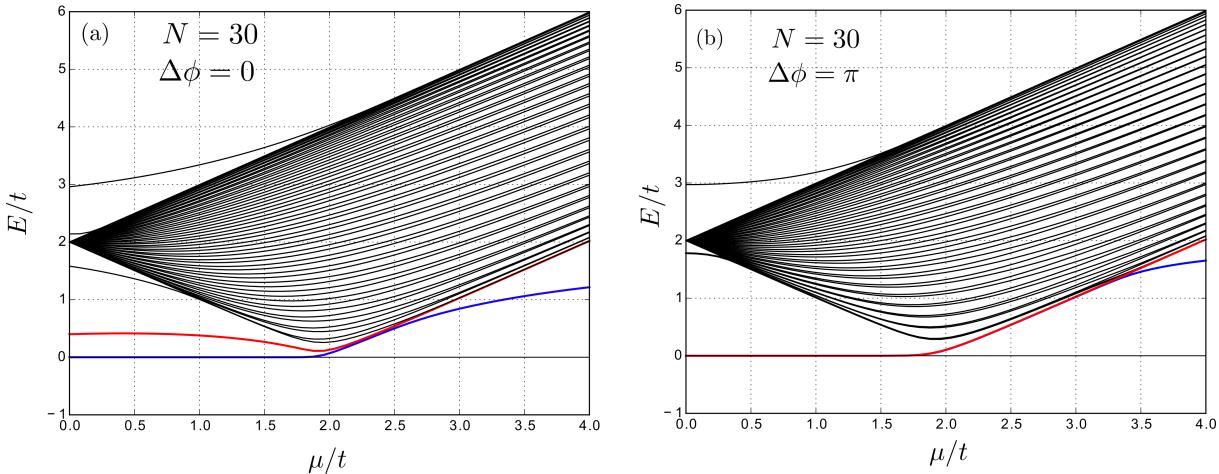


Figura 45 – Energia positiva dos auto-estados obtidos pela diagonalização de  $\mathcal{H}_{BdG}$  variando  $\mu$  simultaneamente nas duas cadeias com  $N = 30$  sítios em cada com  $\varepsilon_{dot} = 2.0t$ ,  $\Delta = t$ ,  $t_0 = t$  e  $t = 10$  meV. Em (a) fazemos  $\Delta\phi = 0$  e encontramos apenas um estado fermiônico (curva azul) em  $E = 0$  que permanece fixo nesta energia até a transição de fase ocorrer em torno de  $\mu = 2t$ . Associamos este estado ao formado pelos Majoranas externos do sistema permanecem desacoplados independente de  $\Delta\phi$ . O estado com energia finita (curva vermelha) é resultante da fusão entre os Majorana do ponto. Em (b) quando fazemos  $\Delta\phi = \pi$  encontramos dois estados fermiônicos em  $E = 0$  que permanecem fixos nessa energia até  $\mu = 2t$  sem se acoparem.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A dependência dos níveis de energia variando  $\Delta\phi$  está mostrada na Fig. 46(a) para  $N = 50$  sítios em cada cadeia com  $\mu = 1.75t$ ,  $\varepsilon_{dot} = 0.5t$ ,  $t_0 = t$  e  $t = 10$  meV para ambas. Neste regime de  $\mu$  ocorre a fusão dos Majoranas em um mesmo fio a linha tracejada mostra o gap efetivo  $\Delta_{eff}$  que separa os estados localizados do quasi-contínuo. A curva azul ( $\psi_1$ ) corresponde ao férnion formado principalmente pelos Majoranas externos e permanece próximo de  $\varepsilon = 0$  apresentando pouca dependência com  $\Delta\phi$ , já a curva vermelha ( $\psi_2$ ) representa o férnion formada pelos Majoranas em torno do ponto quântico e sua energia tem uma forte dependência com  $\Delta\phi$  que controla a fusão através da junção.

Os dois auto-estados fermiônicos que se originam da fusão dos quatro Majoranas presentes no nosso sistema correspondem às soluções  $\psi_1$  e  $\psi_2$  e permanecem com energias dentro do gap. Ao diagonalizarmos numericamente obtemos  $\varepsilon_n$  e  $\psi_n$  o que nos possibilita escrever  $\mathcal{H}_{BdG} = \frac{1}{2} \sum_n (d_n^\dagger d_n - d_n d_n^\dagger) \varepsilon_n$ , onde  $d_n^\dagger$  é o operador de criação do estado  $\psi_n$ . Assim podemos definir o estado de muitos-corpos  $|n_1 n_2\rangle$  composto pelas ocupações dos dois estados de mais baixa energia do nosso sistema  $\psi_1$  e  $\psi_2$  respectivamente, onde  $n_1 = d_1^\dagger d_1$  e  $n_2 = d_2^\dagger d_2$  são os operadores número de ocupação de cada estado. A energia do estado

$|n_1 n_2\rangle$  em função de  $\Delta\phi$  pode ser calculada a partir dos resultados numéricos por  $E_{n_1 n_2} = \langle n_1 n_2 | \mathcal{H}_{BdG} | n_1 n_2 \rangle$ , de forma que  $E_{11} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$ ,  $E_{10} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ ,  $E_{01} = \frac{1}{2}(-\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$ , e  $E_{00} = \frac{1}{2}(-\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ , estas energias em função de  $\Delta\phi$  estão mostradas na Fig. 46(a).

Quando não há fusão entre os Majoranas da mesma cadeia ocorre a degenerescência entre os estados  $|01\rangle$  e  $|11\rangle$  e entre os estados  $|10\rangle$  e  $|00\rangle$ , ou seja,  $E_{01} = E_{11}$  e  $E_{10} = E_{00}$  como mostrado na Fig. 46(b) para  $\mu = t$ . Este regime remonta ao mostrado no Capítulo 1 onde apenas dois Majoranas que formam um férmion com energia nula se acoplavam ao ponto gerando uma corrente a.c. de Josephson de período  $4\pi$ . Quando começa a ocorrer a fusão dos Majoranas na mesma cadeia como mostrado na Fig. 46(c) com  $\mu = 1.75t$  surge para  $\Delta\phi = \pi$  um *anti-crossing* entre estados de mesma paridade que não são degenerados o que dá origem a um período de  $2\pi$  na corrente de Josephson quando aplicada uma tensão  $V$  entre as extremidades do sistema. Note que a presença de um deslocamento de energia  $\delta_0$  dos estados do quasi-contínuo.

Como discutido em SAN-JOSE et al. (3) transientes na corrente de Josephson de período  $4\pi$  pode ser obtido induzindo uma transição de Landau-Zener (LZ) através de uma tensão de forma que uma transição  $|00\rangle \rightarrow |11\rangle$  ocorra [seta verde na Fig. 46(c)]. A transição LZ ocorre pela evolução não-adiabática do sistema ao variarmos  $\Delta\phi$  rapidamente aplicando uma voltagem  $V$  através do sistema de forma que  $\Delta\phi = 2eVt/h$ . No entanto podem ocorrer transições também com estados do quasicontínuo acima do *gap* que induzem um acoplamento entre estados de paridades opostas (envenenamento de quasipartícula) que destroem a periodicidade de  $4\pi$ . A presença do destacamento  $\delta_0$  entre os estados de *gap* e o quasicontínuo quando  $\Delta\phi = 2n\pi$  é uma característica crucial para mitigar os efeitos do envenenamento de quasipartícula.

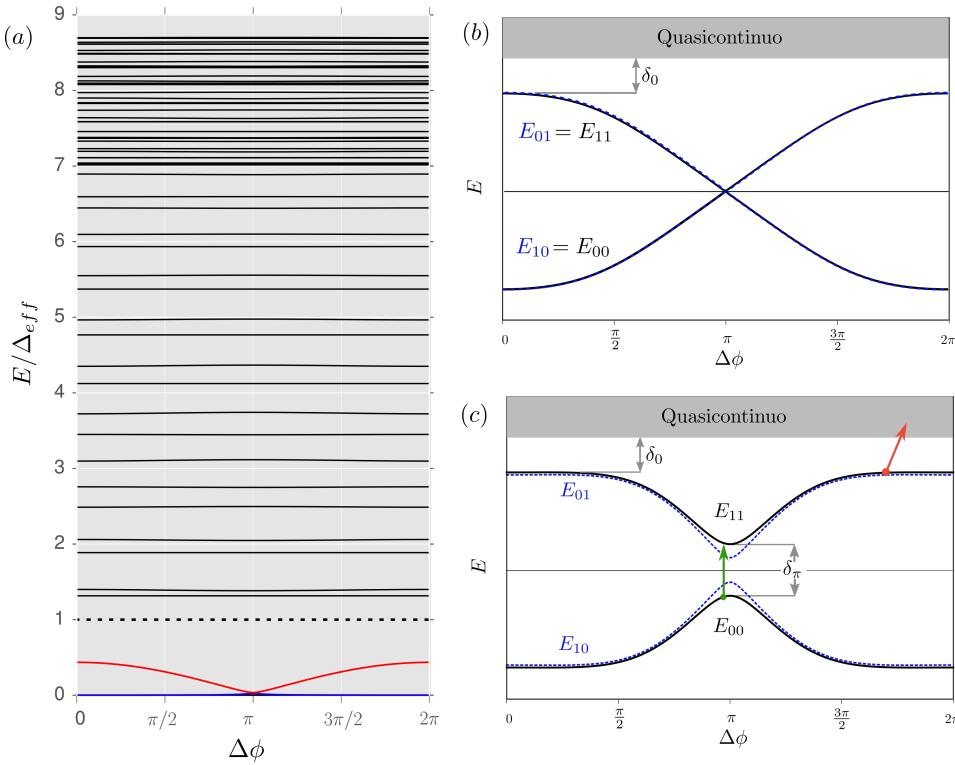


Figura 46 – (a) Energia positiva dos auto-estados em função de  $\Delta\phi$  para  $N = 50$  sítios em cada cadeia com  $\mu = 1.75t$ ,  $\varepsilon_{dot} = 0.1t$ ,  $t_0 = t$  e  $t = 10$  meV para ambas. A linha tracejada mostra o gap efetivo  $\Delta_{eff}$  que separa os estados localizados do quasi-contínuo. A curva azul corresponde a auto-energia  $\varepsilon_1(\phi)$  do auto-estado formado por  $d_1^\dagger(\phi)$  composto majoritariamente pelos Majoranas externos pois permanece em  $\varepsilon = 0$  com pouca dependência com  $\Delta\phi$ , já a curva vermelha corresponde a auto-energia  $\varepsilon_2(\phi)$  do auto-estado formado por  $d_2^\dagger(\phi)$  composto pelos Majoranas em torno do ponto e tem uma forte dependência com  $\Delta\phi$ . As energias dos estados de muitos-corpos  $|n_1 n_2\rangle$  formados pelos dois estados do gap [curvas azul e vermelha de (a)] são  $E_{00} = \frac{1}{2}(-\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ ,  $E_{11} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$ ,  $E_{10} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$  e  $E_{01} = \frac{1}{2}(-\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$ . Em (b) fizemos  $\mu = t$  onde não ocorre a fusão dos Majoranas e portanto os estados de mesma paridade são degenerados com energia zero. Este regime remonta ao exemplo mostrado no Cap. 1 e apresenta corrente a.c. de Josephson com período  $4\pi$ . Em (c) tomamos  $\mu = 1.75t$  onde há fusão dos Majoranas no nosso modelo e ocorre a abertura de um anti-crossing  $\delta_\pi$  presente em  $\Delta\phi = \pi$  e o destacamento  $\delta_0 = 0.138t = 13.8$  meV dos estados do quasi-contínuo. Em SAN-JOSE et al (3) é demonstrado que transientes de período  $4\pi$  na corrente a.c. de Josephson podem ocorrer neste regime .

Fonte: Elaborada pelo autor.

A proposta de identificação de Majoranas através de transientes na corrente Josephson a.c com período  $4\pi$  foi proposto para um sistema similar ao estudado nesta dissertação porém utilizando o modelo tight-binding *spinfull* descrito em (22, 16). No entanto os resultados por nós obtidos para nosso sistema *spinless* e mostrados na Fig. 46 são similares aos obtidos por (3) (Fig.1(b) e Fig.2) o que corrobora a validade de nossos resultados.

## 6 Conclusões

Neste trabalho investigamos a presença e fusão de modos de Majorana em um ponto quântico *spinless* não-interagente de um nível acoplado a dois fios quânticos topológicos modelados por duas cadeias de Kitaev.

Calculamos inicialmente a função de Green do ponto quântico por duas abordagens, inicialmente através do método da equação de movimento do sistema completo (PQ+cadeias) por cálculo numérico e através da solução analítica em um sistema efetivo composto pelo ponto quântico acoplado a apenas dois modos de Majorana. De posse da função de Green obtemos a densidade local de estados (*LDOS*) e a condutância elétrica de dois terminais ( $G$ ). Observamos que o surgimento do modo de Majorana no ponto apresenta uma dependência com a diferença de fase supercondutora entre as duas cadeias ( $\Delta\phi$ ) o que nos possibilita usá-la para manipular a fusão entre os modos de Majorana, resultado corroborado por ambas as abordagens.

Concluímos que a condutância de dois terminais  $G$  medida através do ponto quântico à temperatura nula apresenta uma assinatura da fusão dos modos de Majorana pois apresenta um valor de  $e^2/2h$  apenas para  $\Delta\phi = (n + 1)\pi$  com  $n = 0, 1, 2, \dots$  que corresponde ao aparecimento do Majorana dentro do ponto quântico. Este valor de condutância permanece fixo ao variarmos tanto a energia do nível do ponto abaixo ou acima do nível de Fermi dos contatos  $\varepsilon_f$  através da voltagem  $V_g$ , quanto o acoplamento  $t_0$  entre o ponto e as cadeias.

É importante salientar que do ponto de vista experimental o controle da diferença de fase supercondutora em junções semelhantes pode ser obtido através da aplicação de uma voltagem constante  $V$  entre os dois fios quânticos ou através da aplicação de um fluxo magnético em uma geometria de anel.

Em uma segunda etapa calculamos os auto-estados e auto-energias exatos do sistema completo através da diagonalização numérica do Hamiltoniano no formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG). Com estes resultados corroboramos mais uma vez a dependência da fusão dos modos de Majorana com a diferença de fase ( $\Delta\phi$ ) obtidos através do formalismo das funções de Green e reforçamos a proposta de se utilizar o efeito Josephson a.c. de período  $4\pi$  para a identificação da fusão de Majoranas ao reproduzirmos os resultados de (3).

O nosso modelo corresponde a uma junção de Josephson formada entre um ponto quântico e dois supercondutores topológicos e constitui uma plataforma para possíveis aplicações em computação quântica topológica (30). A leitura dos estados finais através da fusão de Majoranas é onde esta dissertação e futuros trabalhos nestes sistemas podem vir a contribuir para a área.



## Referências

- 1 VERNEK, E.; PENTEADO, P. H.; SERIDONIO, A. C.; EGUES, J. C. Subtle leakage of a Majorana mode into a quantum dot. *Physical Review B*, v. 89, n. 16, p. 165314, 2014.
- 2 RUIZ-TIJERINA, D. A.; VERNEK, E.; SILVA, L. G. G. V. D.; EGUES, J. C. Interaction effects on a majorana zero mode leaking into a quantum dot. *Physical Review B*, v. 91, p. 115435, 2015.
- 3 SAN-JOSE, P.; PRADA, E.; AGUADO, R. ac josephson effect in finite-length nanowire junctions with majorana modes. *Physical Review Letters*, v. 108, n. 25, p. 257001, 2012.
- 4 MAJORANA, E. Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone. *Il Nuovo Cimento*, v. 14, n. 4, p. 171–184, 1937.
- 5 WILCZEK, F. Majorana returns. *Nature Physics*, v. 5, n. 9, p. 614–618, 2009.
- 6 GIULIANI, A.; POVES, A. Neutrinoless double-beta decay. *Advances in High Energy Physics*, v. 2012, 2012. doi: 10.1155/2012/857016.
- 7 ALICEA, J. New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems. *Reports on Progress in Physics*, v. 75, n. 7, p. 076501, 2012.
- 8 NAYAK, C.; SIMON, S. H.; STERN, A.; FREEDMAN, M.; SARMA, S. D. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Reviews of Modern Physics*, v. 80, n. 3, p. 1083, 2008.
- 9 KITAEV, A. Y. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Annals of Physics*, v. 303, n. 1, p. 2–30, 2003.
- 10 KITAEV, A. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. *Physics-Uspekhi*, v. 131, 2001. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/cond-mat/0010440v2.pdf>>. Acesso em: 23 de jan. 2016.
- 11 READ, N.; GREEN, D. Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum hall effect. *Physical Review B*, v. 61, n. 15, p. 10267, 2000.
- 12 MOORE, G.; READ, N. Nonabelions in the fractional quantum hall effect. *Nuclear Physics B*, v. 360, n. 2, p. 362–396, 1991.
- 13 SARMA, S. D.; NAYAK, C.; TEWARI, S. Proposal to stabilize and detect half-quantum vortices in strontium ruthenate thin films: non-abelian braiding statistics of vortices in a  $p_x + i p_y$  superconductor. *Physical Review B*, v. 73, n. 22, p. 220502, 2006.
- 14 GURARIE, V.; RADZHOVSKY, L.; ANDREEV, A. Quantum phase transitions across a  $p$ -wave feshbach resonance. *Physical Review Letters*, v. 94, n. 23, p. 230403, 2005.
- 15 TEWARI, S.; SARMA, S. D.; NAYAK, C.; ZHANG, C.; ZOLLER, P. Quantum computation using vortices and majorana zero modes of a  $p_x + i p_y$  superfluid of fermionic cold atoms. *Physical Review Letters*, v. 98, n. 1, p. 010506, 2007.

- 16 LUTCHYN, R. M.; SAU, J. D.; SARMA, S. D. Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures. *Physical Review Letters*, v. 105, n. 7, p. 077001, 2010.
- 17 ALICEA, J. Majorana fermions in a tunable semiconductor device. *Physical Review B*, v. 81, n. 12, p. 125318, 2010.
- 18 FU, L.; KANE, C. L. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 9, p. 096407, 2008.
- 19 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. *Physical Review*, v. 108, n. 5, p. 1175, 1957.
- 20 FRANZ, M. Majorana's wires. *Nature Nanotechnology*, v. 8, n. 3, p. 149–152, 2013.
- 21 STERN, A. Non-abelian states of matter. *Nature*, v. 464, n. 7286, p. 187–193, 2010.
- 22 OREG, Y.; REFAEL, G.; OPPEN, F. von. Helical liquids and majorana bound states in quantum wires. *Physical Review Letters*, v. 105, n. 17, p. 177002, 2010.
- 23 MOURIK, V.; ZUO, K.; FROLOV, S. M.; PLISSARD, S. R.; BAKKERS, E. P. A. M.; KOUWENHOVEN, L. P. Signatures of Majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. *Science*, v. 336, n. 6084, p. 1003–1007, 2012.
- 24 DENG, M.; YU, C.; HUANG, G.; LARSSON, M.; CAROFF, P.; XU, H. Anomalous zero-bias conductance peak in a nb–insb nanowire–nb hybrid device. *Nano Letters*, v. 12, n. 12, p. 6414–6419, 2012.
- 25 DAS, A.; RONEN, Y.; MOST, Y.; OREG, Y.; HEIBLUM, M.; SHTRIKMAN, H. Zero-bias peaks and splitting in an al-inas nanowire topological superconductor as a signature of majorana fermions. *Nature Physics*, v. 8, n. 12, p. 887–895, 2012.
- 26 JOSEPHSON, B. Possible new effects in superconductive tunnelling. *Physics Letters*, v. 1, n. 7, p. 251–253, 1962.
- 27 JOSEPHSON, B. D. The discovery of tunnelling supercurrents. *Review of Modern Physics*, v. 46, p. 251–254, 1974.
- 28 SHEN, S.-Q. *Topological insulators: Dirac equation in condensed matters*. New York: Springer, 2013. (Springer series in solid-state sciences, 174).
- 29 DENG, M.; YU, C.; HUANG, G.; LARSSON, M.; CAROFF, P.; XU, H. Parity independence of the zero-bias conductance peak in a nanowire based topological superconductor-quantum dot hybrid device. *Scientific Reports*, v. 4, 2014. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1406.4435v1.pdf>>. Acesso em: 23 de jan. 2016.
- 30 HOFFMAN, S.; SCHRADE, C.; KLINOVAJA, J.; LOSS, D. Universal quantum computation with hybrid spin-Majorana qubits. 2016. Disponível em: <<http://arxiv.org/pdf/1602.06923v1.pdf>>. Acesso em: 23 de jan. 2016.
- 31 LÖWDIN, P.-O. A note on the quantum-mechanical perturbation theory. *The Journal of Chemical Physics*, v. 19, n. 11, p. 1396–1401, 1951.

- 32 BERNEVIG, B. A.; HUGHES, T. L. *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton: Princeton University Press, 2013.
- 33 WEN, X.-G.; WU, Y.-S.; HATSUGAI, Y. Chiral operator product algebra and edge excitations of a fractional quantum hall droplet. *Nuclear Physics B*, v. 422, n. 3, p. 476 – 494, 1994.
- 34 ZUBAREV, D. N. Double-time green functions in statistical physics. *Soviet Physics Uspekhi*, v. 3, n. 3, p. 320, 1960.
- 35 MEIR, Y.; WINGREEN, N. S. Landauer formula for the current through an interacting electron region. *Physical Review Letters*, v. 68, n. 16, p. 2512, 1992.
- 36 PENTEADO, P. H. *Transport through leaked Majorana modes in quantum dots and adatoms*. 2013. Tese (Doutorado) — Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2013. Disponível em: <<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/76/76131/tde-13012014-135024/>>. Acesso em: 23 de jan. 2016.
- 37 LIU, D. E.; BARANGER, H. U. Detecting a Majorana-fermion zero mode using a quantum dot. *Physical Review B*, v. 84, n. 20, p. 201308, 2011.
- 38 PRADA, E.; SAN-JOSE, P.; AGUADO, R. Transport spectroscopy of NS nanowire junctions with Majorana fermions. *Physical Review B*, v. 86, n. 18, p. 1–5, 2012.
- 39 RAINIS, D.; TRIFUNOVIC, L.; KLINOVAJA, J.; LOSS, D. Towards a realistic transport modeling in a superconducting nanowire with Majorana fermions. *Physical Review B*, v. 87, n. 2, p. 1–6, 2013.
- 40 HEWSON, A. C. *The Kondo problem to heavy fermions*. Cambridge: Cambridge University Press, 1997. v. 2.
- 41 BRUUS, H.; FLENSBERG, K. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. Oxford: Oxford University Press, 2004.
- 42 COLEMAN, P. *Introduction to many-body physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2015.



# APÊNDICE A – Funções de Green

## A.1 Definição

As funções de Green permitem o cálculo de valores esperados de observáveis de um sistema. Existem vários tipos de funções que podemos definir para o caso de um elétron, inicialmente iremos definir a função de Green retardada,

$$G^R(\mathbf{r}t\sigma, \mathbf{r}'t'\sigma') = -i\theta(t - t')\langle \{\Psi_\sigma(\mathbf{r}t), \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'t')\} \rangle \quad (\text{A.1})$$

onde  $\{\dots\}$  é o anti-comutador e  $\Psi_\sigma(\mathbf{r}t)$   $\{\dots\}$  é o operador de campo que tem a função de criar um elétron com projeção de spin  $\sigma$  na posição  $\mathbf{r}$  e tempo  $t$ . Elas são chamadas de propagadores pois dão a amplitude de uma partícula inserida em  $r'$  no tempo  $t'$  se propagar para a posição  $\mathbf{r}$  no tempo  $t$ . Como  $G^R$  requer que  $t > t'$  ela recebe o nome de “retardada” no tempo. Outras funções de Green podem ser definidas,

$$G^>(\mathbf{r}t\sigma, \mathbf{r}'t'\sigma') = -i\langle \Psi_\sigma(\mathbf{r}t)\Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'t') \rangle \quad (\text{A.2})$$

$$G^<(\mathbf{r}t\sigma, \mathbf{r}'t'\sigma') = i\langle \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'t')\Psi_\sigma(\mathbf{r}t) \rangle \quad (\text{A.3})$$

podemos ver que a função de Green retardada pode ser escrita em termo dessas duas funções,

$$G^R(\mathbf{r}t\sigma, \mathbf{r}'t'\sigma') = \theta(t - t') \left[ G^>(\mathbf{r}t\sigma, \mathbf{r}'t'\sigma') - G^<(\mathbf{r}t\sigma, \mathbf{r}'t'\sigma') \right] \quad (\text{A.4})$$

No *ensemble* canônico o número de partículas  $N$  do sistema é fixo, e o sistema pode trocar energia com um reservatório. A energia média do sistema é determinada pela temperatura  $T$ . Média estatística de um operador quântico arbitrário  $A$  neste *ensemble* é dada por

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | A | n \rangle e^{-\beta E_n} \quad (\text{A.5})$$

Aqui  $|n\rangle$  corresponde ao conjunto (normalizado) de auto-estados do Hamiltoniano  $H$  com auto-valores  $E_n$ ,  $\beta = 1/k_B T$ , e  $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$  é a função partição. Podemos escrever o valor

esperado de uma forma independente da base definindo a matriz densidade (na realidade um operador),

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} \quad (\text{A.6})$$

e

$$Z = \text{Tr} (e^{-\beta H}) \quad (\text{A.7})$$

com a condição  $\text{Tr} \rho = 1$  necessária para a matriz densidade. Com essa definição podemos escrever

$$\langle A \rangle = \text{Tr} (\rho A) \quad (\text{A.8})$$

Já no *ensemble* grand canônico o sistema não possui um número fixo de partículas, mas pode trocar partículas (com um aumento da energia) com um reservatório. Portanto precisamos introduzir outro parâmetro (além da temperatura  $T$ ), conhecido como potencial químico  $\mu$ , que determina o número médio de partículas no sistema. A matriz densidade neste *ensemble* é dada por

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H-\mu N)} \quad (\text{A.9})$$

onde a função partição é

$$Z = \text{Tr} (e^{-\beta(H-\mu N)}) \quad (\text{A.10})$$

Aqui  $N$  é o operador número que conta a quantidade total de partículas. Com esses definições de  $\rho$  e  $Z$  temos novamente

$$\langle A \rangle = \text{Tr} (\rho A) \quad (\text{A.11})$$

Neste *ensemble* a dependência temporal dos operadores é determinada por  $H - \mu N$  e não por  $H$ . Isto corresponde a medir todas energias de uma partícula com relação ao potencial químico  $\mu$ . Portanto definimos

$$A(t) \equiv e^{i(H-\mu N)t} A e^{-i(H-\mu N)t} \quad (\text{A.12})$$

A partir de agora usaremos apenas o *ensemble* grand canônico e para economizar notação usaremos  $H$  sempre se referindo a  $H - \mu N$ . Portanto  $|n\rangle$  corresponde ao auto-estado com respectivo auto-valor  $E_N$  de  $H - \mu N$ .

As funções de Green consideradas até o momento estão nas bases de espaço e tempo, mas em muitos problemas, tais como o que iremos abordar neste trabalho, é conveniente estudar as funções de Green que envolvem a criação/aniquilação de partículas com estado de *momentum* definido por  $k$ . Assim faremos uma mudança de base. Considerando uma base  $|\nu\rangle$ , podemos escrever

$$|x\rangle = \sum_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu|x\rangle = \sum_{\nu} \langle x|\nu\rangle^* |\nu\rangle = \sum_{\nu} \phi_{\nu}^*(x) |\nu\rangle \quad (\text{A.13})$$

onde  $\phi_{\nu}(x) \equiv \langle x|\nu\rangle$  é a função de onda de uma partícula no estado  $|\nu\rangle$ . Escrevendo  $|x\rangle = \psi^{\dagger}(x)|0\rangle$  e  $|\nu\rangle = c_{\nu}^{\dagger}|0\rangle$  (aqui  $|0\rangle$  corresponde ao estado de “vácuo” sem partículas) chegamos às relações

$$\psi^{\dagger}(x) = \sum_{\nu} \phi_{\nu}^*(x) c_{\nu}^{\dagger} \quad , \quad \psi(x) = \sum_{\nu} \phi_{\nu}(x) c_{\nu} \quad (\text{A.14})$$

quando  $|\nu\rangle = |\mathbf{k}\sigma\rangle$  teremos,

$$\psi^{\dagger}(x) = \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) = \sum_{\mathbf{k}\sigma'} \underbrace{\phi_{\mathbf{k},\sigma'}^*(\mathbf{r}, \sigma)}_{\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\delta_{\sigma,\sigma^*}} c_{\mathbf{k}',\sigma'}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \quad (\text{A.15})$$

e também,

$$\psi_{\sigma}(x) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) c_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (\text{A.16})$$

aqui assumimos que as partículas ocupam um cubo de volume  $\Omega$  com condições periódicas de contorno tais que

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{A.17})$$

Em um sistema que é invariante translacionalmente no espaço, as funções de Green nas bases de espaço e tempo podem não depender separadamente de  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{r}'$ , mas apenas da diferença  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ . Nestes sistemas é natural considerarmos a função de Green no espaço de *momentum*  $G(\mathbf{k}, \sigma, t; \mathbf{k}', \sigma', t')$  pois ela se torna diagonal nos índices  $\mathbf{k}$ . Podemos ver isto aplicando uma mudança de base na função de Green retardada,

$$G^R(x, t, x', t') = G^R(\mathbf{r}, \sigma, t; \mathbf{r}', \sigma', t') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} G^R(\mathbf{k}, \sigma, t; \mathbf{k}', \sigma', t') \quad (\text{A.18})$$

$$= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}'} G^R(\mathbf{k}, \sigma, t; \mathbf{k}', \sigma', t') \quad (\text{A.19})$$

como o lado esquerdo depende apenas de  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ , a dependência em  $\mathbf{r}'$  no lado direito deve se anular, o que significa que no espaço  $\mathbf{k}$ , a função de Green não é zero apenas quando  $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ , ou seja  $G^R(\mathbf{k}, \sigma, t; \mathbf{k}', \sigma', t') = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G^R(\mathbf{k}, \sigma, t; \sigma', t')$ ,

$$G^R(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \sigma, t; \sigma', t') = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} G^R(\mathbf{k}, \sigma, t; \sigma', t') \quad (\text{A.20})$$

com

$$G^R(\mathbf{k}, \sigma, t; \sigma', t') = -i\theta(t - t') \langle [c_{\mathbf{k}, \sigma}(t), c_{\mathbf{k}, \sigma'}^\dagger(t')]_\pm \rangle \quad (\text{A.21})$$

Além disso se o Hamiltoniano não depender explicitamente do tempo, as funções de Green não irão depender de  $t$  e  $t'$  separadamente, mas apenas da diferença  $t - t'$ . Assim é conveniente aplicar a transformada de Fourier na variável  $t$  da função de Green definida por (suprimindo todas as outras varáveis na notação),

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G(t), \quad (\text{A.22})$$

e sua inversa

$$G(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} G(\omega), \quad (\text{A.23})$$

Vamos agora considerar a função de Green dita diagonal,  $G^R(\nu, t; \nu', t') \rightarrow G^R(\nu - \nu'; t, t') \rightarrow G^R(\nu - \nu'; t - t')$  e derivar a representação espectral (ou de Lehmann) para sua transformada de Fourier  $G^R(\nu; \omega)$ , começando com

$$G^>(\nu; t, t') = -i \langle c_\nu(t) c_\nu(t') \rangle \quad (\text{A.24})$$

escrevemos explicitamente as expressões para a média  $\langle \dots \rangle$  e a dependência temporal dos operadores,

$$G^>(\nu; t, t') = -i \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | c_\nu(t) c_\nu^\dagger(t') | n \rangle \quad (\text{A.25})$$

$$= -\frac{i}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n | e^{iHt} c_\nu e^{-iHt} | m \rangle \langle m | e^{iHt'} c_\nu^\dagger e^{-iHt'} | n \rangle \quad (\text{A.26})$$

$$= -\frac{i}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_m)(t-t')} \underbrace{\langle n | c_\nu | m \rangle}_{\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle^*} \langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle \quad (\text{A.27})$$

$$= -\frac{i}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_m)(t-t')} |\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2 \quad (\text{A.28})$$

segundo os mesmo passos para  $G^<(\nu; t, t')$ ,

$$G^<(\nu; t, t') = \frac{i}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{i(E_m - E_n)(t-t')} |\langle n | c_\nu^\dagger | m \rangle|^2 \quad (\text{A.29})$$

$$= \frac{i}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_m} e^{i(E_n - E_m)(t-t')} |\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2 \quad (\text{A.30})$$

onde na última equação trocamos as variáveis  $m$  e  $n$ . Com isso calculamos,

$$G^R(\nu; t - t') = \theta(t - t') [G^>(\nu; t, t') - G^<(\nu; t, t')] \quad (\text{A.31})$$

$$= -i\theta(t - t') \frac{1}{Z} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) e^{i(E_n - E_m)(t-t')} |\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2 \quad (\text{A.32})$$

aplicando a transformada de Fourier,

$$G^R(\nu, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G^R(\nu, t) \quad (\text{A.33})$$

$$= -\frac{i}{Z} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) |\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \theta(t) e^{i(\omega + E_n - E_m)t} \quad (\text{A.34})$$

$$= -\frac{i}{Z} \sum_{n,m} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) |\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2 \int_0^{\infty} dt e^{i(\omega + E_n - E_m + i\eta)t} \quad (\text{A.35})$$

temos,

$$G^R(\nu, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \frac{|\langle m | c_\nu^\dagger | n \rangle|^2}{\omega + E_n - E_m + i\eta} (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \quad (\text{A.36})$$

Neste cálculo fizemos  $\omega \rightarrow \omega + i\eta$  (com  $\eta = 0^+$ ) para tornar a integral convergente. A Eq.A.36 é a representação de Lehmann de  $G^R(\nu, \omega)$ . Suas singularidades são pólos localizados

infinitesimalmente abaixo do eixo real em  $\omega = E_m - E_n - i\eta$ , que existem sempre que o elemento de matriz  $\langle m|c_\nu^\dagger|n\rangle \neq 0$ . Portanto a partir dos pólos de  $G^R(\nu, \omega)$  pode-se obter informações sobre as energias de excitação  $E_m - E_n$  associados com os auto-estados  $|m\rangle$  e  $|n\rangle$  que estão conectados pelo operador de criação  $c_\nu^\dagger$ , ou seja, auto-estados para os quais o estado  $|m\rangle$  têm uma sobreposição com o estado  $c_\nu^\dagger|n\rangle$ , que claramente possui uma partícula a mais. Assim  $G^R(\nu, \omega)$  nos dá informação sobre o espectro de excitação para uma partícula.

### A.1.1 Função espectral

A seguir discutiremos sobre uma quantidade que será crucial neste trabalho, chamada de função espectral, é definida por

$$A(\nu, \omega) = -\frac{1}{2\pi} \text{Im}[G^R(\nu, \omega)] \quad (\text{A.37})$$

usando a Eq.A.36 e o fato que para  $\eta = 0^+$  e  $x \in \mathbb{R}$ ,

$$\text{Im} \left[ \frac{1}{x + i\eta} \right] = -\frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = -\pi\delta(x) \quad (\text{A.38})$$

encontramos,

$$A(\nu, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} |\langle m|c_\nu^\dagger|n\rangle|^2 (e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}) \delta(\omega + E_n - E_m). \quad (\text{A.39})$$

A seguir vamos tomar  $\nu = (\mathbf{k}, \sigma)$  e demonstrar que a função espectral  $A(\mathbf{k}\sigma, \omega)$  satisfaz a condição

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\mathbf{k}\sigma, \omega) = 1 \quad (\text{A.40})$$

que corresponde à uma *regra de soma*. Uma *regra de soma* é exata para a integral de frequência de certas quantidades (como por exemplo as funções espetrais). Em cálculos para sistemas reais, geralmente obtém-se apenas resultados aproximados destas quantidades, que podem não satisfazer a regra por completo. Desta forma esse resultado é útil para medir a qualidade das aproximações feitas.

A prova se segue por,

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\mathbf{k}\sigma, \omega) &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} |\langle m | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | n \rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta(\omega + E_n - E_m)}_1 \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} |\langle m | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | n \rangle|^2 (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle m | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k}\sigma} | m \rangle (e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}) \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \left[ e^{-\beta E_n} \langle n | c_{\mathbf{k}\sigma} | m \rangle \langle m | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | n \rangle + e^{-\beta E_m} \langle m | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k}\sigma} | m \rangle \right] \\
&= \frac{1}{Z} \left[ \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger | n \rangle + \sum_m e^{-\beta E_m} \langle m | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} | m \rangle \right] \\
&= \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \underbrace{c_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}}_{\{c_{\mathbf{k}\sigma}, c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger\}=1} | n \rangle = \frac{1}{Z} \underbrace{\sum_n e^{-\beta E_n}}_Z = 1 \quad (\text{A.41})
\end{aligned}$$

Esta propriedade junto com o fato que  $A(\mathbf{k}\sigma, \omega) \geq 0$  (que pode ser inferida da Eq.A.36) sugerem que  $A(\mathbf{k}\sigma, \omega)$  possa ser interpretada como uma densidade de probabilidade, e  $A(\mathbf{k}\sigma, \omega)d\omega$  seria (mais propriamente para o caso não interagente) a probabilidade de um férnion com *momentum*  $\mathbf{k}$  ter uma energia no intervalo infinitesimal  $d\omega$  em torno de  $\omega$ .

A função espectral  $A(\mathbf{k}\sigma, \omega)$  pode ser medida experimentalmente através de espectroscopia de tunelamento (nesta técnica a condutância diferencial  $dI/dV$  em baixas temperaturas fornece informação sobre a densidade de estados  $D(\omega)$ ) e por *Angle Resolved Photo-Emission Spectroscopy* (ARPES). Para maiores detalhes recomendamos Cap. 8 de BRUUS et. al (41) e Cap.5 de COLEMAN. (42)

### A.1.2 Densidade local de estados

Uma quantidade importante que pode ser obtida da função espectral é a densidade de estados (DOS) que poder ser calculada por

$$D(\omega) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k},\sigma} A(\mathbf{k}\sigma, \omega) \quad (\text{A.42})$$

e podemos notar desta expressão que  $A(\mathbf{k}\sigma, \omega)$  corresponde à densidade de estados (LDOS).

## A.2 Equação de movimento

Nesta seção vamos derivar a equação de movimento para a função de Green retardada dependente do tempo dada por

$$G_{AB}^r(t, t') = -i\theta(t - t') \langle \{A(t), B(t')\} \rangle \quad (\text{A.43})$$

em que  $A(t)$  e  $B(t)$  são operadores de férmons na representação de Heisenberg,  $\{A(t), B(t')\}$  corresponde ao anticomutador e o valor esperado  $\langle \dots \rangle$  pode ser tanto uma média termodinâmica de equilíbrio quanto o valor esperado de um estado fundamental à temperatura zero. Calculando sua derivada temporal, obtemos

$$\frac{d}{dt} G_{AB}^r(t - t') = -i \langle \{A(t), B(t')\} \rangle \frac{d}{dt} \theta(t - t') - i\theta(t - t') \frac{d}{dt} \langle \{A(t), B(t')\} \rangle \quad (\text{A.44})$$

a derivada no segundo termo a direita da equação acima pode ser escrita por,

$$\frac{d}{dt} \langle \{A(t), B(t')\} \rangle = \langle \{\dot{A}(t), B(t')\} \rangle, \quad (\text{A.45})$$

utilizando a equação de Heisenberg, a derivada temporal do operador  $A(t)$  é dada por  $\dot{A}(t) = -i[A, H]$  com  $\hbar = 1$ . Substituindo esses termos na Eq. A.44 e fazendo uso da relação  $\frac{d}{dt} \theta(t - t') = \delta(t - t')$ , chegamos a equação de movimento para a função de Green dependente do tempo,

$$\dot{G}_{AB}^r(t, t') = -i\delta(t - t') \langle \{A(t), B(t')\} \rangle - \theta(t - t') \langle \{[A(t), H], B(t')\} \rangle, \quad (\text{A.46})$$

como estaremos interessados em processos que dependem apenas do intervalo de tempo, é conveniente trabalharmos com a transformada de Fourier da função de Green,

$$G_{AB}(\omega) = \int e^{i\omega\tau} G_{AB}(\tau) d\tau = \mathcal{F}[G_{AB}(\tau)], \quad (\text{A.47})$$

onde  $\tau = t - t'$ . Calculando a transformada em ambos os membros da Eq.A.46, obtemos

$$-i\omega G_{AB}(\omega) = -i\langle \{A, B\} \rangle - \mathcal{F}(\theta(t - t') \langle \{[A(t), H], B(t')\} \rangle), \quad (\text{A.48})$$

$$\omega G_{AB}(\omega) = \langle\{A, B\}\rangle + \mathcal{F}(-i\theta(t - t') \langle\{[A(t), H], B(t')\}\rangle) \quad (\text{A.49})$$

usando a notação  $\langle\langle A; B\rangle\rangle \equiv G_{AB}(\omega)$ , chegamos a expressão fundamental para os cálculos realizados neste trabalho,

$$\omega\langle\langle A; B\rangle\rangle = \langle\{A, B\}\rangle + \langle\langle[A, H]; B\rangle\rangle. \quad (\text{A.50})$$

Para garantir a convergência das integrais de Fourier, a energia  $\omega$  deve ser entendida como uma continuação analítica no espaço complexo, de forma que devemos fazer a substituição  $\omega \rightarrow \omega + i\eta$ , onde  $\eta$  é um infinitesimal. É importante salientar que o segundo termo do lado direito da Eq. A.46 gera uma série de funções de Green para as quais precisaremos calcular novamente a equação de movimento de forma iterativa. Em Hamiltonianos que possuem termos de interação é necessários truncar essa série através de aproximações, no entanto o sistema de estudo deste trabalho será não-interagente, possibilitando obtermos um sistema fechado exato.



# APÊNDICE B – Cálculo da função de Green pelo método da equação de movimento

## B.1 Elétrons livres

Para exemplificar o uso da equação de movimento para as funções de Green, mais especificamente a equação de movimento, a partir da qual, pode-se calcular observáveis importantes, como a densidade de estados (DOS) e a condutância (G) por exemplo, iremos estudar, inicialmente, o sistema mais simples possível, o da partícula livre.

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (\text{B.1})$$

onde  $c_{k\sigma}^\dagger$  e  $c_{k\sigma}$  são operadores fermiônicos de criação e destruição respectivamente. Vamos calcular a função de Green  $G^r(k, k') \equiv \langle \langle c_{k\sigma}; c_{k'\sigma}^\dagger \rangle \rangle$  a partir da equação de movimento para esse operadores:

$$\omega \langle \langle c_{k\sigma}; c_{k'\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \langle [c_{k\sigma}, c_{k'\sigma}^\dagger]_+ \rangle + \langle \langle [c_{k\sigma}, H]; c_{k'\sigma}^\dagger \rangle \rangle, \quad (\text{B.2})$$

como  $[c_{k\sigma}, c_{k'\sigma}^\dagger]_+ = \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'}$ , precisamos calcular o comutador,

$$[c_{k\sigma}, H] = \sum_{q\sigma} \epsilon_q [c_{k\sigma}, c_{q\sigma}^\dagger c_{q\sigma}], \quad (\text{B.3})$$

onde

$$[c_{k\sigma}, c_{q\sigma}^\dagger c_{q\sigma}] = c_{k\sigma} c_{q\sigma}^\dagger c_{q\sigma} - c_{q\sigma}^\dagger c_{q\sigma} c_{k\sigma} = (c_{k\sigma} c_{q\sigma}^\dagger + c_{q\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) c_{q\sigma} = \delta_{kq} c_{q\sigma}. \quad (\text{B.4})$$

Substituindo a expressão acima na Eq.B.2, obtemos,

$$\omega \langle \langle c_{k\sigma}; c_{k'\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \delta_{kk'} + \epsilon_k \langle \langle c_{k\sigma}; c_{k'\sigma}^\dagger \rangle \rangle, \quad (\text{B.5})$$

que isolando resulta em,

$$\langle \langle c_{k\sigma}; c_{k'\sigma}^\dagger \rangle \rangle = \frac{\delta_{kk'}}{\omega - \epsilon_k}, \quad (\text{B.6})$$

$$G^r(k, k') = \frac{\delta_{kk'}}{\omega - \epsilon_k}. \quad (\text{B.7})$$

É importante salientar aqui que por motivos de convergência devemos substituir  $\omega \rightarrow \omega + i\eta$  e calcular o limite para  $\eta \rightarrow 0_+$ , ver . A densidade de estados pode ser calculada pela expressão

$$\rho(\omega, k) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} [G^r(k, k')] \quad (\text{B.8})$$

fazendo as substituições necessárias, obtemos

$$\rho(\omega, k) = \frac{-1}{\pi} \frac{-\eta}{(\omega - \epsilon_k)^2 + \eta^2} = \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{(\omega - \epsilon_k)^2 + \eta^2} \quad (\text{B.9})$$

que corresponde a uma Lorentziana, no limite para  $\eta \rightarrow 0_+$  se torna uma função  $\delta$  de Dirac. Assim o resultado se torna:

$$\rho(\omega, k) = \delta(\omega - \epsilon_k) \quad (\text{B.10})$$

## B.2 Ponto quântico acoplado a dois contatos metálicos

Nesta secção vamos encontrar a equação de movimento pra um ponto quântico com um único nível *spinless* não-interagente acoplado a dois contatos metálicos, como mostrado na Fig. 47.

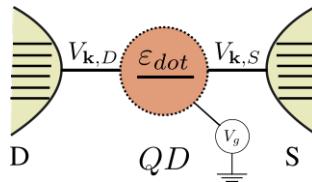


Figura 47 – Diagrama esquemático de um ponto quântico de um nível *spinless* acoplado a dois contatos metálicos

Fonte: Elaborada pelo autor.

O Hamiltoniano correspondente será

$$H = \varepsilon_{dot} d^\dagger d + \sum_{k,\alpha=S,D} \varepsilon_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger c_{k\alpha} + \sum_{k,\alpha=S,D} \left( V_{k\alpha} c_{k\alpha}^\dagger d + V_{k\alpha}^* d^\dagger c_{k\alpha} \right) \quad (\text{B.11})$$

$$(\text{B.12})$$

pela equação de movimento (Eq.A.50) calculamos a função de Green para o ponto,

$$\omega \langle \langle d; d^\dagger \rangle \rangle = \langle \{ d, d^\dagger \} \rangle + \langle \langle [d, H]; d^\dagger \rangle \rangle, \quad (\text{B.13})$$

inicialmente resolvemos o anti-comutador,

$$[d, H] = \varepsilon_{dot} [d, d^\dagger d] + \sum_{q,\alpha} \varepsilon_{q\alpha} [d, c_{q\alpha}^\dagger c_{q\alpha}] + \sum_{q,\alpha} (V_{q\alpha} [d, c_{q\alpha}^\dagger d] + V_{q\alpha}^* [d, d^\dagger c_{q\alpha}]), \quad (\text{B.14})$$

calculando cada termo, chegamos a

$$\omega \langle \langle d; d^\dagger \rangle \rangle = 1 + \varepsilon_{dot} \langle \langle d; d^\dagger \rangle \rangle + \sum_{k\alpha} V_{k\alpha}^* \langle \langle c_k; d^\dagger \rangle \rangle, \quad (\text{B.15})$$

para continuar devemos encontrar a função de Green  $\langle \langle c_k; d^\dagger \rangle \rangle$ , utilizando novamente a equação de movimento,

$$\omega \langle \langle c_k; d^\dagger \rangle \rangle = \langle \{c_k, d^\dagger\} \rangle + \langle \langle [c_k, H]; d^\dagger \rangle \rangle \quad (\text{B.16})$$

com

$$[c_k, H] = \varepsilon_{dot} [c_{k\alpha}, d^\dagger d] + \sum_{q,\alpha} \varepsilon_{q\alpha} [c_{k\alpha}, c_{q\alpha}^\dagger c_{q\alpha}] + \sum_{q,\alpha} (V_{q\alpha} [c_{k\alpha}, c_{q\alpha}^\dagger d] + V_{q\alpha}^* [c_{k\alpha}, d^\dagger c_{q\alpha}]) \quad (\text{B.17})$$

chegamos a

$$\omega \langle \langle c_k; d^\dagger \rangle \rangle = \varepsilon_{dot} \langle \langle c_k; d^\dagger \rangle \rangle + V_k \langle \langle d; d^\dagger \rangle \rangle \quad (\text{B.18})$$

$$\langle \langle c_k; d^\dagger \rangle \rangle = \frac{V_k \langle \langle d; d^\dagger \rangle \rangle}{\omega - \varepsilon_{dot}} \quad (\text{B.19})$$

substituindo,

$$(\omega - \varepsilon_{dot}) \langle \langle d; d^\dagger \rangle \rangle = 1 + \sum_{k,\alpha} \frac{|V_{\alpha k}|^2 \langle \langle d; d^\dagger \rangle \rangle}{\omega - \varepsilon_{dot}} \quad (\text{B.20})$$

renomeando  $G(\omega) = \langle \langle d; d^\dagger \rangle \rangle$ ,

$$G(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_{dot} - \sum_k \frac{|V_{\alpha k}|^2}{\omega - \varepsilon_{dot}}} \quad (\text{B.21})$$

O somatório corresponde à auto-energia dos contatos, geralmente é uma função complexa da forma  $\Sigma = \Lambda + i\Gamma$ , onde  $\Lambda$  descreve um *shift* na energia do nível do ponto e  $i\Gamma$

um alargamento (*broadening*) deste nível devido ao acoplamento com o contínuo de estados dos contatos metálicos. Estaremos usando neste trabalho o limite de banda-larga (Wide-Band Limit) onde a estrutura eletrônica e a geometria dos contatos é simplificado assumindo uma densidade de estados (DOS) constante com largura  $D \gg \omega$  e um acoplamento independente do *momentum*  $V_k = V$ . Uma vez que o transporte é dominado geralmente por estados próximos do nível de Fermi, e a densidade de estados é uma função que varia lentamente na energia, essa aproximação se justifica. Vamos transformar o somatório acima em uma integral sobre momento  $\sum_k \rightarrow \int \frac{L}{(2\pi)} dk$ , e usar a relação,

$$dk = \frac{d\epsilon}{d\omega} d\omega = \rho_0(\omega) d\omega \quad (\text{B.22})$$

onde  $\rho_0(\omega)$  corresponde a densidade de estados dos contatos metálicos. Afim de manter a convergência das funções de Green, substituímos  $\omega$  pelo termo  $\omega + i\eta$ , assumindo  $\eta \rightarrow 0^+$  ao final dos cálculos, com isso temos,

$$\sum_k \frac{|V_{ak}|^2}{\omega - \epsilon_k + i\eta} \Rightarrow |V|^2 \int \frac{\rho_0(\omega)}{\omega - \epsilon + i\eta}. \quad (\text{B.23})$$

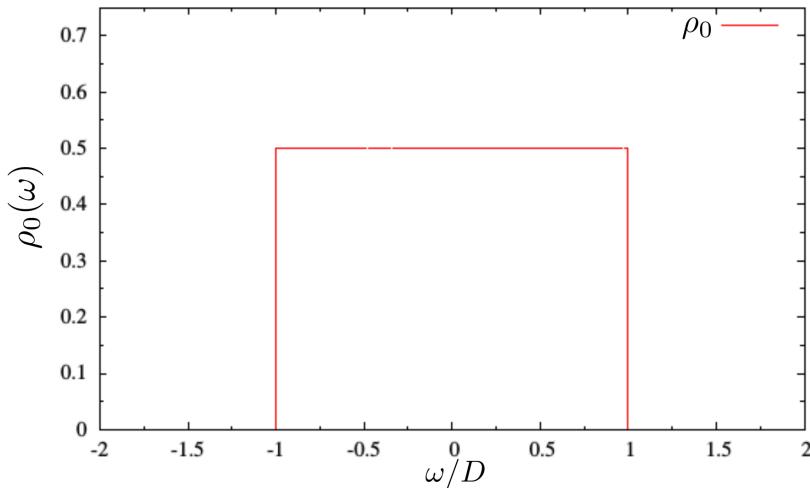


Figura 48 – Densidade de estados constante dos contatos metálicos  $\rho_0(\omega)$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Vamos assumir que a densidade de estados do contato seja dada por  $\rho_0(\omega) = \frac{1}{2D}\theta(D + |\omega|)\theta(D - |\omega|)$  com largura da banda igual a  $2D$  como mostrada na Fig.48. Fazendo estas mudanças encontramos,

$$\frac{|V|^2}{2D} \int_{-D}^{+D} \frac{1}{\omega - \epsilon + i\eta} d\omega = \frac{|V|^2}{2D} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[ \int_{-D}^{+D} \frac{\omega - \epsilon}{(\omega - \epsilon)^2 - \eta^2} d\omega + i \int_{-D}^{+D} \frac{\eta}{(\omega - \epsilon)^2 - \eta^2} d\omega \right] \quad (\text{B.24})$$

$$= \frac{|V|^2}{2D} \left[ \int_{\omega+D}^{\omega-D} \frac{1}{u} du - i\pi \int_{-D}^{+D} \delta(\omega - \epsilon) d\omega \right] \quad (\text{B.25})$$

$$= \frac{|V|^2}{2D} \ln \left| \frac{\omega - D}{\omega + D} \right| - \frac{i\pi V^2}{2D} \theta(D - |\omega|) \quad (\text{B.26})$$

no segundo passo fizemos as mudanças de variáveis  $u \rightarrow \omega - \varepsilon$ . No limite onde  $\omega \ll D$  o primeiro termo se anula restando-nos apenas o termo real responsável pelo alargamento (*broadening*) que definimos por  $\Gamma_L = \frac{\pi V^2}{2D} \theta(D - |\omega|)$ . A seguir mudaremos a variável  $\omega$  para  $\varepsilon$  (ambas tem dimensão de energia já que adotamos  $\hbar = 1$  desde o início) e obtemos,

$$G(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{dot} - i\Gamma_L}. \quad (\text{B.27})$$

De posse da função de Green obtemos a densidade de estados no ponto quântico,

$$\rho_{dot}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} [G(\varepsilon)] \quad (\text{B.28})$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_L}{(\varepsilon - \varepsilon_{dot})^2 + \Gamma_L^2}, \quad (\text{B.29})$$

e o número médio de ocupação,

$$\langle n \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\varepsilon_f} \frac{\Gamma_L}{(\varepsilon - \varepsilon_{dot})^2 + \Gamma_L^2} d\varepsilon \quad (\text{B.30})$$

$$= \frac{1}{\pi \Gamma} \int_{-\infty}^{\varepsilon_f} \frac{d\varepsilon}{\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{dot}}{\Gamma}\right)^2 + 1} \quad (\text{B.31})$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\frac{\varepsilon_f - \varepsilon_{dot}}{\Gamma_L}} \frac{du}{u^2 + 1} \quad (\text{B.32})$$

$$= \frac{1}{\pi} \arctan(u) \Big|_{-\infty}^{\frac{\varepsilon_f - \varepsilon_{dot}}{\Gamma_L}} \quad (\text{B.33})$$

$$= \frac{1}{\pi} \left[ \frac{\pi}{2} - \arctan \left( \frac{\varepsilon_{dot} - \varepsilon_f}{\Gamma_L} \right) \right]. \quad (\text{B.34})$$

Como podemos ver na Fig.49(a) a densidade de estados no ponto se distribui em torno de  $\varepsilon_{dot}$  e apresenta um alargamento proporcional a  $\Gamma_L$  devido ao acoplamento com o contínuo de estados dos contatos. Na Fig.49(b) o número de ocupação médio  $\langle n \rangle$  indica que o ponto quântico é ocupado quando sua energia  $\varepsilon_{dot}$  é inferior a energia de Fermi dos contatos  $\varepsilon_f$ , ocorrendo a desocupação deste nível quando  $\varepsilon_{dot} > \varepsilon_f$ . Quanto maior valor de  $\Gamma_L$ , mais larga a curva em torno de  $\varepsilon_f$ .

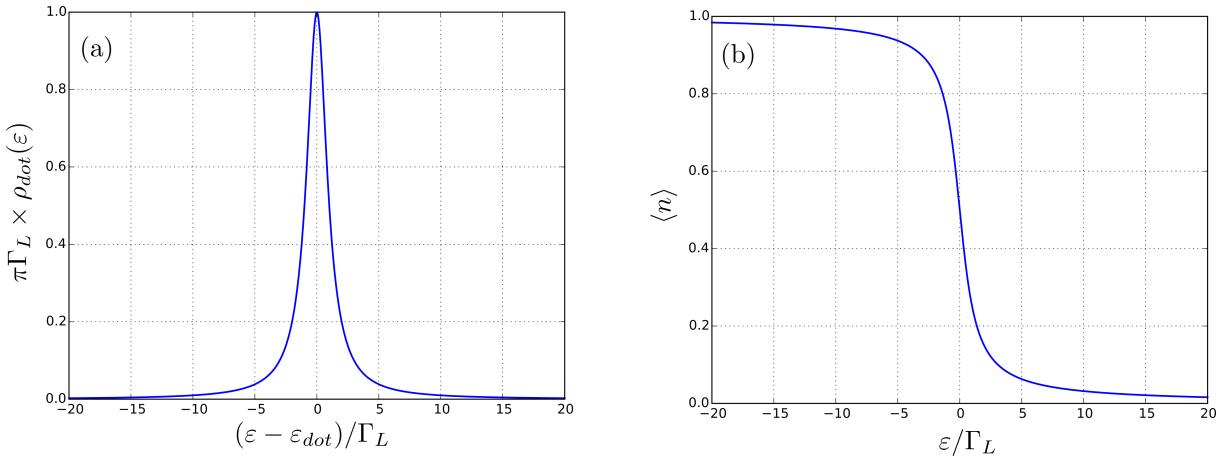


Figura 49 – (a) Densidade de estados no ponto quântico  $\pi\Gamma_L \times \rho_{dot}(\varepsilon)$  em função da energia  $\varepsilon/\Gamma_L$  para  $\varepsilon_{dot} = 0$   
(b) Número de ocupação médio  $\langle n \rangle$  de um ponto quântico em função da sua energia  $\varepsilon_{dot}/\Gamma_L$  para  $\varepsilon_f = 0$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

### B.3 Cadeia *tight-binding* semi-infinita

Os contatos metálicos podem ser modelados como cadeias lineares *tight-binding* semi-infinitas, cujo Hamiltoniano pode ser escrito por

$$H = \sum_{i=1}^{\infty} t c_i^\dagger c_{i+1} + H.C., \quad (\text{B.35})$$

onde consideramos que a energia do sítio é nula ( $\mu = 0$ ) e  $t$  é o termo de *hopping*. É importante salientar que ao fazermos  $\Delta = 0$  e  $\mu = 0$  no Hamiltoniano da cadeia de Kitaev (Eq. 3.17) recaímos na Eq. B.35 acima.

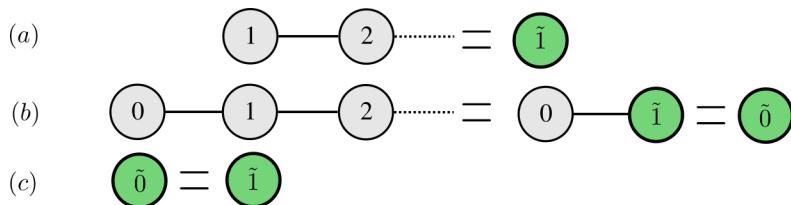


Figura 50 – Diagrama esquemático de um ponto quântico acoplado a um contato metálico.

Fonte: Adaptada de PENTEADO. (36)

Para calcularmos a função de Green da cadeia vamos considerar inicialmente que toda a cadeia semi-infinita possa ser representada por um sítio efetivo, “vestido” com o restante da cadeia, como na Fig. 50 (a). Vamos chamar a função de Green do sítio  $\tilde{1}$  que queremos encontrar de  $\tilde{g}(\omega)$ . Vamos adicionar mais um sítio isolado 0, com função de Green  $g_0(\omega) = 1/\omega$  como mostrado em Fig. 50 (b). Utilizando a equação de movimento, Eq. A.50,

para esse novo sistema composto de dois sítios ( $0$  e  $\tilde{1}$ ), encontramos

$$G_{00}(\omega) = g_0(\omega) + \tilde{g}(\omega)tG_{\tilde{1}0}(\omega), \quad (\text{B.36})$$

e

$$G_{\tilde{1}0}(\omega) = g_0(\omega)tG_{00}(\omega). \quad (\text{B.37})$$

Resolvendo para  $G_{00}(\omega)$  chegamos a

$$G_{00}(\omega) = \frac{g_0(\omega)}{1 - \tilde{g}(\omega)t^2g_0(\omega)}. \quad (\text{B.38})$$

porém, seguindo o argumento de que adicionar um sítio numa cadeia que já era semi-infinita não deve alterá-la, podemos definir  $G_{00}(\omega) = \tilde{g}(\omega)$ . Fig. 50 (c). Com isso chegamos a

$$\tilde{g}(\omega) = \frac{g_0(\omega)}{1 - \tilde{g}(\omega)t^2g_0(\omega)} \quad (\text{B.39})$$

que corresponde à equação,  $-t^2g_0(\omega)\tilde{g}(\omega)^2 + \tilde{g}(\omega) - g_0(\omega) = 0$ , cujas soluções são.

$$\tilde{g}(\omega) = \frac{-1 \pm \sqrt{1 - 4g_0(\omega)^2t^2}}{-2g_0(\omega)t^2}. \quad (\text{B.40})$$

Escolhemos a solução com sinal negativo pois isso garante que  $\tilde{g}(\omega) \rightarrow 1/\omega$  quando  $\omega \gg t$ . Substituindo  $g_0(\omega) = 1/\omega$ , encontramos

$$\tilde{g}(\omega) = \frac{\omega - \sqrt{\omega^2 - 4t^2}}{2t^2}. \quad (\text{B.41})$$

Agora podemos calcular a densidade de estados, que é dada por  $\rho(\omega) = (-1/\pi)Im[\tilde{g}(\omega)]$ , resultando na expressão,

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2\pi t^2} \sqrt{4t^2 - \omega^2} \theta(2t - \omega) \theta(2t + \omega). \quad (\text{B.42})$$

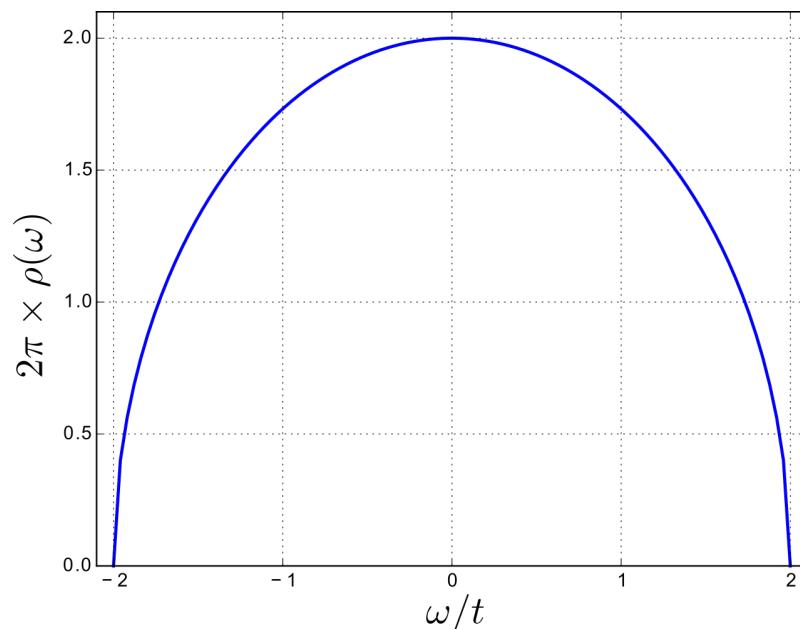


Figura 51 – Densidade de estados para uma cadeia *tight-binding* semi-infinita  $2\pi \times \rho(\omega)$  em função de  $\omega/t$  de obtida pela Eq.B.42..

Fonte: Elaborada pelo autor.

# APÊNDICE C – Invariante topológico

As fases de um supercondutor *p-wave* podem ser caracterizadas por um invariante topológico, um número, que é uma propriedade do sistema que se mantém constante sob mudanças adiabáticas dos parâmetros do Hamiltoniano. Diferentes variantes topológicas podem ser definidos dependendo do sistema. Uma transição de fase ocorre quando esse invariante muda, isto é acompanhado por um fechamento do *gap* no espectro de energia

As fases topológicas trivial e não-trivial da cadeia de Kitaev podem ser caracterizadas por uma quantidade denominada de invariante topológico  $Z_2$ . Nesta seção iremos demonstrar como calcular este valor para a cadeia de Kitaev. Reescrevemos o hamiltoniano da Eq.3.54 por,

$$\mathcal{H}_k = \begin{pmatrix} \xi_k & \tilde{\Delta}_k^* \\ \tilde{\Delta}_k & -\xi_k \end{pmatrix} = \xi_k \sigma_z + \text{Re}[\tilde{\Delta}_k] \sigma_x + \text{Im}[\tilde{\Delta}_k] \sigma_y \quad (\text{C.1})$$

onde  $\sigma$  são as matrizes de Pauli. Vamos definir o vetor  $\mathbf{h}(k) = h_x(k)\hat{x} + h_y(k)\hat{y} + h_z(k)\hat{z}$ , com

$$h_x(k) = \text{Re}[\tilde{\Delta}_k] \quad , \quad h_y(k) = \text{Im}[\tilde{\Delta}_k] \quad e \quad h_z(k) = \xi_k \quad (\text{C.2})$$

de forma que,

$$\mathcal{H}_k = \mathbf{h}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\text{C.3})$$

onde  $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}$ . Como as duas fases possuem um *gap*, assumimos que  $\mathbf{h}(k)$  não se anula na primeira zona de Brillouin. Assim podemos definir o vetor unitário, que mapeia o hamiltoniano para um esfera unitária,

$$\hat{\mathbf{h}}(k) = \frac{\mathbf{h}(k)}{|\mathbf{h}(k)|} \quad (\text{C.4})$$

como  $\tilde{\Delta}_k = i|\Delta|e^{i\phi} \text{sen}(ka)$  é função ímpar e  $\xi_k = -[\mu + 2t \cos(ka)]$  é par em *momentum*, temos que  $h_{x,y}(k) = -h_{x,y}(-k)$  e  $h_z(k) = h_z(-k)$ . Dessa forma concluímos que,  $h_{x,y}(\pi) = 0$  e  $h_{x,y}(0) = 0$ , e o vetor unitário aponta para os pólos da esfera em  $k = 0$  e em  $k = \pi$ , dependendo do sinal de  $h_z(k)$ , que corresponde à energia cinética. Vamos definir,

$$\hat{\mathbf{h}}(0) = s_0 \hat{z} \quad (\text{C.5})$$

e

$$\hat{\mathbf{h}}(\pi) = s_\pi \hat{z} \quad (\text{C.6})$$

de forma que,

$$s_0 = \frac{h_z(0)}{|\hat{h}_z(0)|} = \frac{-2t - \mu}{|-2t - \mu|} = \begin{cases} +1, & \mu > -2t \\ -1, & \mu < -2t \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

e

$$s_\pi = \frac{h_z(\pi)}{|\hat{h}_z(\pi)|} = \frac{2t - \mu}{|2t - \mu|} = \begin{cases} +1, & \mu > 2t \\ -1, & \mu < 2t \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

Assim, quando variamos  $k$  entre 0 e  $\pi$ ,  $\hat{\mathbf{h}}(k)$  começa em um pólo e percorre a superfície da esfera, terminando no mesmo pólo (se  $s_0 = s_\pi$ ) ou no pólo oposto (quando  $s_0 = -s_\pi$ ). Estes dois tipos de trajétorias correspondem a duas fases topológicas distintas, uma vez que só podemos transformar uma na outra mediante o fechamento do *gap*. O invariante  $Z_2$  é definido por,

$$\nu = s_0 s_\pi = \frac{4t^2 - \mu^2}{|2t - \mu|^2} = \begin{cases} -1, & |\mu| < 2t \\ +1, & |\mu| > 2t \end{cases} \quad (\text{C.9})$$

(C.10)

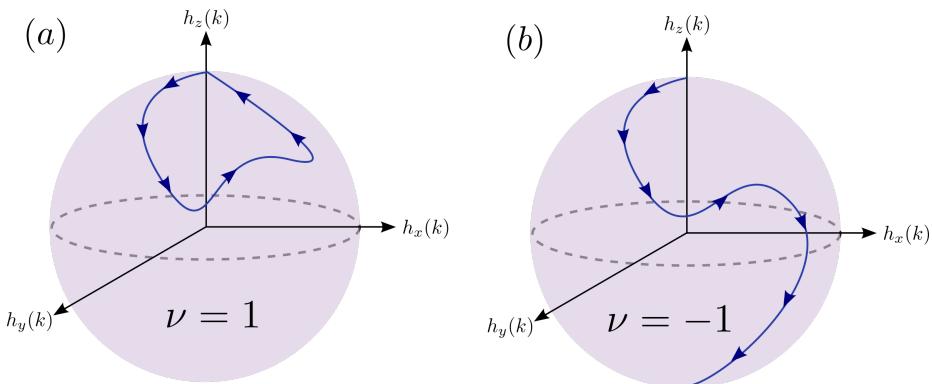


Figura 52 – Trajetória de  $\hat{\mathbf{h}}(k)$  quando  $k$  varia de 0 a  $\pi$  nas fases trivial (a) e topológica (b).

Fonte: Elaborada pelo autor.