

Toy models de supercondutores topológicos

November 9, 2015

1 Introdução

Começamos com uma banda metálica simétrica

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma}, \quad (1)$$

ou escrito como matriz

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^\dagger \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{p}) & 0 \\ 0 & \varepsilon(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \psi_{\mathbf{p}}, \quad (2)$$

com os spinors

$$\psi_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{p}\uparrow} \\ c_{\mathbf{p}\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Podemos utilizar esta notação para escrever alguns tipos de Hamiltonianos. Por exemplo, uma interação entre spins

$$H_V = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{\sigma, \sigma'} \{ V_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma'} + \text{H.c.} \}, \quad (4)$$

vira

$$H_V = \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^\dagger \begin{pmatrix} V_{\uparrow\uparrow} & V_{\uparrow\downarrow} \\ V_{\downarrow\uparrow} & V_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \psi_{\mathbf{p}}. \quad (5)$$

Mas o Hamiltoniano BCS

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \Delta c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.} \right\}, \quad (6)$$

não pode ser escrito dessa maneira (tentem).

2 O formalismo de Bogoliubov–De Gennes

Vamos escrever H_0 como segue:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \{ \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma} + \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma} \} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \{ \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma} - \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p}\sigma} c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (7)$$

Aproveitando a simetria da banda metálica, podemos mudar $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ no segundo termo, e temos

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \left\{ \varepsilon(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}\sigma} - \varepsilon(-\mathbf{p}) c_{-\mathbf{p}\sigma} c_{-\mathbf{p}\sigma}^\dagger \right\} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \varepsilon(\mathbf{p}). \quad (8)$$

Fazemos o mesmo com H_{SC} :

$$H_{SC} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \Delta \left[c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger - c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger \right] + \text{H.c.} \right\}, \quad (9)$$

e definimos o spinor

$$\psi_{\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{p}\uparrow} \\ c_{\mathbf{p}\downarrow} \\ c_{-\mathbf{p}\uparrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Agora podemos escrever (verifiquem)

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{SC} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^\dagger \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{p}) & 0 & 0 & \Delta \\ 0 & \varepsilon(\mathbf{p}) & -\Delta & 0 \\ 0 & -\Delta^* & -\varepsilon(-\mathbf{p}) & 0 \\ \Delta^* & 0 & 0 & -\varepsilon(-\mathbf{p}) \end{pmatrix} \psi_{\mathbf{p}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}} \psi_{\mathbf{p}}^\dagger H_{BdG} \psi_{\mathbf{p}}, \end{aligned} \quad (11)$$

onde ignoramos o termo constante.

H_{BdG} tem simetria elétron-buraco, herdada de H_0 e H_{SC} . Neste formalismo, conhecido como formalismo de Bogoliubov-De Gennes (o spinor ψ é chamado spinor de Nambú), a simetria elétron-buraco é mostrada explicitamente. Por exemplo, o operador de conjugação de carga (troca de elétron e buraco) é simplesmente

$$C = \tau_x \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} 0_{2 \times 2} & \sigma_0 \\ \sigma_0 & 0_{2 \times 2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

onde τ_x é uma matriz de Pauli que age sobre os graus de liberdade de elétron-buraco, e σ_0 é a matriz unidade no espaço de spin. Em poucas palavras, C simplesmente ordena a matriz do Hamiltoniano quando os subespaços azul e vermelho da Eq. (11) são trocados.

2.1 Solução

Mesmo que o Hamiltoniano Eq. (11) é uma matriz de 4×4 , tem um jeito muito simples de resolver. Já que conhecemos a notação $\tau_i \otimes \sigma_j$, vamos utilizá-la para escrever H_{BdG} como (verifiquem)

$$H_{BdG} = \varepsilon(p)\tau_z \otimes \sigma_0 - \text{Re } \Delta \tau_y \otimes \sigma_y - \text{Im } \Delta \tau_x \otimes \sigma_y. \quad (13)$$

Estas matrices se comportam de uma maneira muito similar às matrices de Pauli, por exemplo:

$$[\tau_z \otimes \sigma_0][\tau_y \otimes \sigma_y] = -[\tau_y \otimes \sigma_y][\tau_z \otimes \sigma_0] = -i\tau_x \otimes \sigma_y, \quad (14a)$$

$$[\tau_z \otimes \sigma_0][\tau_x \otimes \sigma_y] = -[\tau_x \otimes \sigma_y][\tau_z \otimes \sigma_0] = -i\tau_y \otimes \sigma_y, \quad (14b)$$

$$[\tau_y \otimes \sigma_y][\tau_x \otimes \sigma_y] = -[\tau_x \otimes \sigma_y][\tau_y \otimes \sigma_y] = -i[\tau_z \otimes \sigma_0], \quad (14c)$$

$$[\tau_z \otimes \sigma_0]^2 = [\tau_y \otimes \sigma_y]^2 = [\tau_x \otimes \sigma_y]^2 = 1_{4 \times 4}. \quad (14d)$$

Como consequência, podemos escrever

$$H_{BdG}^2 = [\varepsilon^2(p) + |\Delta|^2]1_{4 \times 4}, \quad (15)$$

e os autovalores de energia são

$$E_{\pm} = \pm \sqrt{\varepsilon^2(p) + |\Delta|^2}, \quad (16)$$

cada um com dupla degenerescência. Claramente, se $|\Delta| \neq 0$ temos um gap superconductor. Como sabemos que é um gap superconductor, e não um gap comum, como no caso dos semicondutores? Podemos dar uma olhada para os auto-estados de H (verifiquem):

$$c_{-}^{\dagger}(\mathbf{p}) = N_{-} \left[c_{-\mathbf{p}\downarrow} - \frac{\Delta^*}{\varepsilon(p) + \sqrt{\varepsilon^2(p) + |\Delta|^2}} c_{\mathbf{p}\uparrow}^{\dagger} \right], \quad (17a)$$

$$c_{+}^{\dagger}(\mathbf{p}) = N_{-} \left[c_{\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger} - \frac{\Delta}{\varepsilon(p) + \sqrt{\varepsilon^2(p) + |\Delta|^2}} c_{-\mathbf{p}\uparrow}^{\dagger} \right]. \quad (17b)$$

Os campos $c_{+}(\mathbf{p})$ e $c_{-}(\mathbf{p})$ correspondem a combinações de elétrons e buracos. Precisamos dos outros dois estados? Não! Lembrem-se que o Hamiltoniano virou 4×4 por um truque, no qual dobramos os graus de liberdade do problema tratando elétrons e buracos como um pseudo-spin.

3 Supercondutores tipo p em 1D

O acoplamento Δ pode em principio ser dependente do momento, *i.e.* $\Delta(\mathbf{p})$. Quando $\Delta(-\mathbf{p}) = -\Delta(\mathbf{p})$, o superconductor é chamado de “tipo p ”, em analogia com os orbitais p , os quais compartilham esta propriedade. Note-se que $\Delta(0) = 0$. Para entender a diferença que isso faz, respeito dos supercondutores tipo s (Δ

constante), vamos estudar o caso mais simples: um supercondutor em 1D, e **sem o grau de liberdade de spin**. Neste caso temos $\Delta(-p) = -\Delta(p)$.

As funções anti-simétricas mais básicas são

$$\Delta(p) = \Delta_0 p, \quad (18a)$$

$$\Delta(p) = \Delta_0 \sin(ap/\hbar). \quad (18b)$$

Vamos estudar os dois casos.

3.1 $\Delta = \Delta_0 p$

O Hamiltoniano neste caso é

$$H = \sum_p \varepsilon(p) c_p^\dagger c_p + \sum_p \left(\Delta_0 p c_p^\dagger c_{-p}^\dagger + \Delta_0^* p c_{-p} c_p \right). \quad (19)$$

Escrevemos

$$\begin{aligned} H + \text{const.} &= \frac{1}{2} \sum_p \left[\varepsilon(p) c_p^\dagger c_p - \varepsilon(-p) c_{-p} c_{-p}^\dagger + \Delta_0 p c_p^\dagger c_{-p}^\dagger + \Delta_0^* p c_{-p} c_p \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_p \psi_p^\dagger \begin{pmatrix} \varepsilon(p) & \Delta_0 p \\ \Delta_0^* p & -\varepsilon(-p) \end{pmatrix} \psi_p, \end{aligned} \quad (20)$$

onde

$$\psi_p = \begin{pmatrix} c_p \\ c_{-p}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (21)$$

De novo temos (supondo $\varepsilon(p) = \varepsilon(-p)$)

$$H_{BdG} = \varepsilon(p) \tau_z + \text{Re } \Delta_0 p \tau_x - \text{Im } \Delta_0 p \tau_y, \quad (22)$$

e por tanto

$$H_{BdG}^2 = [\varepsilon^2(p) + |\Delta_0|^2 p^2] 1_{2 \times 2}, \quad (23)$$

com os auto-valores de energia

$$E_\pm = \pm \sqrt{\varepsilon^2(p) + |\Delta_0|^2 p^2}. \quad (24)$$

A dispersão de partícula livre $\varepsilon(p)$ perto de $p = 0$ pode ser escrita como $\varepsilon(p) = (1/2m^*)p^2 - \mu$, com m^* uma massa efetiva e μ o potencial químico. Nóte-se que para $\mu = 0$ o gap se fecha em $p = 0$ (Figura 1).

Tem uma diferença importante entre os casos de $\mu < 0$ e $\mu > 0$. No caso de $\mu < 0$ temos um supercondutor com as mesmas propriedades do tipo *s*, exceto com um gap dependente de p . Mas quando $\mu > 0$, o supercondutor é *topológico*. A diferença entre um supercondutor trivial e um topológico é sutil, mas para obter um pouco de intuição podemos dar uma olhada para os estados do supercondutor topológico na representação espacial. Para isso é mais conveniente trabalhar com $\Delta(p) = \Delta_0 \sin(ap/\hbar)$.

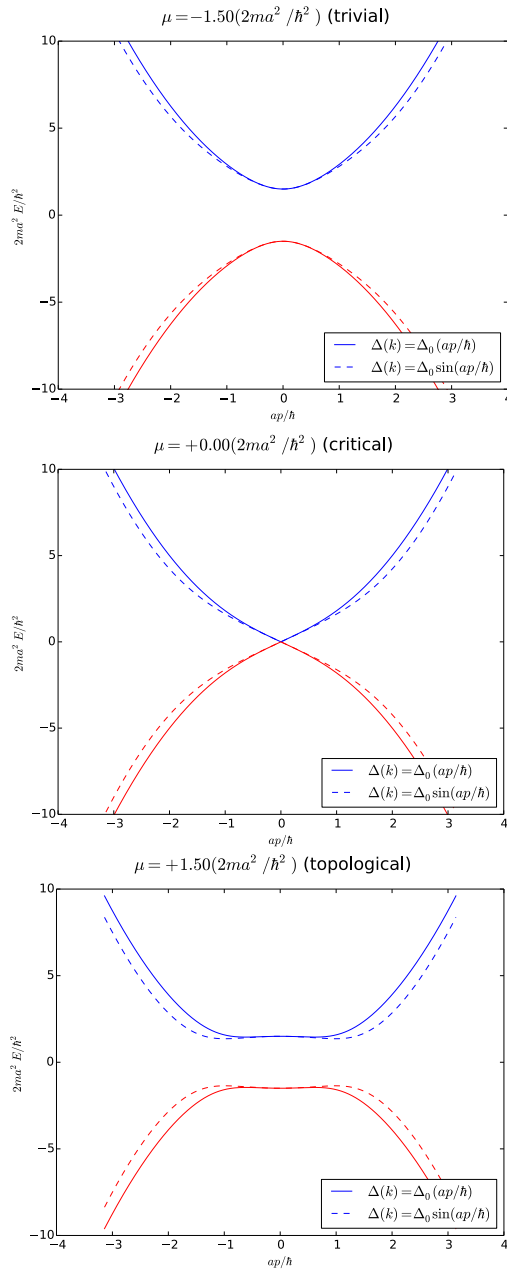


Figure 1: Estrutura de bandas com $\Delta(p) = \Delta_0 p$ (linhas contínuas) e $\Delta(p) = \Delta_0 \sin(p)$ (linha pontilhada), para $\mu < 0$, $\mu = 0$ e $\mu > 0$. Em ambos casos $\Delta_0 = 1.5 (2ma^2/\hbar^2)^{-1}$, e a é alguma escala de largura relevante no sistema (e.g., a constante de rede).

3.2 $\Delta(p) = \Delta_0 \sin(ap/\hbar)$

Em vez de utilizar uma dispersão de partícula livre para $\varepsilon(p)$, vamos pensar num material 1D (um nanowire) que é bem descrito pelo modelo de tight binding semi-infinito. Nesse caso temos

$$\varepsilon(p) = t \cos(ak) - \mu, \quad (25)$$

onde t é o acoplamento entre vizinhos, a é a constante de rede, e k é o número de onda correspondente ao crystal momentum $p = \hbar k$. A dispersão neste caso é

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{(\cos ak - \mu)^2 + |\Delta_0|^2 \sin^2(ak)}. \quad (26)$$

Quando fecha esse gap? Precisamos resolver a equação

$$t^2 \cos^2(ak) + |\Delta_0|^2 \sin^2(ak) = \mu(2t \cos(ak) - \mu). \quad (27)$$

Neste caso $\mu = 0$ não é mais uma solução (para $t, \Delta \neq 0$), porque o lado esquerdo da equação é **sempre** positivo. Vamos exigir que o gap seja independente de Δ_0 , o qual é razoável se temos *e.g.* $\Delta_0 > t, \mu$. Nesse caso precisamos $\sin^2(ak) = 0 \leftrightarrow ak = n\pi$ ($n = 0, \pm 1$), e temos

$$\mu^2 - 2t\mu + t^2 = 0 \text{ for } n = 0 \quad \leftrightarrow \quad (\mu - t) = 0, \quad (28a)$$

$$\mu^2 + 2t\mu + t^2 = 0 \text{ for } n = \pm 1 \quad \leftrightarrow \quad (\mu + t) = 0. \quad (28b)$$

Em outras palavras, o gap fecha quando $\mu = -t$, depois abre de novo, fecha de novo para $\mu = t$, e abre de novo. As três fases deste supercondutor são apresentadas na Fig. 2. Neste caso, a fase topológica é $|\mu| < t$, e temos uma fase trivial quando $|\mu| > t$.

Para apreciar a diferença entre as fases supercondutoras trivial e topológica, vamos introduzir os campos na representação de posições

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i(ja)\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}, \quad (29)$$

onde $x = ja$ são as posições numa cadeia de tight binding de constante de rede a . Substituindo no Hamiltoniano obtemos o seguinte modelo (verifiquem)

$$H_{\kappa} = \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ \frac{t}{2} (c_j^{\dagger} c_{j+1} + c_{j+1}^{\dagger} c_j) - \mu c_j^{\dagger} c_j + \frac{\Delta_0^*}{2} c_j^{\dagger} c_{j+1}^{\dagger} + \frac{\Delta_0}{2} c_{j+1} c_j \right\}, \quad (30)$$

que é conhecido como o modelo de Kitaev. Para obter os estados deste modelo escrevemos $\Delta_0 = |\Delta_0| e^{i\phi}$, e definimos os operadores de Majorana

$$\gamma_j^1 = e^{-i\phi/2} c_j + e^{i\phi/2} c_j^{\dagger}, \quad (31a)$$

$$i\gamma_j^2 = e^{-i\phi/2} c_j - e^{i\phi/2} c_j^{\dagger}, \quad (31b)$$

ou equivalentemente

$$c_j = e^{-i\phi/2} \frac{\gamma_j^1 + i\gamma_j^2}{2}, \quad (32a)$$

$$c_j^\dagger = e^{i\phi/2} \frac{\gamma_j^1 - i\gamma_j^2}{2}. \quad (32b)$$

Substituindo na Eq. (30) obtemos (verifiquem)

$$H_\kappa = \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ \frac{i(t-\Delta)}{4} \gamma_j^1 \gamma_{j+1}^2 - \frac{i(t+\Delta)}{4} \gamma_j^2 \gamma_{j+1}^1 - \frac{\mu}{2} (1 - i\gamma_j^1 \gamma_j^2) \right\}. \quad (33)$$

Para encontrar exatamente as fases de H_κ precisamos fazer um pouco de mecânica estatística, mas por agora queremos apenas entender o comportamento do estado base do sistema nos casos mencionados acima: $|\mu| > t$ ou $|\mu| < t$, para Δ arbitrário. Para facilitar a nossa vida, fazemos $\Delta = t$, e obtemos

$$H_\kappa(\Delta = t) = - \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ \frac{it}{2} \gamma_j^2 \gamma_{j+1}^1 + \frac{\mu}{2} (1 - i\gamma_j^1 \gamma_j^2) \right\}. \quad (34)$$

No caso limite $|\mu| \gg t$ (fase trivial), o primeiro termo na Eq. (34) pode ser ignorado, e obtemos

$$H_\kappa(\Delta = t, |\mu| \gg t) \approx - \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ \frac{\mu}{2} (1 - i\gamma_j^1 \gamma_j^2) \right\}, \quad (35)$$

que é diagonalizado pelos operadores

$$a_j = \gamma_j^1 + i\gamma_j^2, \quad (36a)$$

$$a_j = \gamma_j^1 - i\gamma_j^2, \quad (36b)$$

e obtemos

$$H_\kappa(\Delta = t, |\mu| \gg t) \approx -\mu \sum_{j=0}^{\infty} c_j^\dagger c_j. \quad (37)$$

Este caso não tem nada de especial: temos uma cadeia de férmions, onde cada site da cadeia tem energia $-\mu$. Em contraparte, no caso de $|\mu| \ll t$ (fase topológica), é o primeiro termo que domina. Podemos ignorar o segundo, e obtemos

$$H_\kappa(\Delta = t, |\mu| \ll t) \approx -\frac{it}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \gamma_j^2 \gamma_{j+1}^1. \quad (38)$$

Este caso é diagonalizado pelos operadores

$$a_j = \frac{\gamma_{j+1}^1 + i\gamma_j^2}{2}, \quad (39a)$$

$$a_j^\dagger = \frac{\gamma_{j+1}^1 - i\gamma_j^2}{2}, \quad (39b)$$

e obtemos

$$H_\kappa(\Delta = t, |\mu| \ll t) = -t \sum_{j=0}^{\infty} \left(a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \right). \quad (40)$$

Os operadores neste caso são bastante peculiares: eles acoplam um Majorana de tipo 2 do site j com um outro de tipo 1 do site $j + 1$, produzindo campos a_j levemente *não locais*, dado que consistem em elétrons divididos entre dos sites. Mais interessante ainda é o fato que os operadores γ_1^1 e γ_N^2 (ao começo e final da cadeia) ficam livres. De fato, se considerarmos condições de fronteira periódicas, os campos de Majorana γ_1^1 e γ_N^2 formam um férmion redaltamente *não local*

$$a_j = \frac{\gamma_1^1 + i\gamma_N^2}{2}, \quad (41)$$

que apresenta entrelazamento entre ambos lados da cadeia. Ademais, a_0 não aparece no Hamiltoniano Eq. (40), *i.e.*, o estado não local é um modos de energia zero, independentemente dos parâmetros específicos do modelo (sempre que a condição $|\mu| < t$ seja cumprida).

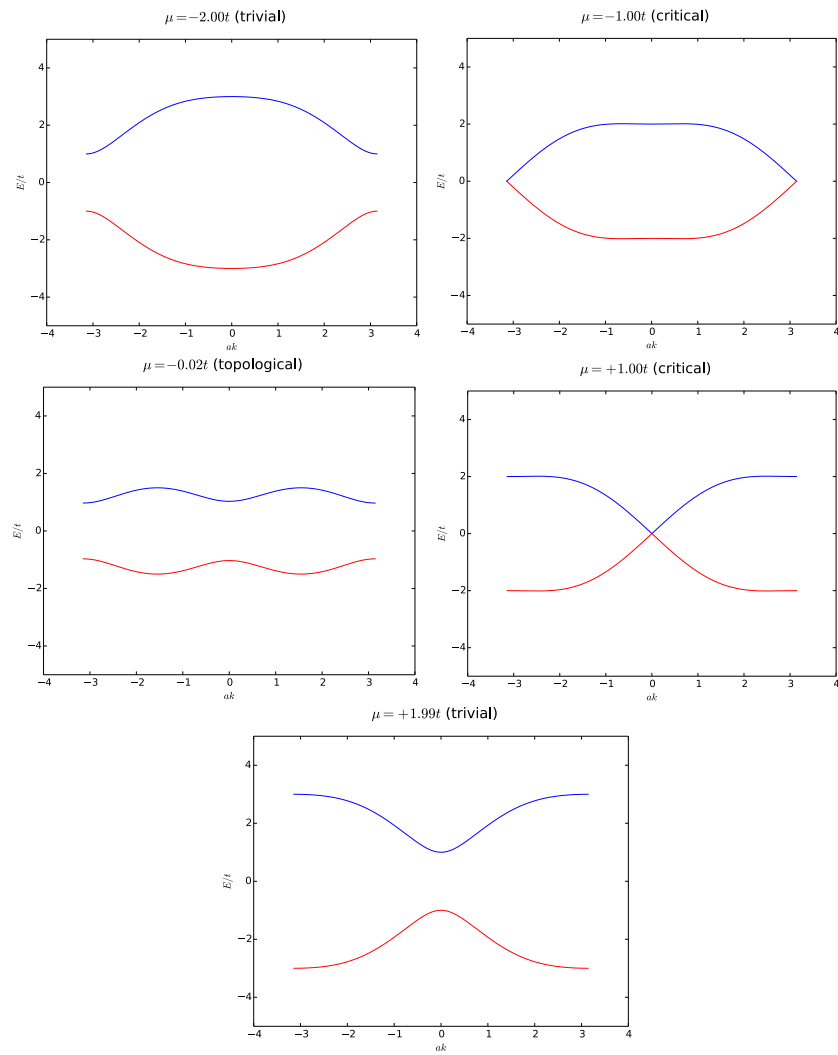


Figure 2: Fases do modelo de Kitaev. $\Delta_0 = 1.5t$.