

Tharnier Puel de Oliveira

**UM MODELO DE MECÂNICA ESTATÍSTICA PARA O
ESTUDO DE MIGRAÇÃO COM TRÊS SETORES:
RURAL, URBANO FORMAL E URBANO INFORMAL
E TRANSIÇÕES DE FASE TOPOLÓGICAS EM
SUPERCONDUTORES: TÉCNICAS DA INFORMAÇÃO
QUÂNTICA**

Tese submetida ao Programa de Pós-
Graduação em Física para a obtenção
do Grau de Doutor.

Nilton da Silva Branco

Universidade Federal de Santa Cata-
rina: Prof. Dr.

Pedro Domingos Santos do Sacramento
Instituto Superior Técnico - Universi-
dade de Lisboa: Prof. Dr.

Florianópolis

2014

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Oliveira, Tharnier

Um modelo de Mecânica Estatística para o estudo de migração com três setores: rural, urbano formal e urbano informal e Transições de fase topológicas em supercondutores: técnicas da informação quântica / Tharnier Oliveira ; orientador, Nilton Branco ; coorientador, Pedro Sacramento. - Florianópolis, SC, 2014.
210 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas.
Programa de Pós-Graduação em Física.

Inclui referências

1. Física. 2. urbanização. 3. modelo de três setores. 4. materiais topológicos. 5. informação quântica. I. Branco, Nilton. II. Sacramento, Pedro. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Física. IV. Título.

Agradecimentos

Durante esses quatro anos que se passaram, até o fim do meu doutoramento, pude contar com diversos apoios, de diversas formas, os quais facilitaram (e muito) minha chegada até aqui.

É claro que o suporte financeiro contínuo das agências de fomento – Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) e Fundação de Amparo à Pesquisa e Inovação do Estado de Santa Catarina (FAPESC) – seja em forma de bolsa, seja em forma de projeto, seja como participação em evento, todas elas foram cruciais para essa escolha de seguir no caminho da pesquisa científica. Assim como essas, outras agências também se fizeram presentes, permitindo minha participação em eventos fora do estado e até mesmo fora do país.

Quero muito agradecer minha família, a qual sempre me deu apoio de todas as maneiras possíveis: incentivo nos momentos de desânimo, companheirismo nos momentos de alegria, também contei com suporte financeiro nos momentos de dificuldade e principalmente por demonstrar satisfação ao ver meu progresso na carreira profissional. Ao mencionar família eu incluo mãe, pai, irmãs, padrasto, madrastra, cunhados e irmãos emprestados.

Dedico um parágrafo para minha namorada, quem tem estado mais tempo comigo efetivamente, nos últimos anos, e tem aguentado firme nos períodos de altos e baixos. É incrível como ela percebe a importância da profissão de pesquisador (Físico) e valoriza tanto o meu trabalho. Com certeza seu incentivo e a confiança depositada em mim fez com que eu me interessasse ainda mais pela profissão.

Não menos importantes, estão todos os outros que tanto me questionam sobre os afazeres de um Físico (o que é bom, pois torna cada vez mais claro o meu entendimento sobre o pesquisador). Ainda bem que tenho uma família bastante unida e todos estiveram bastante presentes durante esses anos.

Não posso deixar de agradecer também ao Antônio, que esteve presente durante todo o período em que estive em Portugal e que, dentre tantas outras coisas, concedeu-me um teto logo que me mudei. Durante esse mesmo período, também fui muito bem recebido pelo professor Pedro em sua universidade e também durante um belo almoço em sua casa. Graças a eles e outros que lá estavam, fiquei com ótima impressão e tenho boas recordações desse país.

Aproveitando a área acadêmica, sou bastante grato ao professor Nilton, que por longos anos tem me aturado, orientado, tem sido paciente, tem ensinado e tem servido como um exemplo profissional.

Encerro agradecendo aos colegas de trabalho pelas conversas sobre física, mas na sua maioria sobre assuntos aleatórios. Também agradeço a eles pelo apoio e incentivo, é imprescindível ter colegas que estão no mesmo ramo que você, nos quais você possa se espelhar, aconselhar ou trocar experiência.

Obrigado a todos.

Resumo

Neste trabalho estudamos a dinâmica de migração entre diferentes setores econômicos nos países em processo de urbanização. Para além do modelo convencional de dois setores, rural e urbano, subdividimos o setor urbano em dois outros setores, formal e informal. O processo de migração é incentivado por diferenças econômicas entre os setores e por influências sociais. Além desses, foram incluídos também incentivos pessoais, não observáveis, que tornam o processo migratório aleatório. Esse modelo foi pouco estudado devido a sua complexidade analítica. Em nosso estudo, o modelo é baseado em agentes e o processo de migração acaba descrito como um modelo de spin com campos variáveis, o qual é estudado através de simulação numérica. Veremos que o predomínio da população urbana aparece em todos os casos analisados e também que o surgimento de uma população no setor informal é uma propriedade emergente de nosso modelo.

Isolantes e supercondutores topológicos apresentam várias fases topológicas caracterizadas por diferentes números de Chern ou por estados de borda sem *gap*. Neste trabalho mostramos que vários métodos da informação quântica, tais como a entropia de von Neumann, o espectro do emaranhamento, a fidelidade e o espectro da fidelidade, podem ser usados para detectar e distinguir as fases topológicas e suas transições. Como exemplo, consideramos um supercondutor de onda- p bidimensional, com acoplamento spin-órbita e um termo de Zeeman. A natureza das fases e suas mudanças são compreendidas pelos autovetores da matriz densidade reduzida no espaço dos k . Mostramos que nas fases topologicamente não-triviais o autovetor de maior autovalor está completamente alinhado com o estado de emparelhamento tripleto. Uma assinatura das várias transições de fase entre dois pontos quaisquer no espaço dos parâmetros aparece no operador fidelidade no espaço dos k . Também mostramos que a entropia do emaranhamento e suas derivadas sinalizam as transições de fase topológicas. Também encontramos evidências numéricas de que, para este modelo, a derivada da entropia em relação à magnetização fornece informações acerca da fase topológica. Conforme a lei das áreas para a entropia do emaranhamento, analisamos sistematicamente as contribuições que são proporcionais ao, ou independente do, perímetro do sistema, como função das constantes de acoplamento do hamiltoniano e da geometria do subsistema finito. Para este modelo, mostramos que embora a entropia do emaranhamento topológica seja nula, ela sinaliza as transições de fase topológicas em um sistema finito. Também observamos uma relação entre a contribuição topológica à entropia, em uma geometria cilíndrica, e o número de estados de borda. Também observamos que o espectro do emaranhamento apresenta modos

robustos, associados com cada estado de borda, como em outros sistemas topológicos.

Palavras-chaves: urbanização. modelo de três setores. materiais topológicos. informação quântica.

Abstract

In this work we study the migration process between different economic sectors of countries with developing economies. Beyond the two-sector conventional model, rural and urban, we split the urban sector into formal and informal sectors. We consider two observed incentives to the migration process: economic ones and the influence from the agent's social neighborhood. We have also considered non-observable decisions, which brings a random component to the description of agents' decision. This kind of model, with three sectors, has not been intensively studied, mainly due to its analytical complexity. The model is agent based and the migration process is described as a spin model with non-constant external fields, which is studied through a numerical simulation. We observe that, the migratory dynamics steers the economy to an equilibrium with urban concentration and the presence of an urban informal sector, although this sector was not present at the initial configuration.

Topological insulators and topological superconductors display various topological phases that are characterized by different Chern numbers or by gapless edge states. In this work we show that various quantum information methods such as the von Neumann entropy, entanglement spectrum, fidelity and fidelity spectrum, may be used to detect and distinguish topological phases and their transitions. As an example we consider a two-dimensional p -wave superconductor, with Rashba spin-orbit coupling and a Zeeman term. The nature of the phases and their changes are clarified by the eigenvectors of the k -space reduced density matrix. We show that in the topologically non-trivial phases the highest weight eigenvector is fully aligned with the triplet pairing state. A signature of the various phase transitions between two points on the parameter space is encoded in the k -space fidelity operator. We also show that the entanglement entropy and its derivatives clearly signal the topological transitions and we find numerical evidence that, for this model, the derivative with respect to the magnetization provides a sensible signature of each topological phase. Following the area law for the entanglement entropy, we systematically analyze the contributions that are proportional to or independent of the perimeter of the system, as a function of the Hamiltonian coupling constants and the geometry of the finite subsystem. For this model, we show that even though the topological entanglement entropy vanishes, it signals the topological phase transitions in a finite system. We also observe a relationship between a topological contribution to the entanglement entropy in a half-cylinder geometry and the number of edge states, and that the entanglement spectrum has robust modes associated with each edge state, as in other topological systems.

Key-words: urbanization. three sectors model. topological materials. quantum information.

Prefácio

Na área de pesquisa científica, nem sempre a sua proposta de trabalho inicial é exercida à risca durante o cumprimento de um projeto, de um doutorado, ou de qualquer meta estabelecida. Isso não acontece por desleixo ou por descuido, mas porque a pesquisa é uma tarefa dinâmica, feita por muitos e que permite fazer desvios de seu caminho conforme lhe for mais conveniente. Esse foi mais ou menos o caso deste trabalho.

Assim que terminei meu mestrado, já havia passado no concurso e ganhado uma bolsa de doutorado, ali mesmo, na UFSC, decidi então continuar a trabalhar com o professor Nilton, na área de Mecânica Estatística. Uma de suas pesquisas nessa altura era em parceria com o professor Jaylson – da área de economia, também na UFSC. Eles tinham recém-começado um estudo em modelo de migração populacional, um processo de urbanização. Nesse modelo inclui-se três setores, juntamente com um fator aleatório, devido a escolhas pessoais, o que era novo na área. Eles me convidaram para iniciar o doutorado nessa linha de pesquisa e eu aceitei. Principalmente no início, foi bastante empolgante. A parte de economia já estava bastante avançada, que de acordo com as condições econômicas estabelecidas resultava em um hamiltoniano bastante conhecido para nós, Físicos. Além disso, o modelo exigia que fizéssemos simulação de Monte Carlo, algo que eu já havia feito durante minha iniciação científica e tinha bastante experiência, e interesse.

Pois bem, nos dois primeiros anos de doutorado dediquei-me a fazer as cadeiras obrigatórias e optativas, incluindo seminários e estágios de docência. Conseguimos, eu e o professor Nilton, concluir e publicar o trabalho realizado no mestrado. Pude também terminar minha graduação em Física licenciatura, mas isso é outra história. Ainda nesses dois anos, avancei bastante na pesquisa sobre migração, sempre correndo atrás de compreender não somente a parte física, mas também um pouco sobre o que se passava com a parte econômica da teoria. Avançamos o suficiente para eu poder concluir com sucesso minha qualificação ao final dos dois primeiros anos.

Mudando um pouco de assunto, uma vez participei de um congresso, em um desses encontros de Física da Matéria Condensada, e em uma sessão de pôsteres os modelos de estado sólido chamaram-me muito a atenção. Desde então fiquei interessado e passei a procurar novas parcerias até que cheguei ao professor Pedro, de Portugal. Nosso contato vinha desde antes do início do meu doutorado, mas foi somente ao final de um ano e meio, mais ou menos, que eu tive a oportunidade concreta de estudar sob sua orientação no Instituto Superior Técnico, em Lisboa.

Bom, eu não podia deixar de ir, então, após a qualificação, fui para Lisboa e mudei completamente o foco da minha tese. Além do mais, nessa época, quando estávamos prontos para escrever o artigo sobre nossos resultados de migração, deparamo-nos com a publicação de um artigo muito parecido e que não se afastava do que havíamos feito até então. Mesmo assim, ainda tentamos reformular um pouco nosso artigo e submeter para publicação, mas claro que essa tarefa não seria tão fácil. As coisas complicaram ainda mais quando o professor Jaylson saiu para fazer seu pós doutorado, o que dificultou as correções da teoria econômica sugeridas pelos referees.

Nesse tempo, fui me interessando cada vez mais pelas teorias de estado sólido que estava a aprender durante meu doutorado sanduíche, até que dediquei meu tempo exclusivamente para esse novo tema. Confesso que cheguei em Portugal bastante despreparado, sem saber direito onde estava me metendo. Mas, por sorte, identifiquei-me bastante com o assunto. Também devo dizer que durante o período em que estive lá aprendi muitas coisas, tirei muitos resultados, na sua maioria numéricos, analisei muitos gráficos junto com o professor Pedro, mas é verdade que não conseguia ainda definir direito o assunto geral o qual estudava. Foi somente depois da minha volta ao Brasil, depois de muito ler e estudar o que havia feito, é que pude melhorar a compreensão sobre os materiais topológicos que estava a estudar. Em particular, estudamos supercondutores não convencionais, de emparelhamento tripleto, que apresentam fases topológicas.

Enfim, ao longo desta tese descrevo com cuidado os dois estudos que realizei durante meu doutorado, dispostos na ordem cronológica com que foram desenvolvidos.

Sumário

I Um modelo de Mecânica Estatística para o estudo de migração com três setores: rural, urbano formal e urbano informal	17
1 Introdução	19
2 Equilíbrio econômico geral com três setores	21
2.1 Tomada de decisões dos agentes	23
2.1.1 Decisões de produção	23
2.1.2 Decisões de consumo	27
2.2 Equilíbrio de mercado	31
2.2.1 Mercado de bens	31
2.2.2 Mercado de trabalho	35
3 Migração intersetorial: um modelo de mecânica estatística	39
3.1 Utilidades determinísticas	40
3.1.1 Utilidade privada	40
3.1.2 Utilidade social	41
3.2 Utilidade não observável (aleatória)	43
3.3 Dinâmica de migração	46
4 Resultados	51
5 Conclusões	61
II Transições de fase topológicas em supercondutores: técnicas da informação quântica	63
6 Introdução	65
7 Efeito Hall e o número de Chern	75

7.1	Efeito Hall clássico	75
7.2	Efeito Hall quântico	77
7.2.1	Elétron livre sob campo magnético	79
7.2.2	Condição de quantização	82
7.3	Sistema quântico	84
7.3.1	Equação de Schrödinger dependente do tempo	84
7.3.2	Hamiltoniano variável no tempo e a aproximação adi- abática	87
7.4	Fase de Berry	93
7.5	Número de Chern	100
8	Método de Bogoliubov-de Gennes	103
8.1	Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes	103
8.1.1	Supercondutor onda- p e onda- s	104
8.1.2	Supercondutividade do tipo $p_x + ip_y$	105
8.1.3	Simetrias	106
8.2	Equações de Bogoliubov-de Gennes	111
8.2.1	Exemplo 1: hamiltoniano quadrático no espaço dos momentos	113
8.2.2	Exemplo 2: supercondutor no espaço dos momentos	115
9	Técnicas da informação quântica	119
9.1	Técnicas da informação quântica	119
9.1.1	Matriz densidade reduzida e correlação	120
9.1.2	Emaranhamento	122
9.1.3	Entropia do emaranhamento	123
9.1.4	Subregião de um sistema infinito	126
9.1.5	Subregião de um sistema cilíndrico finito	126
9.1.6	Fidelidade	127
9.1.7	Entropia do emaranhamento topológico	129
10	Supercondutores topológicos não centrosimétricos	133
10.1	Resultados publicados: Modos de emaranhamento em um sis- tema infinito	142

10.1.1	Entropia de von Neumann	142
10.1.2	Espectro do emaranhamento e autovetores	144
10.1.3	Matriz densidade reduzida no espaço dos momentos	150
10.1.4	Fidelidade e espectro da fidelidade	153
10.2	Resultados no arXiv: Entropia do emaranhamento em um sistema finito	158
10.2.1	Entropia do emaranhamento, derivadas e números de Chern	158
10.2.1.1	Entropia - contribuição extensiva	160
10.2.1.2	Entropia - contribuição não-extensiva	162
10.2.2	Entropia do emaranhamento topológica	163
10.2.3	Entropia do emaranhamento em geometria cilíndrica	164
11	Conclusões	169
	Referências Bibliográficas	171
	Apêndices	193
	APÊNDICE A Probabilidade de escolha de setor	195
	APÊNDICE B Mapeamento no modelo de Ising	197
	APÊNDICE C Exemplo 2: supercondutor no espaço dos momentos (detalhado)	201
	APÊNDICE D Autovetor correspondente ao maior autovalor da matriz densidade	205

Lista de abreviaturas e siglas

A-B	Aharonov-Bohm
BCS	Bardeen-Cooper-Schrieffer
BdG	Bogoliubov-de Gennes
BEG	Blume-Emery-Griffiths
BZ	zona de Brillouin
NCS	não centrosimétrico
PHS	simetria partícula-buraco
QHE	efeito Hall quântico
SC	supercondutor
SLS	simetria de subrede
SO	spin-órbita
TEE	entropia do emaranhamento topológica
TKNN	Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs
TRS	simetria de reversão temporal
TSC	supercondutor topológico

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma} &= (\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z) \\ &= \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Parte I

Um modelo de Mecânica Estatística
para o estudo de migração com três
setores: rural, urbano formal e urbano
informal

Introdução

O mercado de trabalho é uma questão central para a economia de um país em desenvolvimento, pois a maioria das pessoas, especialmente as mais pobres, derivam a maioria, senão todo, o seu sustento de seus trabalhos [1]. Em países como esse, o mercado de trabalho mostra um tipo de segmentação, ou fragmentação, em setores. Existe segmentação em um mercado de trabalho quando trabalhadores, com as mesmas características observáveis, recebem diferentes fatores de produção baseados no segmento no qual eles trabalham [2]. O mercado de trabalho pode ser segmentado de acordo com a localização geográfica (área rural e urbana), tipo de bem produzido (agrícola e manufaturado), presença de regulamento (formal e informal), composição de força de trabalho (qualificado e não qualificado), etc.

Usualmente, modelos de dois setores, ditos “mercado de trabalho dualista” [1], são usados para estudar mercados de trabalho segmentados de países em desenvolvimento. Modelos com três ou mais setores são raros, principalmente por causa da sua complexidade analítica. Neste estudo, estudamos para três setores o modelo computacional de dois setores (rural e urbano) proposto na referência 3. Sendo assim, estudamos o mercado de trabalho urbano dividido em dois setores: formal e informal. Aqui, contrariamente aos resultados da referência 4, na qual o setor urbano informal é considerado como reserva econômica, supomos o setor urbano informal ser um setor desejável, tal que os trabalhadores possam escolhê-lo ao invés do setor urbano formal, de acordo com recentes evidências [5].

Uma possível maneira de estudar a dinâmica da força de trabalho neste contexto é através de um modelo computacional discreto (ou baseado em

agentes). Em tal modelo agentes econômicos são colocados em vértices de uma dada rede e podem estar em um de vários estados (neste caso, três) em um dado instante. Ao longo da evolução do sistema esses agentes decidem mudar de setor, ou não. Passado um período de tempo, cada agente busca a melhor localização setorial influenciado por incentivos econômicos, por sua rede social e por fatores idiossincráticos. Uma vez que estes últimos fatores são considerados aleatórios, acabamos em um modelo estocástico de mecânica estatística, explicado adiante.

Escolhemos dividir esse texto em três capítulos. Primeiro, estabelecemos o sistema econômico, i.e., a estrutura de equilíbrio geral que determina o macro-estado do sistema econômico para uma dada distribuição de trabalhadores. Em seguida, a migração intersetorial é modelada dentro de uma visão de mecânica estatística. Por fim, apresentamos os principais resultados.

Equilíbrio econômico geral com três setores

Iniciamos nosso estudo partindo de um sistema econômico formado por três setores: setor rural, setor urbano formal ou apenas setor formal e setor urbano informal ou setor informal. O primeiro obviamente está localizado na área rural; já os dois outros setores estão localizados na área urbana. As principais diferenças entre os setores são: os bens que eles produzem, a tecnologia usada pelas firmas e a determinação de salários. Essa estrutura econômica encontra-se presente na literatura [4] e sucede o modelo econômico de dois setores já bastante explorado [3, 6, 7, 8, 9, 10].

A área rural é composta por dois tipos de agentes: os fazendeiros, que são proprietários de terras, e os trabalhadores rurais. Fazendeiros supervisionam as atividades produtivas agrícolas e contratam somente trabalhadores localizados na área rural. Da mesma forma, trabalhadores localizados na área rural não podem ser empregados na área urbana, a menos que mudem-se para lá. Chamamos de bens agrícolas os produtos vindos das fazendas como trigo, algodão, batata, etc. Por suposição, não há estoque de bens rurais, não há diferença de preços nas vendas de bens e também não há desemprego no setor rural, de modo que os mercados de bens agrícolas e de trabalho são considerados perfeitamente competitivos.

A área urbana é composta por quatro tipos de agentes: no setor formal estão localizados os proprietários das firmas manufatureiras e os trabalhadores do setor formal ou trabalhadores formais, e no setor informal estão os proprietários das pequenas firmas e os trabalhadores informais. Todas as firmas contratam apenas trabalhadores por tempo integral, ou seja, os trabalhadores não adquirem dois empregos ou empregos fora da área na qual

estão localizados. Entretanto, vamos permitir que apenas no setor formal possa haver desemprego, de modo que esses desempregados ocupam todo o tempo em busca de um novo emprego no setor formal, sem gastos ou acúmulo de capital. Chamamos de bens manufaturados os produtos originados das firmas manufatureiras tais como calçados, tecidos, eletrônicos, etc. Por outro lado, as pequenas firmas do setor informal contratam serviços informais, por exemplo, vendedores ambulantes, feirantes, etc.

Supomos que as firmas do setor formal têm poder de mercado no mercado de trabalho mas não o têm no mercado de bens, i.e., os salários pagos aos trabalhadores formais são decididos pelos proprietários de firmas, enquanto que o preço final dos produtos é dado pela economia. Por sua vez, os mercados de bens e de trabalho dos setores informal e rural não terão quaisquer poder de mercado, ficando por conta da economia estipular os salários dos trabalhadores e os preços dos produtos. Suporemos também que as quantidades de capital e terra são constantes e exogenamente determinadas, portanto, nossa análise do processo de migração rural-urbana dar-se-á desconsiderando o processo de acumulação de capital por qualquer agente e supondo dadas as dotações de terras, caracterizadas pelo país em desenvolvimento o qual queremos analisar.

Nas seções seguintes desenvolveremos um modelo matemático que descreve o sistema econômico de um país em desenvolvimento. Primeiro, descreveremos a participação dos agentes (produtores e consumidores) na economia. Produtores podem tomar decisões como o número de trabalhadores a serem empregados e os salários que esses receberão. Consumidores tomam decisões acerca da quantidade de bens consumida de cada setor. Segundo, descreveremos as condições de equilíbrio nos mercados de bens e de trabalho. O equilíbrio no mercado de bens ocorre quando a demanda de produtos iguala-se à oferta; define-se então a produção agregada de cada setor e os preços dos produtos. Já no mercado de trabalho, no qual cada trabalhador oferta uma unidade de trabalho em determinado período de tempo, obtemos o salário pago pelas firmas de cada setor. Sendo assim, dizemos que o macro-estado econômico de um país é descrito pelas produções agregadas, pelos preços dos produtos e pelos salários pagos pelas firmas.

2.1 Tomada de decisões dos agentes

2.1.1 Decisões de produção

Setor urbano formal

De maneira geral, o setor urbano formal abriga Z_m firmas idênticas especializadas na produção de um único bem manufaturado, dessa forma as firmas seguem a mesma tecnologia de produção, de modo que o custo para confecção de uma unidade de produto manufaturado é o mesmo em todas as firmas. Cada firma manufatureira, representada por j , tem uma produção de bens Y_m^j sujeita à função produção de Cobb-Douglas¹ [11, 12], que relaciona os fatores de produção (chamados de *entradas*) e a produção em si (chamada de *saída*). Sendo assim, são consideradas duas entradas para bens manufaturados: o número de trabalhadores empregados pela j -ésima firma (N_m^j) e o fator de esforço dos trabalhadores, ε_j , que será maior quanto maior for o salário pago pela j -ésima firma em relação às outras. Além disso, baseados na teoria clássica de migração rural-urbana [9, 13], supomos que o estoque de capital durante o período de análise seja constante. Assim:

$$Y_m^j = A_m(\varepsilon_j N_m^j)^\alpha, \quad \text{com } j = 1, 2, \dots, Z_m \quad (2.1)$$

sendo α , entre 0 e 1², a elasticidade da produção — relacionada à mudança percentual na produção a cada 1% de mudança em ambas as entradas ε_j e N_m^j — e A_m um fator de escala ou fator-total de produtividade que leva em

¹ A função de produção de Cobb-Douglas mostrou-se ser uma boa aproximação para a relação entradas-saída [11]. Em uma pesquisa feita com dados obtidos na América do Norte entre os anos de 1899 e 1922, Charles Cobb e Paul Douglas relacionaram o número de trabalhadores empregados em firmas manufatureiras e o estoque de capital neste setor com a produção manufatureira. Meio século depois, P.H. Douglas estendeu sua pesquisa usando sete anos de observação em indústrias manufatureiras australianas.

² O fato de α ser menor do que 1 implica em um retorno à escala decrescente (i.e., a produtividade aumenta mais devagar do que o aumento das entradas) nas firmas manufatureiras. Se $\alpha > 1$ então há um retorno à escala crescente nas firmas manufatureiras. Nesse caso, um aumento nos fatores de entrada causam um aumento na produção maior do que o investimento. Isso fará com que o custo do produto caia e faça com que essa firma venda mais barato, causando uma competição entre as firmas. Por fim, se $\alpha = 1$ então há um retorno à escala constante nas firmas e dizemos que há uma competição perfeita no setor manufatureiro.

conta efeitos na produção que não são causados pelas entradas, como por exemplo uma mudança na tecnologia.

Podemos pensar no fator de esforço dos trabalhadores segundo o modelo salário-eficiência [12], supondo que existe um benefício e um custo para as firmas em pagar salários mais altos. Se a produção de uma firma depende do número de funcionários e de seus esforços então o modelo salário-eficiência supõe que o esforço depende positivamente do salário pago pela firma e da taxa de desemprego, e depende negativamente do salário pago pelas outras firmas. Mais precisamente, o fator de esforço dos trabalhadores relaciona o salário w_m^j de cada trabalhador pago pela j -ésima firma, a taxa de desemprego no setor urbano formal u e o salário médio w_m que as outras firmas do mesmo setor oferecem, ou seja, $\varepsilon_j = \varepsilon_j(w_m^j, w_m, u)$ ³. Podemos comparar o fator de esforço à medida relativa do salário w_m^j com o mercado de trabalho, ou seja, o esforço dos trabalhadores será maior quanto maior for o salário dele em relação ao que o mercado oferece. Entretanto, se o salário oferecido for menor que o do mercado seu esforço será zero, i.e., ele será contratado por uma firma que lhe pague mais. Matematicamente, podemos traduzir esse fator de esforço como [12]:

$$\varepsilon_j = \begin{cases} \left[\frac{w_m^j - \bar{w}_m}{\bar{w}_m} \right]^\eta & \text{se } w_m^j > \bar{w}_m \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.2)$$

sendo η , entre 0 e 1, a elasticidade do fator de esforço e $\bar{w}_m \equiv (1 - bu)w_m$ uma medida das condições do mercado de trabalho. Ainda, $b > 0$ representa o peso que o desemprego tem sobre o mercado de trabalho. Por exemplo, se um trabalhador, que não é bem visto por sua firma, for demitido terá dificuldade em arrumar um novo emprego, nesse caso há uma resistência por parte do trabalhador em sair do atual emprego, portanto $b > 1$. Por outro lado, em um país que oferece benefícios para desempregados a taxa de desemprego não será tão relevante, nesse caso $b < 1$.

Cada firma do setor formal busca pagar um salário e empregar uma quantidade de trabalhadores tal que maximize seu lucro, \mathcal{L}_m^j , definido como

³ Ver as seções 9.2 e 9.3 da referência 12.

o valor total da produção subtraído do gasto com funcionários:

$$\mathcal{L}_m^j \equiv p_m Y_m^j - w_m^j N_m^j, \quad (2.3)$$

levando em consideração que o salário afeta a eficiência, ou esforço ε_j , com que os trabalhadores desempenham suas atividades.

Tomando como dado o preço unitário do bem manufaturado, $p_m = 1$, a maximização do lucro da j -ésima firma obedece o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} (Y_m^j)' \varepsilon_j - w_m^j &= 0 \\ (Y_m^j)' (\varepsilon_j)' N_m^j - N_m^j &= 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

com $(Y_m^j)' \equiv \frac{\partial Y_m^j}{\partial (\varepsilon_j N_m^j)}$ e $(\varepsilon_j)' \equiv \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial w_m^j}$.

Facilmente pode-se mostrar que a solução do sistema de equações acima, fazendo uso das equações (2.1) e (2.2), resulta em um número de trabalhadores contratados e escolha de salário pago pela j -ésima firma, dados por:

$$w_m^j = \frac{(1 - bu)w_m}{1 - \eta}, \quad (2.5)$$

$$N_m^j = \left[\frac{\alpha A_m}{w_m^j} \left(\frac{\eta}{1 - \eta} \right)^{\alpha \eta} \right]^{\frac{1}{1 - \alpha}}. \quad (2.6)$$

Setor urbano informal

Diferentemente do setor formal, supomos este setor ser tomador de preço, ou seja, o preço do serviço informal e os salários pagos pelas pequenas firmas são ditados pelo mercado. Sendo assim, todas as pequenas firmas pagam o mesmo salário, $w_s^j = w_s$, $\forall j$, e este ajusta-se com o mercado tal que não haja desemprego neste setor. O setor urbano informal é composto por Z_s pequenas firmas, que utilizam a mesma tecnologia de produção em um mercado perfeitamente competitivo. Por suposição, a produção de serviços Y_s^j de cada pequena firma do setor informal também está sujeita à função de produção de Cobb-Douglas, porém considerando apenas uma entrada: o

número de trabalhadores empregados, N_s^j , pela j -ésima pequena firma.

$$Y_s^j = A_s(N_s^j)^\delta, \quad \text{com } j = 1, 2, \dots, Z_s \quad (2.7)$$

sendo δ , entre 0 e 1, a elasticidade da produção de serviços e A_s um fator de escala.

Cada pequena firma do setor informal busca empregar um número de trabalhadores que maximize seu lucro, \mathcal{L}_s^j , definido como o valor total da produção subtraído do gasto com funcionários:

$$\mathcal{L}_s^j \equiv p_s Y_s^j - w_s N_s^j. \quad (2.8)$$

Sendo assim, fazendo uso da equação (2.7), a demanda por trabalhadores informais pelo j -ésimo produtor de serviços informais será:

$$N_s^j = \left(\frac{p_s \delta A_s}{w_s} \right)^{\frac{1}{1-\delta}}. \quad (2.9)$$

É importante observar na equação acima que todas as pequenas firmas escolhem o mesmo número de trabalhadores, uma vez que não há competição de salários entre si.

Setor rural

Assim como no setor informal, supomos que o setor rural seja tomador de preço, onde todos os donos de terra pagam o mesmo salário, $w_a^j = w_a$, $\forall j$, tal que não haja desemprego no setor. Este é formado por Z_a produtores agrícolas, que utilizam a mesma tecnologia de produção em um mercado perfeitamente competitivo. A produção agrícola de cada fazenda, Y_a^j , está sujeita à função de produção Cobb-Douglas, considerando apenas o número de trabalhadores rurais como entrada, portanto

$$Y_a^j = A_a(N_a^j)^\phi, \quad \text{com } j = 1, 2, \dots, Z_a \quad (2.10)$$

sendo ϕ , entre 0 e 1, a elasticidade da produção agrícola e A_a um fator de escala.

Cada produtor de bens agrícolas busca empregar um número de trabalhadores que maximize seu lucro, \mathcal{L}_a^j , definido como:

$$\mathcal{L}_a^j \equiv p_a Y_a^j - w_a N_a^j. \quad (2.11)$$

Sendo assim, fazendo uso da equação (2.10), a demanda por trabalhadores rurais pelo j -ésimo produtor agrícola será:

$$N_a^j = \left(\frac{p_a \phi A_a}{w_a} \right)^{\frac{1}{1-\phi}} \quad (2.12)$$

Análogo ao setor informal, todos os donos de terra escolhem o mesmo número de trabalhadores rurais, uma vez que não há competição de salários entre si.

2.1.2 Decisões de consumo

Precisamos definir a participação dos consumidores na economia. Para isso, primeiro, supomos que todos os lucros são completamente distribuídos e gastos pelos donos de firmas para o consumo de bens. Podemos dizer então que todos os ganhos (sejam em salários ou lucros) gerados em cada setor são completamente usados para o consumo de bens. Segundo, supomos que a demanda por consumo de bens seja representada pelo sistema de despesas linear [14]. Faremos uso de um caso particular desse sistema, a função utilidade direta de Cobb-Douglas [14]:

$$\tilde{U}_x = \sum_k d_k \log(x_k), \quad (2.13)$$

com $d_k > 0$ e $\sum d_k = 1$ (retorno à escala constante), e x_k é a quantidade de bens do tipo k . Equivalentemente, em uma forma mais familiar para grandezas que apresentam retorno à escala constante (veja, por exemplo, a eq. (2.1)), podemos reescrever a função de Cobb-Douglas na forma:

$$U_x = \prod_k (x_k)^{d_k}. \quad (2.14)$$

Dizemos que d_k são as frações marginais de orçamento. Essas frações definem como cada unidade monetária é gasta em consumo de bens, ou seja, d_k são as frações da despesa gasta em cada bem.

Setor urbano formal

Vamos supor que cada agente j do setor formal, seja ele proprietário de capital alocado nas firmas manufatureiras ou trabalhador, tem preferências

representadas pela seguinte função utilidade de Cobb-Douglas:

$$U_f^j = (f_m^j)^{d_m} (f_s^j)^{d_s} (f_a^j)^{(1-d_m-d_s)}, \quad (2.15)$$

sendo f_m^j , f_s^j e f_a^j as quantidades consumidas pelo j -ésimo agente do setor formal de bem manufaturado, de serviço informal e de bem agrícola, respectivamente. Ademais, d_m e d_s são as frações marginais de orçamento de produtos manufaturados e de serviços, respectivamente, utilizadas por consumidores urbanos (formais ou informais). No último termo da função utilidade usamos a propriedade retorno à escala constante para escrever a fração marginal de bens agrícolas, $(1-d_m-d_s)$, utilizadas por consumidores urbanos. Lembramos que essas frações obedecem à restrição $(d_m + d_s) < 1$.

Tomando como dados os preços unitários do bem manufaturado, p_m , do serviço informal, p_s , e do bem agrícola, p_a , o j -ésimo agente do setor formal escolhe seu consumo (f_m^j, f_s^j, f_a^j) tal que maximize sua utilidade, eq. (2.15), sujeita à seguinte restrição orçamentária:

$$p_m f_m^j + p_s f_s^j + p_a f_a^j = M_f^j \quad (2.16)$$

sendo M_f^j a renda desse j -ésimo agente do setor formal. A renda deste agente depende do seu papel no setor produtivo, mais precisamente, suporemos que um agente formal possa assumir um de dois papéis distintos, a saber, será trabalhador ou proprietário de capital utilizado pelas firmas manufatureiras. Definindo Π_f^j como o lucro recebido pelo agente j caso ele seja proprietário de capital, podemos sintetizar a renda de um agente j do setor formal como segue:

$$M_f^j = \begin{cases} 0 & \text{se for trabalhador e estiver desempregado} \\ w_m & \text{se for trabalhador e estiver empregado} \\ \Pi_f^j & \text{se for proprietário de capital manufatureiro.} \end{cases} \quad (2.17)$$

Em suma, dados os preços (p_m, p_s, p_a) e o salário w_m , cada agente do setor formal terá sua máxima função utilidade quando⁴:

$$f_m^j = \frac{d_m M_f^j}{p_m}; \quad f_s^j = \frac{d_s M_f^j}{p_s}; \quad f_a^j = \frac{(1-d_m-d_s) M_f^j}{p_a}. \quad (2.18)$$

⁴ Verifica-se este resultado usando multiplicadores de Lagrange para calcular o máximo da utilidade, eq. (2.15), obedecendo a restrição orçamentária, eq. (2.16).

Por suposição, toda a renda de cada trabalhador será gasta no consumo de bens, por não haver estoque de capital. Sendo assim, as equações acima são características da função utilidade direta de Cobb-Douglas, nas quais o consumo de um bem é diretamente proporcional à sua despesa.

Setor urbano informal

Vamos supor que cada agente j do setor informal, seja ele proprietário de capital alocado nas firmas informais ou trabalhador, tem preferências representadas pela seguinte função utilidade:

$$U_I^j = (I_m^j)^{d_m} (I_s^j)^{d_s} (I_a^j)^{(1-d_m-d_s)}, \quad (2.19)$$

sendo I_m^j , I_s^j e I_a^j as quantidades consumidas pelo j -ésimo agente do setor informal de bem manufaturado, de serviço informal e de bem agrícola, respectivamente. Os expoentes são aqueles já definidos no setor formal.

Tomando como dados os preços unitários do bem manufaturado, p_m , do serviço informal, p_s , e do bem agrícola, p_a , o j -ésimo agente do setor informal escolhe seu consumo (I_m^j, I_s^j, I_a^j) tal que maximize sua utilidade, eq. (2.19), sujeita à seguinte restrição orçamentaria:

$$p_m I_m^j + p_s I_s^j + p_a I_a^j = M_I^j \quad (2.20)$$

sendo M_I^j a renda desse j -ésimo agente do setor informal. A renda deste agente depende do seu papel no setor produtivo, mais precisamente, suporemos que um agente informal possa assumir um de dois papéis distintos, a saber, será trabalhador ou proprietário de capital utilizado pelas firmas de serviço informal. Definindo Π_I^j como o lucro recebido pelo agente j caso ele seja proprietário de capital, podemos sintetizar a renda de um agente j do setor informal como segue:

$$M_I^j = \begin{cases} w_s & \text{se for trabalhador} \\ \Pi_I^j & \text{se for proprietário de capital,} \end{cases} \quad (2.21)$$

notando que não há desemprego neste setor.

Em suma, dados os preços (p_m, p_s, p_a) e o salário w_s , cada agente do setor informal terá sua máxima função utilidade quando:

$$I_m^j = \frac{d_m M_I^j}{p_m}; \quad I_s^j = \frac{d_s M_I^j}{p_s}; \quad I_a^j = \frac{(1-d_m-d_s)M_I^j}{p_a}. \quad (2.22)$$

Setor rural

Por último, vamos supor que cada agente j do setor rural, seja ele proprietário de capital alocado nas fazendas ou trabalhador, tem preferências representadas pela seguinte função utilidade:

$$U_r^j = (r_m^j)^{(1-d_a)}(r_a^j)^{d_a}, \quad (2.23)$$

sendo r_m^j e r_a^j as quantidades consumidas pelo j -ésimo agente do setor rural de bem manufaturado e de bem agrícola, respectivamente. Ademais, d_a é a fração marginal de orçamento de bens agrícolas utilizada por consumidores rurais. No primeiro termo da função utilidade usamos a propriedade retorno à escala constante para escrever a fração marginal de produtos manufaturados, $(1-d_a)$, utilizada por consumidores rurais. Cabe salientar que o serviço informal não faz parte do consumo dos agentes localizados no setor rural, uma vez que serviços informais são realizados apenas em suas proximidades, ou seja, na área urbana.

Tomando como dados os preços unitários do bem manufaturado, p_m , e do bem agrícola, p_a , o j -ésimo agente do setor rural escolhe seu consumo (r_m^j, r_a^j) tal que maximize sua utilidade, eq. (2.23), sujeita à seguinte restrição orçamentária:

$$p_m r_m^j + p_a r_a^j = M_r^j \quad (2.24)$$

sendo M_r^j a renda desse j -ésimo agente do setor rural. A renda deste agente depende do seu papel no setor produtivo, mais precisamente, suporemos que um agente rural possa assumir um de dois papéis distintos, a saber, será trabalhador ou proprietário de capital utilizado pelas fazendas. Definindo Π_r^j como o lucro recebido pelo agente j caso ele seja proprietário de capital, podemos sintetizar a renda de um agente j do setor rural como segue:

$$M_r^j = \begin{cases} w_a & \text{se for trabalhador} \\ \Pi_r^j & \text{se for proprietário de capital,} \end{cases} \quad (2.25)$$

notando que não há desemprego neste setor.

Em suma, dados os preços (p_m, p_s, p_a) e o salário w_a , cada agente do setor rural terá sua máxima função utilidade quando:

$$r_m^j = \frac{(1-d_a)M_r^j}{p_m}; \quad r_a^j = \frac{d_a M_r^j}{p_a}. \quad (2.26)$$

2.2 Equilíbrio de mercado

Até agora, determinamos as condições de produção e de consumo, devidas à participação dos agentes na economia. Agora, do ponto de vista econômico, definiremos as condições de equilíbrio nos mercados de bens e de trabalho.

2.2.1 Mercado de bens

Manufaturados

No equilíbrio, todas as firmas do setor urbano formal escolhem o mesmo salário [12, 15], i.e., $w_m^j = w_m, \forall j$. Portanto, da equação (2.5) obtemos uma taxa de desemprego de equilíbrio fixa:

$$u = \frac{\eta}{b}. \quad (2.27)$$

Nesse regime, o fator de esforço dos trabalhadores, eq. (2.2), será o mesmo em qualquer firma, dado por:

$$\varepsilon_j \equiv \varepsilon = \left(\frac{\eta}{1 - \eta} \right)^\eta. \quad (2.28)$$

Como consequência, todas as firmas contratarão o mesmo número de trabalhadores N_m^j , de modo que o número total de trabalhadores no setor urbano formal é $N_m = Z_m N_m^j$. Sendo assim, a produção total de bens manufaturados, $Y_m = Z_m Y_m^j$, é dada por (veja eq. (2.1)):

$$Y_m = \xi_m (N_m)^\alpha \quad (2.29)$$

na qual

$$\xi_m \equiv A_m Z_m^{1-\alpha} \varepsilon^\alpha \quad (2.30)$$

Por definição, a demanda agregada de bens manufaturados é igual ao consumo total de bens manufaturados pelos três setores:

$$D_m \equiv \sum_j f_m^j + \sum_j I_m^j + \sum_j r_m^j. \quad (2.31)$$

Inserindo o consumo de bens manufaturados de cada setor (veja eqs. (2.18), (2.22) e (2.26)) na equação acima resulta:

$$p_m D_m = \sum_j d_m M_f^j + \sum_j d_m M_I^j + \sum_j (1 - d_a) M_r^j. \quad (2.32)$$

Considerando as restrições orçamentárias (2.17), (2.21) e (2.25), a equação anterior reescreve-se como:

$$\begin{aligned}
 p_m D_m &= d_m \left(\sum_{j=1}^{N_m} w_m + \sum_j \Pi_f^j \right) + d_m \left(\sum_{j=1}^{N_s} w_s + \sum_j \Pi_I^j \right) \\
 &\quad + (1 - d_a) \left(\sum_{j=1}^{N_a} w_a + \sum_j \Pi_r^j \right) \\
 &= d_m \left(w_m N_m + \sum_j \Pi_f^j \right) + d_m \left(w_s N_s + \sum_j \Pi_I^j \right) \\
 &\quad + (1 - d_a) \left(w_a N_a + \sum_j \Pi_r^j \right),
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

sendo $\sum_j \Pi_f^j$, $\sum_j \Pi_I^j$ e $\sum_j \Pi_r^j$ os lucros totais dos setores urbano formal, urbano informal e rural, respectivamente. Uma vez que a soma da massa de salário e da massa de lucro em um setor produtivo nada mais é do que o valor total da produção deste setor, ver por exemplo eq. (2.3), segue que:

$$p_m D_m = d_m(p_m Y_m + p_s Y_s) + (1 - d_a)p_a Y_a. \tag{2.34}$$

Portanto, o equilíbrio no mercado de bens manufaturados ocorrerá quando a demanda agregada igualar-se a oferta agregada, $D_m = Y_m$, já que a todo momento supomos que não há estoque de bens ou produto, ou seja:

$$p_m Y_m = \frac{d_m}{(1 - d_m)} p_s Y_s + \frac{(1 - d_a)}{(1 - d_m)} p_a Y_a. \tag{2.35}$$

Serviços informais

Já vimos que no setor urbano informal todas as firmas contratam o mesmo número de trabalhadores N_s^j , portanto, o total de trabalhadores neste setor é $N_s = Z_s N_s^j$. Da mesma forma, a produção é a mesma para todas as pequenas firmas, sendo assim, a oferta agregada de serviços informais, $Y_s = Z_s Y_s^j$, fica:

$$Y_s = \xi_s (N_s)^\delta, \tag{2.36}$$

na qual

$$\xi_s \equiv A_s Z_s^{1-\delta}. \quad (2.37)$$

A demanda agregada de serviços informais é igual ao consumo total de serviços informais no setor urbano, uma vez que, por definição, o setor rural não utiliza esses serviços:

$$D_s \equiv \sum_j f_s^j + \sum_j I_s^j. \quad (2.38)$$

Inserindo o consumo de serviços de cada setor (veja eqs. (2.18) e (2.22)) na equação acima e considerando as restrições orçamentarias (2.17) e (2.21) tem-se uma demanda agregada de serviços informais dada por:

$$p_s D_s = d_s \left(w_m N_m + \sum_j \Pi_f^j \right) + d_s \left(w_s N_s + \sum_j \Pi_I^j \right). \quad (2.39)$$

Identificando a soma da massa de salário e da massa de lucro em um setor produtivo como o valor total da produção deste setor, temos:

$$p_s D_s = d_s (p_m Y_m + p_s Y_s). \quad (2.40)$$

O equilíbrio no mercado de serviços informais ocorrerá, portanto, quando a demanda agregada igualar-se a oferta agregada, $D_s = Y_s$, ou seja:

$$p_s Y_s = \frac{d_s}{(1 - d_s)} p_m Y_m. \quad (2.41)$$

Agrícolas

No setor rural todos os produtores agrícolas têm mesmo número de trabalhadores, N_a^j , de modo que o total de trabalhadores neste setor é $N_a = Z_a N_a^j$. Sendo assim, a oferta agregada de bens agrícolas, $Y_a = Z_a Y_a^j$, fica:

$$Y_a = \xi_a (N_a)^\phi, \quad (2.42)$$

na qual

$$\xi_a \equiv A_a Z_a^{1-\phi}. \quad (2.43)$$

Por definição, a demanda agregada de bens agrícolas é igual ao consumo total desses bens nos três setores, ou seja, não há estoque de bens agrícolas:

$$D_a \equiv \sum_j f_a^j + \sum_j I_a^j + \sum_j r_a^j. \quad (2.44)$$

Inserindo o consumo de bens agrícolas de cada setor (veja eqs. (2.18), (2.22) e (2.26)) na equação acima e considerando as restrições orçamentarias (2.17), (2.21) e (2.25) tem-se uma demanda agregada de bens agrícolas dada por:

$$\begin{aligned} p_a D_a &= (1 - d_m - d_s) \left(w_m N_m + \sum_j \Pi_f^j + w_s N_s + \sum_j \Pi_I^j \right) \\ &\quad + d_a \left(w_a N_a + \sum_j \Pi_r^j \right). \end{aligned} \quad (2.45)$$

Identificando soma da massa de salário e da massa de lucro em um setor produtivo como o valor total da produção deste setor temos:

$$p_a D_a = (1 - d_m - d_s)(p_m Y_m + p_s Y_s) + d_a p_a Y_a. \quad (2.46)$$

O equilíbrio no mercado de bens agrícolas ocorrerá quando a demanda agregada igualar-se a oferta agregada, $D_a = Y_a$, ou seja:

$$p_a Y_a = \frac{(1 - d_m - d_s)}{(1 - d_a)} (p_m Y_m + p_s Y_s). \quad (2.47)$$

Preços de equilíbrio

Uma vez que consideramos como valor unitário o preço p_m dos bens manufaturados, dispo de as equações (2.41) e (2.47) determinamos os preços dos bens agrícolas e dos serviços informais, em unidades de bens manufaturados, sejam eles:

$$p_s = \frac{d_s}{(1 - d_s)} \frac{Y_m}{Y_s} \quad (2.48)$$

e

$$p_a = \frac{(1 - d_m - d_s)}{(1 - d_a)(1 - d_s)} \frac{Y_m}{Y_a}, \quad (2.49)$$

sendo Y_m , Y_s e Y_a calculados a partir das equações (2.29), (2.36) e (2.42), respectivamente.

2.2.2 Mercado de trabalho

Em determinado período de tempo — longo o suficiente para que a economia possa sentir os efeitos causados por migrações intra-setoriais, mas que mantenha-se aproximadamente constante neste período (adiante relacionado com um passo de simulação) — supomos que os trabalhadores de qualquer setor ofertam uma unidade de trabalho, de modo que a oferta total de trabalho em cada setor equivale ao número respectivo de trabalhadores. Em termos econômicos, a oferta de trabalho é perfeitamente inelástica a curto prazo.

Urbano formal

Dentro das condições de equilíbrio descritas na seção 2.2.1, se invertermos a equação (2.6) – que relaciona o número de trabalhadores que cada firma manufatureira escolhe contratar com o salário que esta escolhe pagar – obtemos um salário fixo, pago pelas firmas manufatureiras, igual a:

$$w_m = \frac{\zeta_m}{(N_m)^{1-\alpha}}, \quad (2.50)$$

com

$$\zeta_m \equiv \alpha A_m (Z_m)^{1-\alpha} \varepsilon^\alpha. \quad (2.51)$$

Vale lembrar que a demanda por trabalho no setor urbano formal é estritamente menor que número de trabalhadores, por isso, a quantidade de trabalhadores empregados N_m é uma fração da força de trabalho nesse setor:

$$N_m = (1 - u)N_f, \quad (2.52)$$

sendo N_f o número total de agentes localizados no setor urbano formal e u é a taxa de desemprego permanente, existente somente no setor formal, dada pela equação (2.27).

Urbano informal

Embora mantenhamos a premissa de que a oferta de trabalho neste mercado é perfeitamente inelástica, diferentemente do mercado de trabalho formal,

consideraremos o mercado de trabalho informal como perfeitamente competitivo, ou seja, os salários pagos são iguais em todas as pequenas firmas e ajustam-se de modo que não haja desemprego neste setor.

Nas mesmas condições de equilíbrio do setor urbano formal, se invertermos a equação (2.9) obtemos um salário real (dado em termos da inflação), pago pelos proprietários de capital no setor informal, igual a:

$$\frac{w_s}{p_s} = \frac{\zeta_s}{(N_s)^{1-\delta}}, \quad (2.53)$$

com

$$\zeta_s \equiv \delta A_s (Z_s)^{1-\delta}. \quad (2.54)$$

Rural

Assim como o mercado de trabalho urbano informal, vamos admitir que o mercado de trabalho rural também seja perfeitamente competitivo. Análogo aos outros dois setores, a partir da equação (2.12), obtemos o salário real, pago pelos proprietários de capital no setor rural, igual a:

$$\frac{w_a}{p_a} = \frac{\zeta_a}{(N_a)^{1-\phi}}, \quad (2.55)$$

com

$$\zeta_a \equiv \phi A_a (Z_a)^{1-\phi}. \quad (2.56)$$

Sistema econômico

Como pode-se notar nas seções anteriores, a distribuição de população em cada setor é a base do cálculo para a economia de um país em desenvolvimento. Dada uma distribuição setorial de trabalhadores (N_m, N_s, N_a) e as constantes paramétricas $(A_m, \alpha, Z_m, d_m, \eta, b, A_s, \delta, Z_s, d_s, A_a, \phi, Z_a, d_a)$, podemos calcular as produções agregadas de cada setor (Y_m, Y_s, Y_a) , dadas pelas equações (2.29), (2.36) e (2.42), respectivamente. Esses valores, por sua vez, podem ser inseridos nas equações (2.48) e (2.49) para obtermos os preços dos serviços e dos bens agrícolas, respectivamente. Lembrando que tomamos o preço do bem manufaturado como numerário [3], temos então os preços dos produtos $(p_m \equiv 1, p_s, p_a)$. Finalmente, esses preços podem ser

substituídos nas equações (2.50), (2.53) e (2.55) para calcularmos os salários pagos pelas firmas de cada setor, repectivamente (w_m, w_s, w_a) .

Resumindo, dadas as constantes paramétricas $(A_m, \alpha, Z_m, d_m, \eta, b, A_s, \delta, Z_s, d_s, A_a, \phi, Z_a, d_a)$, podemos calcular o macro-estado econômico $(Y_m, Y_s, Y_a, p_m, p_s, p_a, w_m, w_s, w_a)$ de um país em processo de urbanização conhecendo apenas a sua distribuição setorial de trabalhadores (N_m, N_s, N_a) .

Migração intersetorial: um modelo de mecânica estatística

Neste capítulo descreveremos o modelo de interação entre os fluxos migratórios e os processos de mudanças na economia. Levamos em consideração duas influências determinísticas para a decisão dos agentes: econômica e social. De acordo com a proposta da referência [16], chamamos de *utilidade determinística privada* a influência econômica e chamamos de *utilidade determinística social* a influência social. Além dessas, levamos em consideração a parte idiossincrática (não-observável) no processo de migração, definida como *utilidade privada aleatória*; descreveremos melhor esta utilidade adiante.

A proposta é que cada agente, no processo de escolha de setor, procura maximizar sua utilidade total \mathcal{U} , ou seja, a soma de suas utilidades determinísticas, privada \mathcal{U}^p e social \mathcal{U}^s , e sua utilidade aleatória ε ¹:

$$\mathcal{U}(\sigma_i) = \mathcal{U}^p(\sigma_i) + \mathcal{U}^s(\sigma_i) + \varepsilon(\sigma_i), \quad (3.1)$$

sendo que σ_i representa o setor no qual o agente i está localizado.

Nas seções seguintes veremos que a maximização da utilidade pode ser escrita como a minimização de uma hamiltoniana e que, por causa da heterogeneidade dos agentes, o problema é equivalente ao de um sistema físico de spins em contato com um reservatório térmico. Essa comparação foi fundamental para as interpretações dos resultados. Em seguida, desenvolveremos matematicamente a utilidade não-observável e, devido à sua aleatoriedade, lançamos mão de um artifício computacional conhecido como simulação de

¹ Não confundir a utilidade aleatória com o esforço de cada trabalhador definido no capítulo anterior, apesar de usarmos a mesma letra para ambas as definições.

Monte Carlo. Por fim, discutiremos com detalhes os processos que compõem tal simulação.

3.1 Utilidades determinísticas

3.1.1 Utilidade privada

Em termos econômicos, a utilidade de um agente em determinado setor é proporcional às condições de mercado de trabalho, em outras palavras, quanto maior for a chance de ser empregado e quanto maior for o salário recebido então maior será sua utilidade naquele setor. Definem-se as utilidades privadas dos setores formal, informal e rural, respectivamente, como:

$$\mathcal{U}_{formal}^p \equiv k\bar{w}_m \quad ; \quad \mathcal{U}_{informal}^p \equiv k\bar{w}_s \quad ; \quad \mathcal{U}_{rural}^p \equiv k\bar{w}_a \quad (3.2)$$

nas quais k é uma constante paramétrica e $(\bar{w}_m, \bar{w}_s, \bar{w}_a)$ são chamados de salários esperados, a saber, como só há desemprego no setor formal, em nosso modelo temos $\bar{w}_m = (1 - bu)w_m$ (ver equação (2.2)), $\bar{w}_s = w_s$ e $\bar{w}_a = w_a$.

Conhecendo as utilidades privadas de cada setor, de modo geral, podemos escrever a utilidade privada na forma:

$$\mathcal{U}^p(\sigma_i) = k \left[\bar{w}_m \frac{\sigma_i(\sigma_i + 1)}{2} + \bar{w}_s \frac{\sigma_i(\sigma_i - 1)}{2} + \bar{w}_a(1 - \sigma_i^2) \right], \quad (3.3)$$

com

$$\sigma_i = \begin{cases} +1 & \text{para setor formal} \\ -1 & \text{para setor informal} \\ 0 & \text{para setor rural,} \end{cases} \quad (3.4)$$

ou seja, quando tomamos $\sigma_i = +1$ na eq. (3.3) retornamos à utilidade privada formal, para $\sigma_i = -1$ temos a utilidade privada informal e para $\sigma_i = 0$ temos a utilidade privada rural. A fim de simplificar nossa interpretação, facilmente mostra-se que a utilidade privada, eq. (3.3), pode ser reescrita na forma:

$$\mathcal{U}^p(\sigma_i) = k \left[\left(\frac{\bar{w}_m + \bar{w}_s}{2} - \bar{w}_a \right) \sigma_i^2 + \left(\frac{\bar{w}_m - \bar{w}_s}{2} \right) \sigma_i + \bar{w}_a \right]. \quad (3.5)$$

Do ponto de vista econômico, o primeiro termo da equação acima leva em conta uma comparação entre os salários esperados da área rural e da área urbana. O segundo termo é relevante para a decisão de escolha do agente entre os setores formal e informal. O terceiro termo é uma constante irrelevante, uma vez que estaremos interessados na diferença de utilidades, e será omitida daqui por diante.

3.1.2 Utilidade social

No modelo de migração, a influência social é representada pela utilidade social e leva o agente a migrar entre diferentes áreas, ou seja, ela representa a tendência do agente em migrar da área rural para a área urbana e vice-versa. Mais precisamente, a utilidade social não distingue os setores formal e informal, ou seja, a influência social não faz com que um agente resolva mudar seu setor de trabalho dentro da área urbana. O círculo social de uma agente é que fará com que sua utilidade social seja maior ou menor em determinada área, i.e., ela será maior onde estiverem a maioria de seus contatos pessoais (sejam eles parentes, amigos, vizinhos, etc.). Matematicamente, essa utilidade social traduz-se como:

$$U^s(\sigma_i) = J \sum_j \delta_{\sigma_i^2, \sigma_j^2}, \quad (3.6)$$

na qual $J (> 0)$ ² é uma constante paramétrica, a soma em j é sobre os *primeiros vizinhos* do agente i , $\delta_{a,b}$ é o delta de Kronecker — $\delta_{a,b} = 1$ se $a = b$ e $\delta_{a,b} = 0$ caso contrário — e, por fim, σ_i segue as regras da expressão (3.4). É importante notar que *primeiros vizinhos* não significam necessariamente vizinhos geográficos, mas sim a rede de contatos do agente i . Nesse sentido, por exemplo, para um agente localizado na área urbana, cada agente pertencente a sua área de influência, contribui com uma unidade J para a utilidade social.

² A constante J deve ser positiva uma vez que contatos pessoais localizados no mesmo setor, por definição, aumentam a utilidade social.

Um modelo de mecânica estatística

Até agora, vimos definições e conceitos relevantes à parte econômica de um país em desenvolvimento. Mas onde se encaixa a física nisso tudo? Pois bem, começaremos a juntar as peças analisando o conceito de utilidade. Em economia, um agente sempre procura maximizar sua utilidade, equivalentemente, em termodinâmica, o estado de equilíbrio de um sistema é dado pela minimização de sua energia livre, descrita matematicamente através da função de partição (e, conseqüentemente, de sua hamiltoniana). Em termos estatísticos, podemos associar o negativo da utilidade à hamiltoniana. Vamos então escrever a utilidade de maneira que possamos compará-la com alguma hamiltoniana já conhecida. Começamos reescrevendo a utilidade social de maneira a eliminar o delta de kronecker, assim a equação (3.6) pode ser reescrita na forma:

$$U^s(\sigma_i) = 2J \sum_j \left[\sigma_i^2 \sigma_j^2 - \frac{1}{2}(\sigma_i^2 + \sigma_j^2 - 1) \right]. \quad (3.7)$$

O termo -1 dentro do parênteses resume-se em uma constante que será omitida daqui por diante, uma vez que estaremos interessados na diferença de utilidades. Disposto das equações (3.5) e (3.7), estamos aptos a escrever a utilidade determinística, $U^d \equiv U^p + U^s$, como:

$$U^d(\sigma_i) = k \left(\frac{\bar{w}_m + \bar{w}_s}{2} - \bar{w}_a \right) \sigma_i^2 + k \left(\frac{\bar{w}_m - \bar{w}_s}{2} \right) \sigma_i + 2J \sum_j \left[\sigma_i^2 \sigma_j^2 - \frac{1}{2}(\sigma_i^2 + \sigma_j^2) \right]. \quad (3.8)$$

A fim de facilitar nossa interpretação de hamiltoniana, faremos algumas manipulações algébricas na equação (3.8). Primeiro, tomamos o negativo da utilidade determinística, depois somamos sobre todos os agentes i e assim obtemos o negativo da utilidade determinística de todos os agentes (ou a hamiltoniana de todo o sistema). Feito isso, podemos substituir a representação U^d por \mathcal{H} e ficamos com:

$$\mathcal{H}(\sigma_i) = k_1 \sum_i \sigma_i^2 + k_2 \sum_i \sigma_i + 4J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{1}{2}(\sigma_i^2 + \sigma_j^2) - \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right]. \quad (3.9)$$

tendo definido $k_1 \equiv k \left(\bar{w}_a - \frac{\bar{w}_m + \bar{w}_s}{2} \right)$ e $k_2 \equiv k \left(\frac{\bar{w}_s - \bar{w}_m}{2} \right)$. O limite inferior do somatório, $\langle i, j \rangle$, significa a soma sobre todos os pares de primeiros vizinhos, a qual foi obtida usando a relação $\sum_{\langle i, j \rangle} (\dots) = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j (\dots)$, sendo que a soma em j é sobre os primeiros vizinhos de i . Percebendo ainda que os termos σ_i^2 e σ_j^2 , do último somatório da eq. (3.9), contribuem igualmente para o hamiltoniano, podemos reescrevê-lo novamente como:

$$\mathcal{H}(\sigma_i) = (k_1 + 2zJ) \sum_i \sigma_i^2 + k_2 \sum_i \sigma_i - 4J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i^2 \sigma_j^2 \quad (3.10)$$

sendo z o número de primeiros vizinhos. Finalmente, podemos identificar a equação acima como uma hamiltoniana de Blume-Emery-Griffiths (BEG) [17], com o termo bilinear (proporcional a $\sigma_i \sigma_j$) nulo e adicionada de um campo magnético externo (termo que acopla com σ_i). BEG, no referido artigo, descrevem uma mistura de He^3 - He^4 e mostram, ao menos qualitativamente, as características de separação de fase e superfluidez dessa mistura.

Entendendo melhor a equação (3.10), o termo em σ_i está relacionado a um *campo externo* aplicado e a sua média $\langle \sigma_i \rangle$ nos dá, por exemplo, a magnetização de um sistema de spins. No modelo de BEG, a superfluidez da mistura He^3 - He^4 é representada pelo ordenamento magnético desses spins. Chamamos de *campo cristalino* o coeficiente de σ_i^2 , no caso, $(k_1 + 2zJ)$. Em um sistema de spins a média $\langle \sigma_i^2 \rangle$ refere-se ao momento de quadrupolo e no modelo de BEG o ordenamento desses momentos de quadrupolo representa a separação de fase da mistura He^3 - He^4 . Por fim, diz-se ser o termo de *interação biquadrática* aquele que acopla com $\sigma_i^2 \sigma_j^2$. Para BEG, este termo pode ser visto como uma pequena perturbação causada pelos diferentes valores das três possíveis interações entre os átomos (He^3 - He^3 , He^3 - He^4 e He^4 - He^4).

3.2 Utilidade não observável (aleatória)

Sabemos que um agente decide migrar de área ou mudar de setor buscando sua máxima utilidade e vimos na seção anterior a utilidade determinística de um agente, ou seja, decisões comuns a todos os agentes, tal que um

observador externo possa detectá-las. Entretanto, o processo de migração também envolve decisões baseadas em interesses pessoais de cada agente, sem que um observador possa identificá-las: associamos a *utilidade aleatória* a essas decisões. Devido a utilidade aleatória, a migração de cada agente torna-se um processo estocástico, o qual dispomos de uma simulação para estudá-lo. Necessariamente, cada agente migra para o setor que lhe fornece a maior utilidade total (determinística e aleatória); assim o agente i dará preferência ao setor σ_i em relação ao setor σ'_i se:

$$\mathcal{U}^d(\sigma_i) + \varepsilon(\sigma_i) > \mathcal{U}^d(\sigma'_i) + \varepsilon(\sigma'_i), \quad \forall \sigma'_i \neq \sigma_i \quad (3.11)$$

lembrando que $\mathcal{U}^d(\sigma_i)$, eq. (3.8), é a utilidade determinística do agente i no setor σ_i e $\varepsilon(\sigma_i)$, veja eq. (3.1), é a utilidade aleatória do agente i no setor σ_i (o mesmo vale para todos os outros setores σ'_i).

Apesar do nome, supondo que as utilidades aleatórias $\varepsilon_i \equiv \varepsilon(\sigma_i)$, $\forall i$, sejam identicamente e independentemente distribuídas, então essas escolhas não observáveis são bem descritas por uma distribuição de valor extremo ou, de forma equivalente, pela função *logit* [18]:

$$f(\varepsilon_i) = e^{-\varepsilon_i} \exp(-e^{-\varepsilon_i}). \quad (3.12)$$

Uma vez conhecidas as distribuições de probabilidades das variáveis aleatórias (dadas pela equação acima), procuramos a probabilidade de que a condição (3.11) ocorra, ou similarmente

$$\varepsilon(\sigma'_i) < \varepsilon_i + \mathcal{U}^d(\sigma_i) - \mathcal{U}^d(\sigma'_i), \quad \forall \sigma'_i \neq \sigma_i, \quad (3.13)$$

para dados valores de ε_i e σ'_i . Esta probabilidade, definida como:

$$P_{\varepsilon_i, \sigma'_i}(\sigma_i) \equiv \text{Prob}[\varepsilon'_i < \varepsilon_i + \Delta\mathcal{U}] \quad , \quad \begin{cases} \Delta\mathcal{U} & \equiv \mathcal{U}^d(\sigma_i) - \mathcal{U}^d(\sigma'_i) \\ \varepsilon'_i & \equiv \varepsilon(\sigma'_i) \end{cases} \quad (3.14)$$

é calculada pela distribuição de probabilidade acumulada da variável aleatória ε'_i , ou seja,

$$P_{\varepsilon_i, \sigma'_i}(\sigma_i) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_i + \Delta\mathcal{U}} f(\varepsilon'_i) d\varepsilon'_i = \exp(-e^{-(\varepsilon_i + \Delta\mathcal{U})}). \quad (3.15)$$

Conforme fora suposto, as variáveis aleatórias ε'_i são independentes e, por isso, a probabilidade para que a condição (3.13) ocorra para todos os possíveis valores de σ'_i torna-se o produto das distribuições acumuladas de cada variável:

$$P_{\varepsilon_i}(\sigma_i) = \prod_{\sigma'_i \neq \sigma_i} P_{\varepsilon_i, \sigma'_i}(\sigma_i). \quad (3.16)$$

Como não queremos calcular a probabilidade do agente i escolher o setor σ_i para um dado valor de ε_i , mas sim para qualquer valor do mesmo, então a probabilidade que procuramos é dada pela integral de $P_{\varepsilon_i}(\sigma_i)$ sobre todos os valores de ε_i pesados por suas funções densidades (3.12), tal que:

$$P(\sigma_i) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} P_{\varepsilon_i}(\sigma_i) f(\varepsilon_i) d\varepsilon_i. \quad (3.17)$$

Resolvendo a integral acima, após algumas manipulação algébricas (veja apêndice A), chega-se em:

$$P(\sigma_i) = \frac{e^{\mathcal{U}^d(\sigma_i)}}{\sum_{\sigma'_i} e^{\mathcal{U}^d(\sigma'_i)}}. \quad (3.18)$$

Essa probabilidade de escolha de setor pode ser adaptada para uma análise empírica especificando a forma funcional da utilidade. Vamos supor que a utilidade determinística varie linearmente com suas medidas observáveis, i.e., $\mathcal{U}^d = \beta\mathcal{U}^p + \beta\mathcal{U}^s \rightarrow \beta\mathcal{U}^d$. Em um primeiro momento podemos argumentar que, em certo limite, qualquer função pode ser aproximada por uma função linear de alguns parâmetros. Mais do que isto, McFadden [19] mostrou que a função de probabilidade logarítmica (“log-likelihood function”) é côncava em relação a β , o que facilita os procedimentos de maximização numérica. Além do mais, alguns pacotes numéricos de maximização de funções “logit” usam parâmetros lineares para representar a utilidade. Sendo assim, a escolha do setor σ_i pelo agente i , devido a decisões não observáveis, segue a função de probabilidade:

$$P(\sigma_i) = \frac{e^{\beta\mathcal{U}^d(\sigma_i)}}{\sum_{\sigma'_i} e^{\beta\mathcal{U}^d(\sigma'_i)}}. \quad (3.19)$$

Em termos econômicos, o parâmetro β está relacionado à heterogeneidade dos agentes, sendo inversamente proporcional a ela (i.e., quanto menor for o parâmetro β , maior será a heterogeneidade dos agentes e, portanto, mais aleatórias serão as decisões tomadas). Em particular, nosso modelo trata três setores, que serão representados por σ_i , σ'_i e σ''_i . Como a representação quantitativa da utilidade não tem em geral significado econômico, podemos escrever a equação (3.19) na forma:

$$P(\sigma_i) = \frac{1}{1 + e^{\beta[\mathcal{U}^d(\sigma'_i) - \mathcal{U}^d(\sigma_i)]} + e^{\beta[\mathcal{U}^d(\sigma''_i) - \mathcal{U}^d(\sigma_i)]}}. \quad (3.20)$$

Algoritmo de Monte Carlo

No contexto da física, as simulações de fenômenos físicos, baseadas em modelos de mecânica estatística, usam algoritmos de Monte Carlo para reproduzir efeitos aleatórios. Tais algoritmos seguem basicamente duas regras: *ergodicidade* e *balanço detalhado* [20]. A primeira garante que não estamos isolando qualquer micro-estado possível que um sistema possa alcançar. Já o balanço detalhado nos garante que o sistema chegará a um equilíbrio, dado pela distribuição de probabilidades desejada. Diferentes distribuições de probabilidades definem diferentes algoritmos. Comparando nosso modelo com simulações de Monte Carlo, podemos ler a equação (3.19) (ou, mais precisamente, a equação (3.20)) como a probabilidade de encontramos um determinado agente i no estado σ_i para o algoritmo de banho térmico [20].

3.3 Dinâmica de migração

O que fizemos até agora foi desenvolver um modelo para a economia de um país em desenvolvimento, dividida em três setores de trabalho, e o comportamento geral da população na escolha do setor de trabalho. Vimos na seção 3.2 que essas escolhas tornam-se processos estocásticos devido a fatores pessoais (não observáveis) envolvidos. Por isso, para descrevermos o fenômeno de mudança de setores em um país em desenvolvimento, durante certo período de tempo, podemos recorrer a uma simulação de Monte Carlo. Sendo assim, descreverei agora detalhadamente a dinâmica e algumas es-

colhas (tais como o tipo de rede, o número de vizinhos, as condições de contorno, entre outras) acerca dessa simulação.

Escolhemos representar o país por uma rede quadrada, na qual cada agente está localizado em apenas um sítio dessa rede e dois agentes não ocupam o mesmo sítio, sem que hajam sítios vazios. Para um dado número de agentes, dizemos que a rede tem tamanho linear L , ou seja, ao todo a rede quadrada tem $N = L^2$ sítios (agentes). Dado um instante de tempo, cada agente pode estar em apenas um dos três estados possíveis, sejam eles: $\sigma_i = -1, 0$ ou $+1$, representando os setores informal, rural ou formal, respectivamente, ver figura 1. É importante destacar que agentes localizados em sítios vizinhos não representam necessariamente uma vizinhança geográfica, mas sim as influências sociais (ou círculo social) desses agentes. Ainda nessa rede, optamos por usar condições de contorno helicoidais. Para sistemas suficientemente grandes, espera-se que diferentes condições de contorno não influenciem no equilíbrio do sistema mas apenas no tempo de chegada ao equilíbrio. Em nossa simulação, o sistema chega ao equilíbrio rapidamente, assim sendo, a escolha da condição de contorno torna-se praticamente irrelevante. Por fim, decidimos que as interações seriam do tipo *primeiros vizinhos*, ou seja, um agente tem interação social somente com seus vizinhos mais próximos, sejam eles os vizinhos localizados logo acima, abaixo, à esquerda e à direita.

A rede é preenchida por trabalhadores (agentes) distribuídos aleatoriamente. No instante inicial temos 80% dos trabalhadores na área rural, 20% no setor urbano formal e nenhum no setor urbano informal. Essa divisão de trabalhadores é próxima do que se observa em países em desenvolvimento, antes do processo de urbanização. Contudo, em nosso modelo, as frações iniciais de trabalhadores em cada setor não afetam as frações dos mesmos no equilíbrio. Para darmos início ao processo de simulação, precisamos definir os parâmetros, ou seja, os valores quantitativos que caracterizam um país em desenvolvimento. Em seguida, faremos um breve comentário sobre a escolha desses parâmetros. Uma vez que o setor informal certamente abriga um número maior de pequenas firmas do que produtores agrícolas e firmas manufatureiras, por se tratar de pequenas empresas, definimos o número de firmas em cada setor como: $Z_a = Z_m = 500$ e $Z_s = 5000$. Definimos os

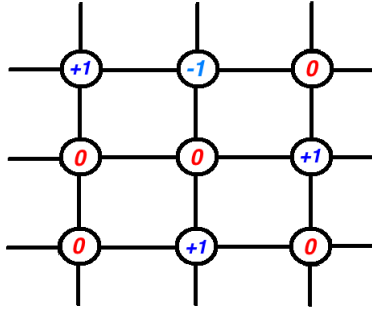


Figura 1 – Exemplo de rede quadrada, preenchida por agentes distribuídos nos três setores possíveis. Os primeiros vizinhos do sítio central são: -1 (acima), 0 (à esquerda), $+1$ (à direita) e $+1$ (abaixo).

fatores de escala $A_a = A_s = A_m = 1$ supondo que as produções não apresentem outros fatores relevantes além daqueles aqui apresentados. Sabemos que a produção do setor urbano formal tem uma maior elasticidade do que o setor rural, que, por sua vez, tem uma maior elasticidade do que o setor urbano informal então definimos $\alpha = 0,7$, $\phi = 0,3$ e $\delta = 0,2$. Os valores de α e ϕ são os mesmos usados na referência 10. Decidimos também que a elasticidade do fator de esforço é $\eta = 0,99$ e o peso do fator de desemprego é $b = 9,9$, de modo que a taxa de desemprego, eq. (2.27), fique: $u = 0,1$. Por fim, definimos as frações marginais de orçamento: $d_a = 0,33$, $d_s = 0,42$ e $d_m = 0,25$, respectivamente a fração de orçamento do setor rural gasta em produtos manufaturados, do setor urbano gasta em serviços e do setor urbano gasta em produtos manufaturados.

Iniciando então o processo de simulação, calculamos o macro-estado do sistema como descrito na seção 2.2.2 (**Sistema econômico**). Em seguida, precisamos definir a quantidade de trabalhadores que revisarão suas localizações setoriais, isto é, a probabilidade a [21] de um trabalhador tornar-se um potencial migrante. Em nossa simulação usamos o valor $a = 0,12$, entretanto, variamos essa grandeza e vimos que ela não interfere na configuração de equilíbrio do sistema, atuando somente no tempo de chegada ao equilíbrio, sendo mais rápido este processo quanto mais próximo a for de 1.

Todos os potenciais migrantes terão suas utilidades determinísticas calculadas pela equação (3.8) e tornar-se-ão efetivos migrantes, para o setor de maior utilidade, com probabilidade dada pela equação (3.20). A duração do processo de testar todos os potenciais migrantes é denifida como 1 passo de simulação.

Ao fim de cada passo de simulação, uma nova distribuição setorial de trabalhadores é obtida. Essa nova configuração induz um novo macro-estado do sistema econômico, que deve ser recalculado, e voltamos ao procedimento do parágrafo anterior. Este procedimento todo será repetido quantas vezes forem necessárias para o sistema alcançar o equilíbrio, isto é, para o fluxo migratório cessar. Esse comportamento pode ser observado analisando a fração de população em cada setor em função dos passos de simulação, veja a figura 2.

Resultados

No modelo que desenvolvemos neste trabalho, a migração de trabalhadores entre diferentes setores é guiada por incentivos econômicos, sociais e a parte aleatória devido a fatores não observáveis. Nossa análise de resultados se fará em partes. Observamos primeiro os efeitos devido a incentivos econômicos e mostramos que a condição de Harris-Todaro é satisfeita. Segundo, observamos somente efeitos causados por incentivos sociais, que nos remete a um modelo bastante estudado na área da física. Finalmente, analisamos o modelo completo com incentivos econômicos e sociais. Em todos os casos, fatores não observáveis foram levados em consideração.

A figura 2 mostra a dinâmica de chegada ao equilíbrio do modelo completo, com incentivos econômicos e sociais, explicitando as frações de população localizadas no setor urbano formal (curva de baixo) e do setor urbano, $N_u/N \equiv (N_f + N_i)/N$, (curva de cima). A diferença entre essas duas curvas, ou a região entre elas, é a fração de trabalhadores situados no setor urbano informal. E a diferença entre o valor 1 e a curva de cima é a fração de trabalhadores rurais. Como podemos observar nessa figura, a dinâmica migratória é guiada por incentivos privados e sociais, que levam a economia a um equilíbrio de predomínio urbano e a presença de um setor informal, embora esse setor não estivesse presente no início. Em outras palavras, a concentração de população urbana e a coexistência de um setor urbano informal com outros setores são propriedades emergentes de nosso modelo. Já na figura 3, outra importante característica causada pela dinâmica migratória também é encontrada, seja ela, a renda per capita, a qual aumenta com a fração de população urbana. Esse resultado está de acordo com dados his-

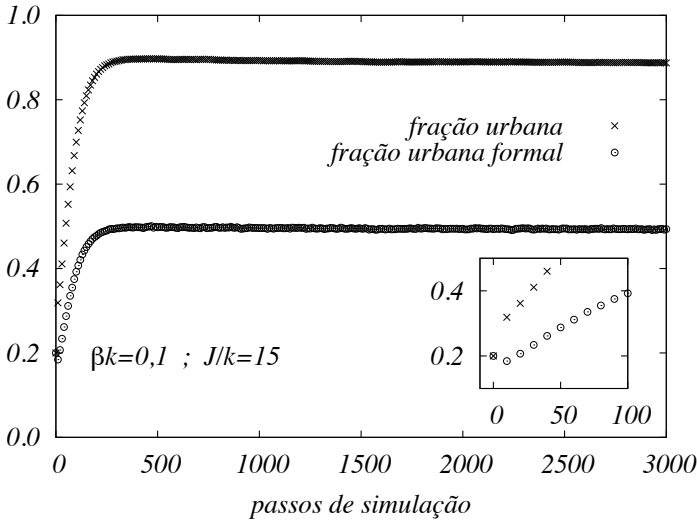


Figura 2 – Distribuição setorial de trabalhadores em função dos passos de simulação.

tóricos nos quais países com alta renda per capita apresentam uma fração menor de sua população em áreas rurais. [22].

Incentivo econômico

Analisaremos agora o caso da migração sem influência social, eq. (3.10), com $J = 0$. Como pode ser visto na figura 4, para valores de βk grandes o suficiente a condição de Harris-Todaro é obtida, seja ela, todas as razões de salários aproximam-se de 1, no equilíbrio. Nessa região, as razões entre as frações de trabalhadores são: $\frac{N_s}{N_f} = 0,2$ e $\frac{N_r}{N_u} = 0,6$ (fig. 5). Esses valores são facilmente obtidos se igualarmos os salários pagos por cada setor, equações (2.50), (2.53) e (2.55), fazendo uso dos preços de equilíbrio e das ofertas agregadas de cada setor, expressos na seção 2.2.1. Note que, para todos os valores de βk , o salário informal é sempre o menor salário de equilíbrio da economia e que o inverso acontece com o setor formal. Também é visto na figura 4 a igualdade entre o salário urbano esperado, definido como $w_u \equiv (N_m w_m + N_s w_s)/(N_f + N_s)$, e o salário rural w_a , para quase todos os

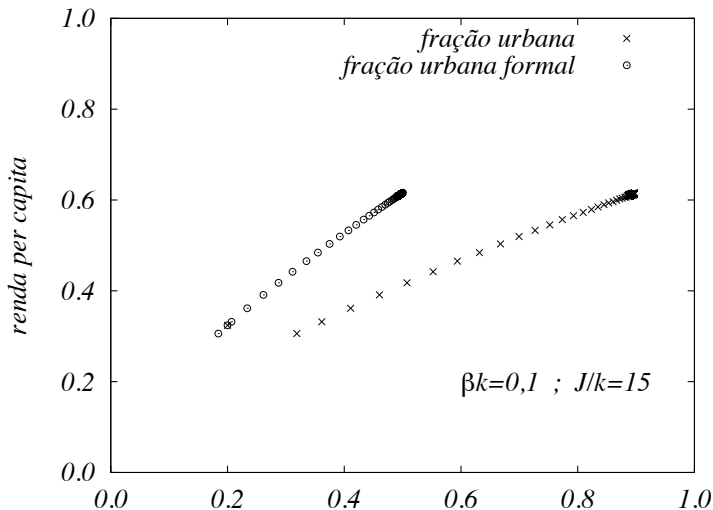


Figura 3 – Renda per capita em unidades de bens manufaturados em função das frações de trabalhadores urbanos e urbanos formais.

valores de βk , exceto para valores muito pequenos. Colocando de maneira diferente, a condição de Harris-Todaro é uma propriedade emergente quando o grau de aleatoriedade nas decisões de migração é suficientemente pequeno, i.e., βk grande.

Incentivo social

Próximo passo é analisar uma dinâmica de migração em que os agentes se baseiam apenas em incentivos sociais. Introduzimos esses incentivos através da interação J entre trabalhadores. Essa influência não precisa vir de vizinhos próximos, no sentido de localização geográfica, mas sim de uma esfera de influência de cada trabalhador. Isto é realizado através do termo $J \sum_j \delta_{\sigma_i^2, \sigma_j^2}$ na equação (3.6), que supõe que esse fator é relevante apenas para o processo migratório, ou seja, entre as áreas urbana e rural. A figura 6 mostra algumas características relacionadas à distribuição de equilíbrio da população, em diferentes setores, obtidas a partir da variação do valor

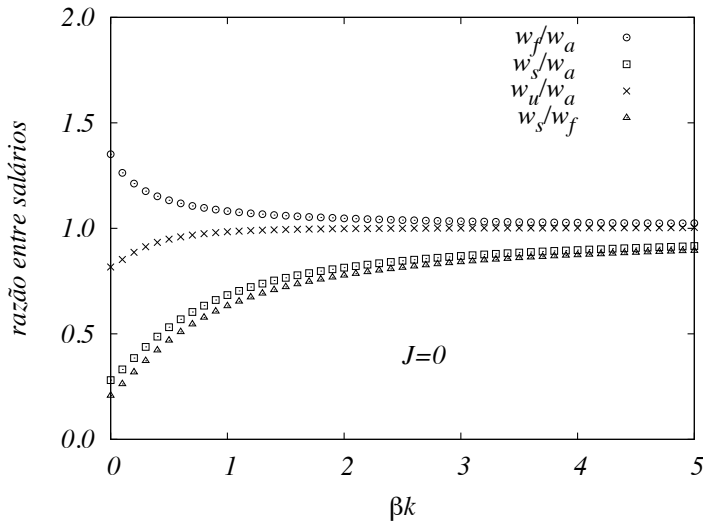


Figura 4 – Razões entre salários, no equilíbrio, em função de βk , sem utilidade social. Definimos $w_f = \bar{w}_m$ e $w_u \equiv (N_m w_m + N_s w_s)/(N_f + N_s)$.

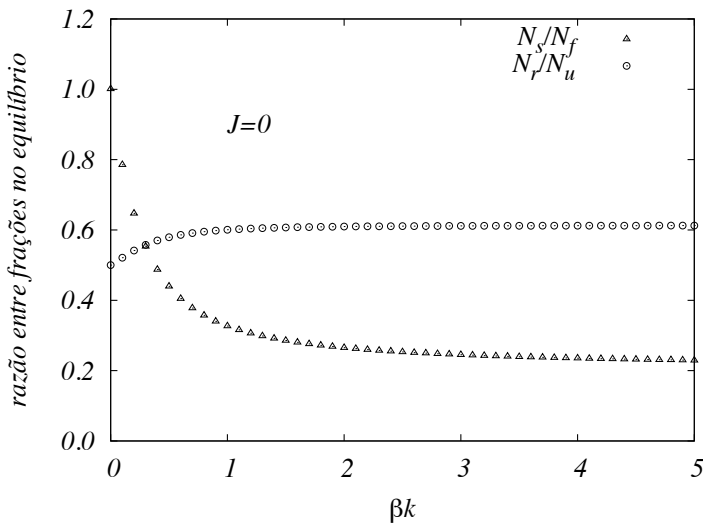


Figura 5 – Assim que a condição de Harris-Todaro é satisfeita, a fração de trabalhadores em diferentes setores vai ao equilíbrio.

do parâmetro βJ , que, para um dado valor de J , representa o grau de aleatoriedade das decisões de migração. Essa simulação foi feita sem considerar a utilidade privada, isto é, usamos $k = 0$. Podemos perceber que, independentemente das condições iniciais da economia (diga-se distribuição de população inicial), a configuração de equilíbrio tem uma maior concentração urbana quanto maior for o valor de βJ . Em outras palavras, a concentração de população urbana aproxima-se rapidamente de 1 quando βJ aumenta, ou seja, quando o grau de aleatoriedade das decisões de migração diminui e, portanto, a população toma decisões muito parecidas. Isto pode ser entendido se mapearmos a hamiltoniana original, eq. (3.10), com $k = 0$, no modelo de Ising [23], resultando em uma nova hamiltoniana (ver apêndice B):

$$\tilde{\mathcal{H}}(S_i) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i S_j + 1), \quad (4.1)$$

com

$$S_i = \begin{cases} +1 & \text{para setor urbano (formal ou informal)} \\ -1 & \text{para setor rural.} \end{cases} \quad (4.2)$$

Esta nova hamiltoniana, degenerada no estado $+1$, nos leva a uma energia livre dependente de um campo magnético, igual a $(\ln 2)/(2\beta)$ (ver apêndice B), que favorece o estado $+1$ neste novo modelo (correspondente aos estados ± 1 na equação (3.10), com $k = 0$). Sendo assim, pode-se concluir que a influência da diferença de salários entre os diferentes setores não é uma condição necessária para o aparecimento de uma concentração de população urbana, no equilíbrio. É importante ressaltar que a razão entre os trabalhadores urbanos formais e informais é sempre 1, independente do valor de βJ , uma vez que a interação social (ou utilidade social) não distingue entre esses dois setores.

Incentivos econômicos e sociais

Uma questão importante a ser determinada é a influência do terceiro setor, urbano informal, no cenário de migração. Analisaremos este efeito através de nosso modelo, com incentivos econômicos e sociais. Os gráficos da figura 7 mostram os salários esperados de equilíbrio variando a interação social. Em

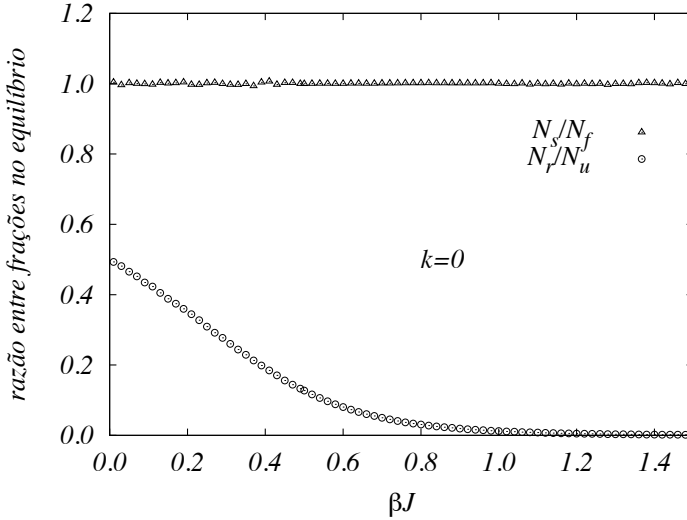
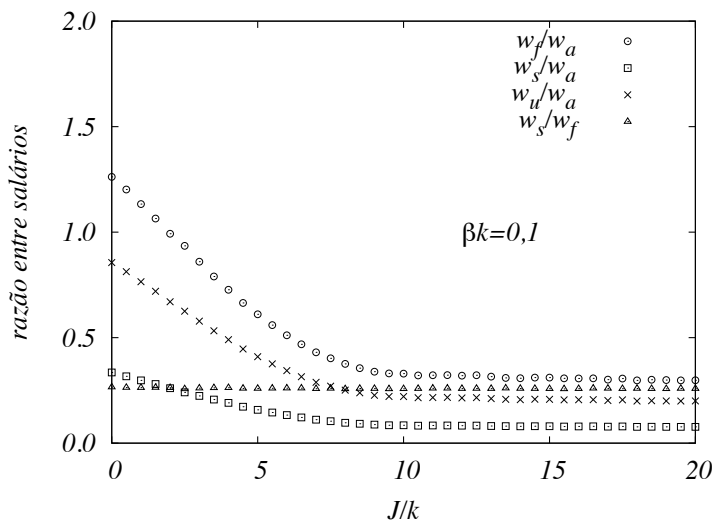


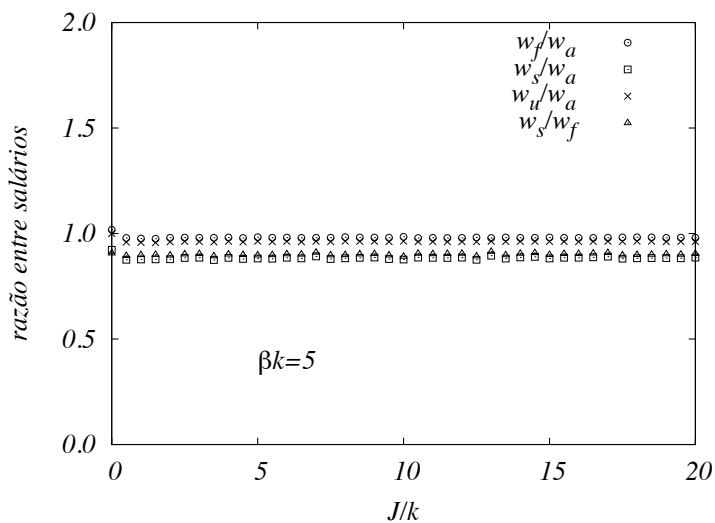
Figura 6 – Frações de populações no equilíbrio em função de βJ , sem considerar a utilidade privada. Definimos $N_u = N_f + N_s$, lembrando que $N_m = (1 - u)N_f$.

(a) mostramos essa variação para uma utilidade privada fraca, i.e., baixo valor de βk , já em (b) mostramos essa variação para uma utilidade privada forte, i.e., alto valor de βk . Do primeiro, nota-se que, para valores de J/k suficientemente grandes, uma condição de Harris-Todaro generalizada é imposta, na qual as razões entre os salários tendem a valores constantes, mas diferentes de um. Além disso, a todo momento, independente do valor de J/k , o sistema mantém a razão entre os salários esperados w_s/w_f constante. Nessa condição de Harris-Todaro generalizada, o salário esperado da área rural é maior que os demais devido à pequena população remanescente nesse setor, conforme nos mostra a figura 8 (a). Por outro lado, para pequenos valores de J/k , o sistema é aleatório, ou ainda sofre de efeitos aleatórios, e os salários são determinados pelos parâmetros econômicos. Para o caso mais relevante, do ponto de vista econômico, i.e., valores altos de βk , figura 7 (b) e 8 (b), percebe-se que o efeito da influência social é pequeno, ao menos quantitativamente, alterando levemente a condição de equilíbrio de Harris-Todaro. Conseqüentemente, o equilíbrio econômico é essencialmente

ditado pela utilidade privada.



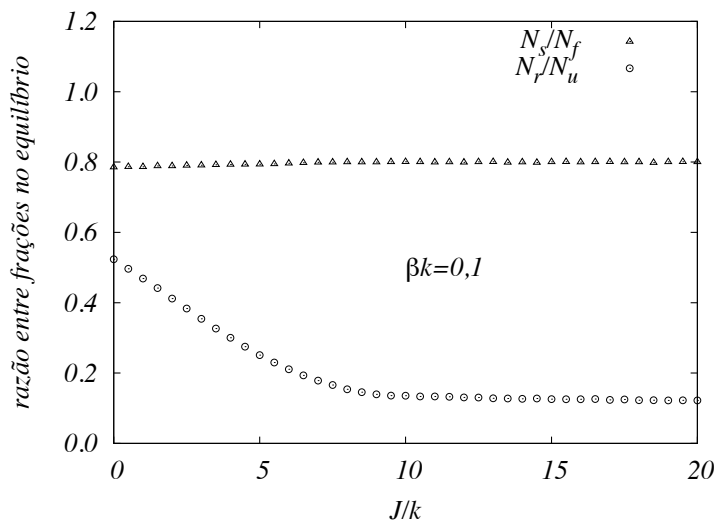
(a)



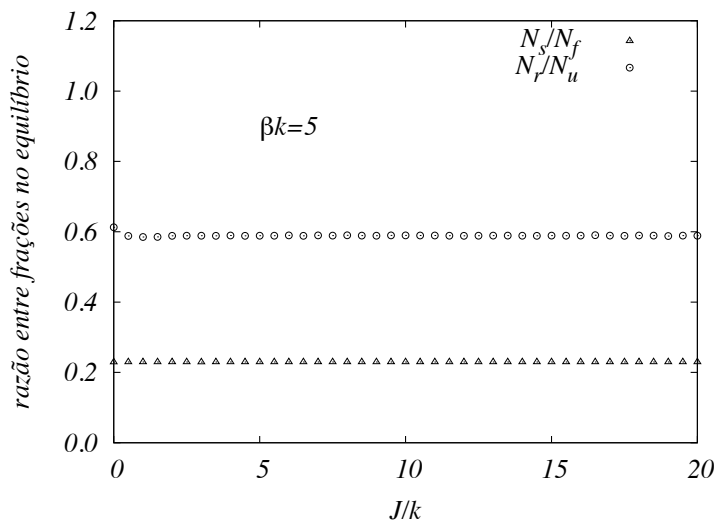
(b)

Figura 7 – Dependência das razões entre salários esperados com a influência social. A figura (a) descreve o comportamento para um termo fraco de incentivo privado, baixo valor de βk , enquanto que em (b) mostramos esse comportamento para um incentivo privado forte.

As razões entre os números de trabalhadores de diferentes setores em função de J/k , para valores alto e baixo de βk , são mostradas na figura 8. Como esperado, o fator de interação social, J/k , não afeta a razão N_s/N_f . Entretanto, para baixos valores de βk , a presença da influência social claramente aumenta o número de trabalhadores urbanos, formais e informais, diminuindo a razão N_r/N_u . Isso acontece ainda que a configuração inicial seja 80% dos trabalhadores localizados na área rural. Ademais, apesar de não estar presente na configuração inicial, o setor urbano informal aparece no estado de equilíbrio e, para valores grandes o suficiente de J/k e pequenos valores de βk , esse setor representa 40% da população total. Nesse intervalo, o setor urbano formal corresponde a 50% de todos os trabalhadores empregados, enquanto o setor rural representa 10% da força total de trabalho. Para valores altos de βk , novamente, a presença de interações sociais não é relevante para a configuração de equilíbrio. Ainda nesse limite, a fração de trabalhadores formais é maior que a de trabalhadores informais e a economia torna-se principalmente urbana.



(a)



(b)

Figura 8 – Dependência das razões entre frações de trabalhadores, no equilíbrio, com a influência social. A figura (a) mostra esse comportamento para um incentivo privado fraco, baixo valor de βk , enquanto que a figura (b) se aplica para incentivo privado forte.

Conclusões

Estudamos a economia de um país em desenvolvimento, o qual apresenta um mercado de trabalho segmentado em setores. Além do modelo “mercado de trabalho dualista” bastante estudado, acrescentamos um terceiro setor na área urbana que, diferentemente do que propõem 4, é considerado como um setor preferível, conforme indicam os estudos empíricos de 5. Nosso tratamento contrasta com a possibilidade de considerar o setor urbano informal como uma reserva de mão de obra, ocupado por agentes que não conseguem emprego no setor urbano formal. O modelo de três setores foi pouco estudado devido a sua complexidade analítica, uma vez que o cenário econômico varia durante o processo de migração, motivo pelo qual utilizamos um procedimento de simulação computacional para estudá-lo. A partir da simulação, observamos um crescimento da população urbana acompanhado pelo aumento da renda per capita. Esse resultado está de acordo com dados históricos, nos quais países com alta renda per capita apresentam uma pequena população na área rural [22]. A partir da simulação, obtivemos a condição de equilíbrio de Harris-Todaro para os casos em que as diferenças de salários entre setores foram consideradas, ou seja, observamos que houve um fluxo migratório entre setores enquanto os salários esperados não se equalizaram. Ao final, percebe-se uma distribuição de população predominantemente urbana. Além disso, o setor urbano informal surge do modelo mesmo sem existir na configuração inicial, ou ainda, quando tratamos o modelo com apenas incentivos sociais. Observamos, também da simulação, a condição de Harris-Todaro generalizada, i.e., quando acrescentamos incentivos sociais no processo migratório, as razões entre os salários esperados dos diferentes

setores mantinham-se constantes, porém, diferentes de um. Entretanto, a introdução de incentivos sociais não muda qualitativamente o panorama do processo de migração e a situação de equilíbrio corresponde à observada no modelo com incentivos privados apenas.

Perspectivas futuras

Podemos pensar em expandir o estudo que fizemos incluindo novas variáveis econômicas em nosso modelo. Por exemplo, a todo momento supomos que a taxa de desemprego no setor urbano é fixa. Entretanto, o estudo da referência 4 sugere que a interação social possa alterar a taxa de desemprego no setor formal. Além disso, podemos analisar os efeitos causados por redes sociais maiores para cada agente, implementando interações sociais entre *segundos vizinhos*, *terceiros vizinhos* e assim por diante.

Outra proposta de expansão deste estudo é usar redes sociais [24] para introduzir as conexões sociais, na intenção de que esta represente a realidade de forma mais adequada. Iniciamos essa proposta usando uma rede de mundo pequeno do tipo Barabási-Albert [25], ao invés da rede quadrada usada neste estudo. Contudo, por apresentar resultados inesperados, faz-se necessário um entendimento profundo acerca dessa nova rede, para que possamos interpretar os resultados.

Parte II

Transições de fase topológicas em
supercondutores: técnicas da
informação quântica

Introdução

A física do estado sólido concentra-se em estudar as propriedades da matéria. Dizemos que diferentes propriedades caracterizam diferentes fases da matéria, as quais estão intimamente relacionadas com o ordenamento dos átomos no material. Não é preciso ser um físico para se conhecer as famosas fases sólida, líquida e gasosa da matéria. Porém, um estudo mais aprofundado permite-nos compreender outras fases como: magnética, superfluido, condutora, supercondutora, plasma, condensado de Bose-Einstein e cristais líquidos. Sem esquecer de outras fases como: ferromagnética, antiferromagnética e ferrimagnética; até mesmo fases intermediárias como o gel, entre líquida e sólida.

Com ressalvas, transições entre as diversas fases resultam de pequenas variações nos parâmetros termodinâmicos que implicam em significativas mudanças nas propriedades do sistema. O conjunto de parâmetros que implica em tais mudanças é ilustrado por um diagrama de fases. Por exemplo, a figura 9 (lado esquerdo) mostra um diagrama de fases qualitativo de um material genérico – e também da água com seu comportamento anômalo –, dado em função dos parâmetros pressão e temperatura, no qual as linhas representam limites entre as diferentes fases.

Na sua grande maioria, as transições de fase são caracterizadas por um parâmetro de ordem; uma grandeza nula na fase desordenada e não nula na fase ordenada. Esse comportamento está ilustrado no gráfico de um material ferromagnético qualquer mostrado na figura 9 (lado direito), nesse caso podemos ver que o parâmetro de ordem é a magnetização e a temperatura é o parâmetro termodinâmico que variamos para transitar de uma fase para

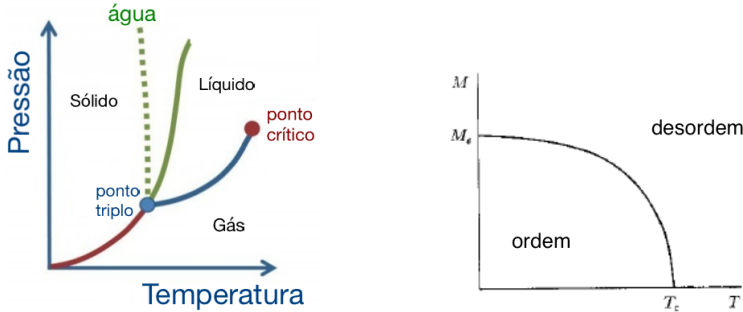


Figura 9 – (lado esquerdo) Diagrama de fases qualitativo mostrando a pressão em função da temperatura. As linhas representam limites entre as diferentes fases. (lado direito) Comportamento típico de um parâmetro de ordem. A figura mostra a magnetização – parâmetro de ordem – em função da temperatura de um material ferromagnético qualquer.

outra. Outros exemplos de parâmetros de ordem são: a diferença entre as densidades da água nas suas formas líquida e gasosa ($\rho_G - \rho_L$); ou ainda, na transição condutor-supercondutor o parâmetro de ordem é o *gap*¹ de energia que aparece na estrutura de bandas.

A teoria de Lev Landau [26, 27], ou apenas teoria de Landau, descreve matematicamente as transições de fase (de segunda ordem) nos materiais e é constituída de apenas duas imposições: (a) que a energia livre seja uma função analítica do parâmetro de ordem e (b) que ela obedeça as simetrias do sistema. Na teoria de Landau diferentes fases possuem diferentes simetrias, i.e., diferentes ordenamentos dos átomos. Uma transição para a fase ordenada (e.g., cristalina ou magnética) está vinculada à quebra de alguma simetria do sistema; em cristais quebra-se a simetria contínua de translação e rotação que há no estado líquido; em materiais magnéticos quebra-se a simetria de rotação dos spins e a simetria de reversão temporal (TRS), na qual $t \rightarrow -t$ e $S \rightarrow -S$, sendo t e S as variáveis tempo e spin, respectivamente.

Isolantes topológicos – Apesar de suas limitações, até pouco tempo a teoria de Landau descrevia muitas ordens possíveis da matéria e muitas pos-

¹ A palavra *gap* que traduzida do inglês significa espaço, lacuna, ou abertura, será usada na sua forma original. Neste contexto ela significa um espaço vazio entre duas bandas de energia.

síveis transições de fase. Há poucos anos (desde os anos 80 [28]) um novo conjunto de fases da matéria foi descoberto. Essas fases não apresentam um parâmetro de ordem e as diferenças entre elas não estão necessariamente vinculadas às simetrias do sistema. Materiais com tal comportamento topológico apresentam propriedades de borda diferentes das propriedades no interior. Em geral, esses materiais mostram-se isolantes no seu interior e bons condutores na borda, e são chamados de materiais topológicos [29, 30]. Mais à frente, discutiremos o aparecimento de outras fases topológicas.

Em matemática, a grosso modo, a palavra topologia está vinculada ao número de “buracos” que a geometria de um objeto sólido apresenta. Na física, uma fase topológica está relacionada ao comportamento da função de onda eletrônica, a qual assemelha-se com as tais geometrias de buracos da matemática. Nos capítulos seguintes discutiremos melhor esse comportamento. Desde a sua descoberta, tem-se visto um aumento significativo nas pesquisas a respeito desses novos materiais. Vários experimentos têm sido propostos e inúmeras evidências têm sido encontradas [31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49].

Penso que a maneira mais fácil de perceber o comportamento dos materiais topológicos seja através do efeito Hall quântico – se aplicarmos um campo magnético muito intenso, perpendicular ao plano atravessado por uma corrente, sob condições de temperaturas muito baixas, a condutância longitudinal torna-se nula quando a condutância de Hall (transversal) assume platôs em e^2/h [50]. Por isso, dedico o primeiro capítulo desta tese para descrever em detalhes esse comportamento. Observa-se que a condutância de Hall é bastante robusta, ou seja, não depende nem dos detalhes geométricos do sistema, nem das imperfeições do material (impurezas) e nem do tipo de material. Um portador de carga nesses materiais pode possuir apenas estados de energia discretos e de valores iguais aos níveis de Landau. Podemos pensar na quantização do efeito Hall como órbitas eletrônicas de valores discretos, resultantes da força de Lorentz, dado um campo magnético aplicado. As órbitas eletrônicas assemelham-se às órbitas atômicas e comportam-se igualmente a um material isolante. Nesse caso simplificado, os níveis de Landau fazem o papel da estrutura de bandas do material e a resistividade de Hall apresenta-se inversamente proporcional ao número

de níveis de Landau ocupados. O comportamento topológico desses materiais também pode ser compreendido quanticamente através do espectro das bandas de energia. Enquanto o *gap*, entre as bandas de condução e de valência existir, o sistema permanece na mesma fase topológica. Dizemos que o sistema é invariante sob transformações adiabáticas no hamiltoniano, i.e., transformações suaves no hamiltoniano que preservam o *gap* de energia.

Descobriu-se então que uma superfície, nas circunstâncias do efeito Hall quântico, apresenta uma corrente eletrônica em suas extremidades, ou seja, o material passa a ser isolante no interior e condutor na borda [51, 52] (um isolante topológico). Assim como a resistência de Hall, a corrente nos isolantes topológicos é robusta quanto aos detalhes microscópicos do material. Fazendo uma analogia ao que se conhece classicamente, pode-se pensar na corrente formada ao redor da superfície como órbitas que “quicam” quando esbarram na extremidade, de modo que sempre deslocam-se na mesma direção, veja figura 10 (lado esquerdo). Quanticamente, esse comportamento revela-se através da estrutura de bandas. Existe pelo menos um estado de energia que liga a banda de valência com a banda de condução, ou melhor, um estado que invade o *gap* de energia, chamado de estado protegido ou estado de borda, veja figura 10 (lado direito).

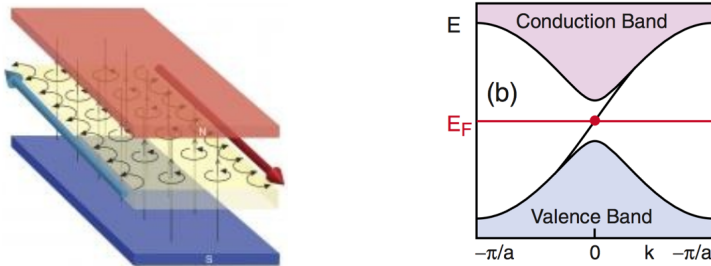


Figura 10 – (lado esquerdo) Representação clássica dos estados de borda. A figura mostra ilustra um plano bidimensional entre a junção de dois materiais, onde o material apresenta propriedades topológicas. Esse plano é atravessado por um campo magnético e o estado topológico é caracterizado pela corrente que se forma em sua extremidade. (lado direito) Representação quântica de um sistema topológico, através da estrutura de bandas, mostrando o estado de borda, ou estado protegido, identificado pela linha que liga a banda de condução à banda de valência.

Outros materiais topológicos – Hoje o comportamento do efeito Hall quântico é bem compreendido, apesar de exigir cálculos extensos que descrevem mudanças na função de onda de Bloch [53, 54]. Contudo, foi observado em certos sistemas um efeito Hall quântico fracionário, o qual não só exige a presença de um campo magnético para existir mas também interações. Esse efeito baseia-se em cargas fracionárias, formando quase-partículas, as quais podem ser consideradas como uma combinação de carga eletrônica e fluxo quântico magnético [55]. Hoje aceita-se que esses efeitos são manifestações de fases topológicas quânticas, que quebram a TRS.

Quando um elétron move-se em uma corrente, mesmo sem a aplicação de um campo magnético esse elétron pode sentir uma força para a direita ou para a esquerda de acordo com seu spin, se um campo elétrico perpendicular à corrente é aplicado [56]. Esse efeito origina-se do acoplamento entre o movimento do elétron e seu spin, um efeito relativístico da mecânica quântica conhecido como acoplamento spin-órbita, chamado de efeito Hall quântico de spin. Nesses materiais, os spins dos elétrons condutores estão presos (associados) aos seus momentos. Esse tipo de material possui TRS, sendo assim, obedecem à degenerescência de Kramers, ou seja, para uma dada energia, sempre existem pares de estados que possuem momentos e spins opostos.

Conforme bem descreve Shen[57], um ano após a descoberta do efeito Hall clássico [58], o mesmo descobriu que esse efeito pode aparecer em materiais ferromagnéticos, ou mesmo em materiais paramagnéticos. Pois bem, não se pode deixar de mencionar o efeito Hall anômalo, que ocorre nos materiais condutores ferromagnéticos no estado do efeito Hall quântico. Quando esses materiais possuem magnetização, ela causa um desbalanço no nível de energia dos elétrons, resultando em correntes de carga ou de spin (efeito de Hall anômalo).

O hélio líquido (^3He) apresenta duas fases supercondutoras (SC) diferentes a baixas temperaturas – na verdade são fases superfluidas similares aos SC –, caracterizadas por emparelhamentos fortes e fracos nos pares de Cooper, dentro da teoria BCS. A teoria da supercondutividade para estados de spin tripleto foi desenvolvida por Balian e Werthamer[59]. Eles observaram que todos os pares de Cooper tinham emparelhamento tipo onda- p

($l = 1$) e estados de spin tripleto. A fase de emparelhamento fraco (de spins iguais, ou fase-A) é topologicamente não trivial e pode apresentar estados de borda [60]. Os aspectos topológicos das fases de emparelhamentos forte e fraco foram discutidos em detalhes por Volovik[61].

Supercondutividade com topologia não-trivial ² também pode ser obtida de diferentes maneiras [32]. Em semicondutores com acoplamento spin-órbita (SO) do tipo Rashba a topologia não-trivial aparece quando a supercondutividade é induzida e um termo de Zeeman é adicionado [62, 63]. No caso da fase normal já ser topologicamente não-trivial, um supercondutor topológico (TSC) pode ser obtido se a supercondutividade é induzida por efeito de proximidade [64, 65].

Falando em supercondutores, o hamiltoniano de um sistema SC pode ser propiciamente escrito na forma das equações de Bogoliubov-de Gennes (ou apenas Bogoliubov), como veremos no capítulo 8. Sabe-se que essas equações para supercondutores e superfluidos têm uma estrutura matemática idêntica às equações de Dirac para isolantes topológicos. Schnyder et al.[66] estudaram sistematicamente as fases topológicas em isolantes e supercondutores para sistemas fermiônicos não interagentes. Equações de Bogoliubov-de Gennes têm simetria partícula-buraco (PHS), enquanto que a equação de Dirac tem TRS. Como veremos adiante, supercondutores tripleto são potenciais candidatos para TSC.

Transições de fase topológicas – No contexto das transições de fase topológicas, é possível relacionar uma quantidade invariante em cada fase, chamada de invariante topológico [31, 32, 34, 35, 36]. Veremos no capítulo 7 que a função de onda de Bloch ao longo da primeira zona de Brillouin, quando somada sobre todas as bandas, resulta em um invariante topológico chamado de número de Chern. Nos isolantes topológicos em que o efeito Hall quântico está presente, exibem uma condutividade Hall de carga quantizada e proporcional ao número de Chern das bandas ocupadas [31, 32, 67].

Embora uma classificação completa das fases topológicas ainda esteja longe de ser alcançada, passos importantes têm sido dados nessa direção.

² Um material topológico, quando na sua fase normal, é chamado de topologicamente trivial.

Em particular, no contexto de sistemas não-interagentes com *gap* uma classificação completa foi estabelecida [68].

No caso de certa classe de isolantes, tais invariantes podem ser associados diretamente com quantidades físicas, como a condutividade de Hall quantizada [67]. Além do número de Chern, outras assinaturas de fases topológicas têm sido estudadas, tais como: a degenerescência do estado fundamental sujeita às fronteiras do sistema [28], a existência de estado(s) de borda protegido(s) [69] e o número de enrolamento [70].

Métodos da informação quântica A falta de um parâmetro de ordem nos sistemas topológicos faz com que as transições entre as diferentes fases não possam ser descritas pela teoria de Landau e traz dificuldades na detecção de tais fases. Como veremos, diferentes aproximações e métodos têm sido propostos para melhor compreendê-las, tais como, a detecção do acoplamento dos estados de borda, o emaranhamento e a entropia do emaranhamento topológica (TEE).

Em quântica, um estado emaranhado é aquele no qual duas partículas não podem ser descritas pelo produto de dois estados. A interação entre a informação quântica e a física da matéria condensada foi estabelecida através do uso do emaranhamento, como uma medida para o comportamento de sistemas de muitos corpos [71]. Um de tais tópicos é justamente o uso do emaranhamento no estudo de transições de fase quânticas à temperatura nula [72]. Sabe-se hoje que fases topológicas são fases não triviais da matéria, caracterizadas por correntes robustas no entorno do material, seja ele supercondutor ou isolante. Podemos separar as fases topológicas em dois tipos: fase com ordem topológica e fase topológica protegida por simetria [73]. As fases topológicas protegidas por simetria, como o próprio nome já diz, são fases nas quais as correntes eletrônicas existentes são bastante robustas, portanto com pouca dispersão, em função da presença de alguma simetria. Uma discussão sobre os estados de borda desses sistemas encontra-se na referência 74 e uma classificação dessas fases topológicas de acordo com suas simetrias pode ser vista na referência 75. Por outro lado, as fases com ordem topológica são caracterizadas por emaranhamentos globais e correlações de longo alcance [76]. Os estados de borda desses sistemas são

discutidos por Wen[77]. Entende-se por emaranhamentos globais os estados quânticos que apresentam emaranhamento de longo alcance. Medidas de emaranhamento vêm sendo usadas para provar propriedades de estados de muitos corpos[71] e para detectar transições de fase quânticas[78]. Sendo assim, esta inter-relação tem sido explorada na reanálise de vários modelos já com soluções analíticas ou numéricas, usando diferentes medidas de informação para entender melhor o fundamento da física [79, 80].

A falta de um parâmetro de ordem e a impossibilidade de usar os argumentos da quebra de simetria de Landau tornam as fases topológicas um dos maiores exemplos no qual medidas de emaranhamento trazem novos *insights* para a teoria, que dificilmente seriam alcançados por métodos tradicionais. Vários exemplos desse tipo de transição têm chamado a atenção, tais como efeito Hall quântico, líquido de spin, isolantes topológicos e TSC.

Para além deste trabalho, outros sistemas que mostram fases topológicas também foram estudados usando técnicas da informação quântica, como partículas de spin- $\frac{1}{2}$ em um torus [81], no qual foi mostrado que somente a entropia do emaranhamento topológico distingue a transição de fase topológica de uma transição de fase quântica padrão, apesar de várias medidas detectarem as transições. Transições de Kosterlitz-Thouless, na falta de um parâmetro de ordem, foram calculadas com sucesso usando a susceptibilidade da fidelidade (derivada da fidelidade em relação a um parâmetro externo) de uma cadeia de spin XXZ [82, 83]. Da mesma forma, um estudo do modelo assimétrico de Hubbard unidimensional mostrou que diferentes regimes de escala podem ser usados para diferenciar duas fases [84]. O uso recente da fidelidade e da susceptibilidade da fidelidade foi feito para estudar um SC sem spin de uma dimensão com férmions de Majorana no fim da cadeia [85]. O modelo de *toric code* e o modelo quântico de oito vértices foram considerados na referência 86, nos quais uma divergência na susceptibilidade da fidelidade foi encontrada. Além disso um claro pico foi encontrado na transição topológica no modelo de spin favo-de-mel de Kitaev [83]. No caso do modelo de Hubbard foi mostrado que a susceptibilidade da fidelidade satisfaz uma hiperescala [87] e no modelo favo-de-mel de Kitaev foi encontrado um comportamento diferente na escala com a temperatura em

diferentes fases [88] e uma fidelidade divergente por sítio de rede, mostrando que uma medida local também possibilita detectar o regime de emaranhamento global [89], assim como em outros sistemas [90, 91, 92, 93]. Para um sistema bipartido, além da entropia de von Neumann e quantidades relacionadas [94], outras medidas de informação como a simultaneidade [95], a informação mútua [96, 97], a negatividade [98], ou o Meyer-Wallach [99] e as medidas de emaranhamento globais generalizadas [100, 101] têm sido consideradas. O efeito da estatística quântica tem sido analisado para elétrons livres [102] e bósons [103], e para elétrons em um supercondutor BCS [104]. Um estudo formal que estabelece a conexão entre transições de fase quânticas e as quantidades termodinâmicas relevantes pode ser encontrado nas referências 105 e 106.

Neste trabalho aplicamos várias medidas de informação quântica (descritas no capítulo 9) para estudar as fases e as transições topológicas em um TSC. Em particular, consideramos a entropia, o emaranhamento e a fidelidade, bem como os respectivos espectros, para estudar essas transições. Veremos ao longo da tese o que cada uma dessas medidas representa e sua utilização na detecção de transições de fase. Consideramos um SC bidimensional com um acoplamento SO do tipo Rashba que, em geral, mistura pares singleto e tripleto. Além disso, um termo de Zeeman foi adicionado, o qual nos leva a um diagrama de fases mais rico [62]. Nesse contexto, diferentes fases topológicas serão caracterizadas pelo número de Chern, estados de borda sem *gap*, número de enrolamento [49, 62] e entropia do emaranhamento topológica [107, 108]. Mostramos também uma análise mais detalhada do espectro e como isso pode melhorar o entendimento sobre as transições. Além disso, analisamos as contribuições extensivas e não extensivas para a TEE em diferentes geometrias: um subsistema de um sistema infinito e uma metade de um cilindro. Mostramos que, embora a TEE seja nula por todo o espaço de parâmetros, a escolha de uma geometria apropriada (no caso, cilíndrica) permite a identificação de várias fases topológicas, através da relação do número de estados de borda, em concordância com outras assinaturas como o número de Chern e o número de enrolamento.

Efeito Hall e o número de Chern

7.1 Efeito Hall clássico

Segundo a teoria de Drude[109], um material condutor possui elétrons movendo-se livremente. Considerando esse material bidimensional, um campo elétrico $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{i}}$, ao longo do eixo x , induz uma densidade de corrente eletrônica nessa superfície

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \rho \hat{\mathbf{j}} \\ E_x \hat{\mathbf{i}} &= \rho_x j_x \hat{\mathbf{i}}, \end{aligned} \quad (7.1)$$

sendo ρ_x a resistividade do material e j_x a densidade de corrente, ambas definidas na direção x .

Agora se aplicarmos um campo magnético $\mathbf{B} = B_z \hat{\mathbf{k}}$ perpendicular à esse plano, obtemos o aparecimento de uma voltagem, V_y , transversal à corrente chamada voltagem de Hall (veja figura 11, lado esquerdo). Associado ao

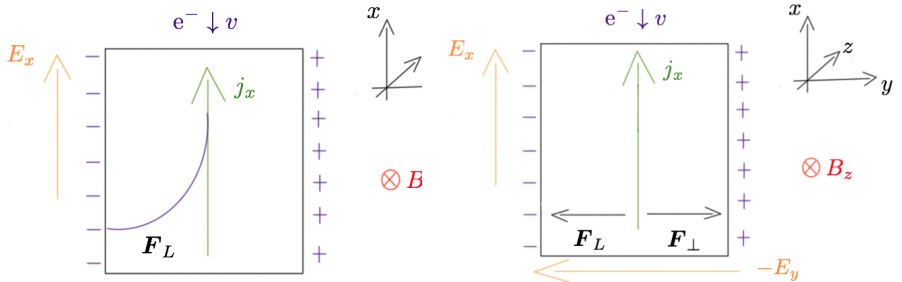


Figura 11 – Aparecimento da voltagem Hall – Efeito Hall clássico.

aparecimento dessa voltagem está um campo elétrico $\mathbf{E}_y = -E_y \hat{\mathbf{j}}$ da forma (veja figura 11, lado direito):

$$V_y = E_y L_y, \quad (7.2)$$

sendo L_y a largura da superfície na direção y . Note que, se o portador de carga fosse positivo, supondo essa mesma corrente $j_x \hat{\mathbf{i}}$, então o campo elétrico induzido na direção y teria sentido oposto, sendo assim, esse experimento possibilita verificar o sinal do portador de carga da corrente elétrica. Uma vez que o aparecimento do campo elétrico E_y está associado a densidade de corrente na direção x , o campo elétrico apresenta componentes nas duas direções, $\mathbf{E} = \mathbf{E}_x + \mathbf{E}_y = E_x \hat{\mathbf{i}} - E_y \hat{\mathbf{j}}$, e a equação (7.1) assume a forma tensorial

$$\begin{pmatrix} E_x \\ -E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_x \\ j_y \end{pmatrix} \quad (7.3)$$

em que $\rho_{xx} = \rho_{yy} = \rho_x$ é a resistividade do material considerando-o com propriedades isotrópicas e $\rho_{xy} = -\rho_{yx} \equiv \rho_H^1$ é chamada de resistividade de Hall.

Sabemos que a densidade de corrente no sentido positivo de x é dada por

$$j_x \hat{\mathbf{i}} = nev_x \hat{\mathbf{i}}, \quad (7.4)$$

sendo n a densidade de carga eletrônica, $e = 1,6 \times 10^{-19} C$ a carga do elétron e v_x o módulo da velocidade de deslocamento eletrônico, $\mathbf{v} = -v_x \hat{\mathbf{i}}$. A voltagem de Hall que surge no sistema é consequência da força de Lorentz que atua na corrente j_x , seja ela,

$$\mathbf{F}_L = -ev_x B_z (-\hat{\mathbf{i}} \times \hat{\mathbf{k}}) = -\frac{1}{n} j_x B_z \hat{\mathbf{j}}. \quad (7.5)$$

Conforme os elétrons são desviados eles acumulam-se na borda do material gerando o campo elétrico transversal $\mathbf{E}_y = -E_y \hat{\mathbf{j}}$. Haverá um momento

¹ Note que a densidade de corrente $+j_x \hat{\mathbf{i}}$, por conta do campo magnético aplicado, gera um campo elétrico $-E_y \hat{\mathbf{j}}$ (relacionados por ρ_{yx}). Por outro lado, se a densidade de corrente inicial fosse $+j_y \hat{\mathbf{j}}$ geraria um campo elétrico $+E_x \hat{\mathbf{i}}$ (relacionados por ρ_{xy}). Por isso a propriedade $\rho_{xy} = -\rho_{yx}$.

no qual a força contrária sentida pelos elétrons devido a esse novo campo elétrico gerado, $\mathbf{F}_\perp = q\mathbf{E} = eE_y\hat{\mathbf{j}}$, será tão forte quanto a força de Lorentz, tal que

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_\perp &= -\mathbf{F}_L \\ E_y\hat{\mathbf{j}} &= \frac{1}{ne}j_xB_z\hat{\mathbf{j}}. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Nesse momento não existirá mais corrente na direção y , $j_y = 0$, e as equações (7.3) assumem a forma

$$E_x = \rho_x j_x \quad (7.7)$$

$$-E_y = \rho_{yx} j_x, \quad (7.8)$$

com

$$\rho_{yx} = -\frac{1}{ne}B_z \quad \text{ou} \quad \rho_H = \frac{1}{ne}B_z. \quad (7.9)$$

Por outro lado, a teoria de Drude nos mostra uma resistividade longitudinal do tipo

$$\rho_x = \frac{m}{ne^2\tau}, \quad (7.10)$$

sendo $m = 511 \text{ keV}/c^2$ a massa do elétron e τ o tempo de relaxação do espalhamento por impurezas. É importante notar que na formulação tensorial a resistividade e a condutividade não têm uma relação inversa simples, mas sim

$$\rho_x = \frac{\sigma_x}{\sigma_x^2 + \sigma_H^2} \quad \text{e} \quad \rho_H = -\frac{\sigma_H}{\sigma_x^2 + \sigma_H^2}. \quad (7.11)$$

7.2 Efeito Hall quântico

Descobriu-se, experimentalmente, que esse mesmo sistema, no qual aparece o efeito Hall, quando submetido a baixas temperaturas e fortes campos

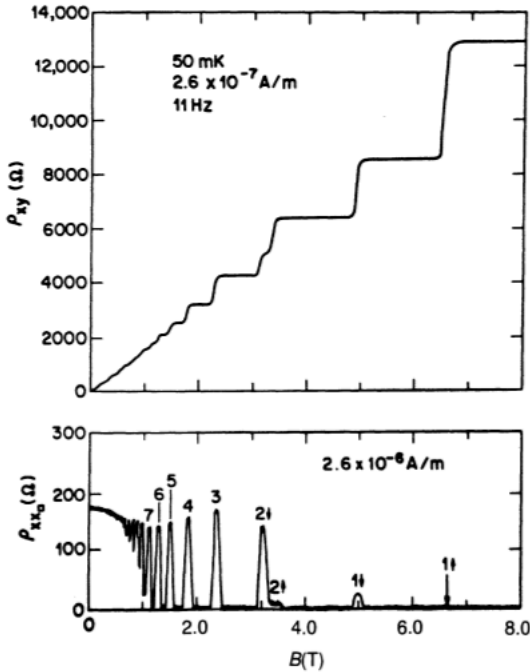


Figura 12 – Efeito Hall quântico

magnéticos a resistividade do material e a resistividade de Hall, de maneira geral, apresentam plateaus conforme mostra a figura 7.2.

Observou-se então que, aumentando o campo magnético aplicado, a resistividade de Hall assume valores discretos e muito bem definidos, precisamente

$$\rho_H = \frac{h}{ne^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.12)$$

sendo n um número inteiro e h a constante de Planck. Mais do que isso, enquanto ρ_H assume um desses valores a resistividade do material vai a zero.

Como se não bastasse, voltando na equação (7.11) conclui-se que quando $\rho_x = 0$ e ρ_H finito então, obrigatoriamente, $\sigma_x = 0$, uma vez que $\sigma_x \rightarrow \infty$ resultaria em $\rho_x = \rho_H \rightarrow 0$. Em outras palavras, quando a resistividade de Hall atinge valores aproximadamente constantes o material comporta-se

como se tivesse resistividade e condutividade longitudinais nulas. Na verdade temos que olhar para a condutividade e resistividade nas suas formas tensoriais (eq. (7.3)), sendo que a matriz resistividade é inversa à matriz condutividade. Podemos observar também que nesse regime a condutividade de Hall e a resistividade de Hall são inversamente proporcionais e assumem valores discretos, tal que

$$-\sigma_H = \frac{1}{\rho_H} = n \frac{e^2}{h}. \quad (7.13)$$

Com a finalidade de compreender melhor o efeito Hall quântico, começamos por analisar o comportamento quântico de um elétron sob a ação de um campo magnético. Nessa análise seguiremos o desenvolvimento feito por Yoshioka[110].

7.2.1 Elétron livre sob campo magnético

Mecânica clássica – Considere um elétron (carga $e = -1,6 \times 10^{-19}C$ e massa $m_e = 511 \text{ keV}/c^2$) que se move no plano xy , bidimensional com $\mathbf{r} = r_x \hat{\mathbf{i}} + r_y \hat{\mathbf{j}}$ e $\mathbf{v} = v_x \hat{\mathbf{i}} + v_y \hat{\mathbf{j}}$, e um campo magnético atuante no eixo z , $\mathbf{B} = B_z \hat{\mathbf{k}}$. Sabe-se que nesse sistema a lagrangeana, o hamiltoniano, o momento canônico e o momento angular no eixo z , respectivamente, são dados por

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} m_e v^2 + e \mathbf{A} \mathbf{v}, & H &= \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} - e \mathbf{A})^2, \\ \mathbf{p} &= m_e \mathbf{v} + e \mathbf{A}, & \text{e} & \quad L_z = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z, \end{aligned} \quad (7.14)$$

sendo \mathbf{A} o potencial vetor que corresponde ao campo magnético \mathbf{B} , uma vez que $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$. Resolvendo as equações de movimento, a solução desse sistema é um movimento circular (ciclotron) do elétron, de raio r_0 , em torno de um ponto arbitrário no espaço bidimensional, $\mathbf{R} = R_x \hat{\mathbf{i}} + R_y \hat{\mathbf{j}}$ (veja figura 13). A coordenada espacial desse movimento pode ser escrita como

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + r_0 [\cos(\omega_c t) \hat{\mathbf{i}} + \sin(\omega_c t) \hat{\mathbf{j}}], \quad (7.15)$$

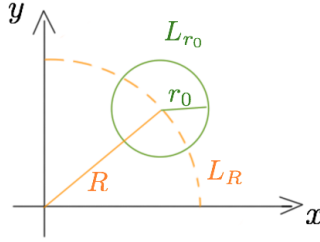


Figura 13 – Momento angular generalizado de uma partícula com movimento cíclotron bidimensional, sendo $L_z = L_R - L_{r_0} = (eB_z/2) (R^2 - r_0^2)$.

sendo ω_c a frequência cíclotron angular do movimento circular.

Se adotarmos a escolha de *gauge* simétrica para o potencial vetor, seja ela,

$$\mathbf{A} = -\frac{B_z}{2}r_y \hat{\mathbf{i}} + \frac{B_z}{2}r_x \hat{\mathbf{j}}, \quad (7.16)$$

encontramos as seguintes soluções para o momento angular no eixo z e para a energia cinética de rotação

$$L_z = \frac{eB_z}{2} (R^2 - r_0^2), \quad (7.17)$$

$$E = \frac{1}{2}m_e r_0^2 \omega_c^2. \quad (7.18)$$

Note que a energia não depende da posição do sistema de coordenadas, \mathbf{R} . Note também que o momento angular leva uma dependência do centro de coordenadas e do raio da órbita separadamente, e que as soluções subtraem-se (veja figura 13). Por fim, note que a energia depende do raio r_0 e da frequência cíclotron ω_c , que por sua vez dependem do campo magnético B_z , mas não depende da escolha de *gauge*, eq. (7.16).

Mecânica Quântica – Em mecânica quântica, o hamiltoniano que descreve o sistema pode ser obtido a partir do caso clássico transformando-o

em operador, tal que

$$H = \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 = \frac{1}{2m_e} \boldsymbol{\pi}^2, \quad (7.19)$$

sendo \mathbf{p} o operador momento canônico e $\boldsymbol{\pi}$ o chamado operador momento dinâmico. Através das relações de comutação, o operador hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$H = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \quad (7.20)$$

sendo $a = a(\boldsymbol{\pi})$ e $a^\dagger = a^\dagger(\boldsymbol{\pi})$ os operadores de aniquilação e criação, respectivamente. Esse hamiltoniano tem a mesma estrutura algébrica do oscilador harmônico 1D. As energias desse sistema são dadas por

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.21)$$

Essas energias são chamadas de níveis de Landau. Assim como na solução clássica, como era de se esperar, essas energias também não dependem do centro de coordenadas desse movimento, $\mathbf{R} = R_x \hat{\mathbf{i}} + R_y \hat{\mathbf{j}}$, o que torna os níveis de Landau degenerados em relação a \mathbf{R} .

Se adotarmos a mesma escolha de *gauge* simétrica para o potencial vetor descrita na equação (7.16), o momento angular na direção z é escrito na forma

$$L_z = \hbar(a^\dagger a - b^\dagger b), \quad (7.22)$$

sendo $b = b(\mathbf{R})$ e $b^\dagger = b^\dagger(\mathbf{R})$ os operadores de aniquilação e criação, respectivamente. Obviamente que os valores possíveis para o momento angular da direção z são

$$l_z = \hbar(n - m), \quad m = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (7.23)$$

Assim, vimos que o estado quântico que descreve o movimento desse elétron é escrito como um vetor *ket* de dois números quânticos, $|n, m\rangle$, sendo que a energia desse estado depende apenas de n .

7.2.2 Condição de quantização

Voltando para as variáveis espaciais, podemos escrever a função de onda desse elétron em função das coordenadas (x, y) e dos números quânticos n, m . Fazendo isso, obtemos uma distribuição de probabilidade circular em torno de um ponto no espaço, digamos o centro de coordenadas $(0, 0)$. O máximo valor esperado dessa probabilidade define um círculo de raio $r\sqrt{2m}$. Esse círculo tem uma espessura da ordem de

$$r = \sqrt{\frac{\hbar}{|e|B_z}}. \quad (7.24)$$

Não devemos considerar esse círculo como uma órbita circular eletrônica, pois ele não é. O estado $|0, m\rangle$ é uma combinação linear de muitos movimentos cíclotrons com raio r , todos centrados sobre o perímetro de um círculo maior de raio $r\sqrt{2m}$ (veja figura 14). Fazendo uma ligação do caso clássico com o quântico: classicamente o momento angular é composto por duas parcelas (uma do movimento cíclotron e outra do movimento ao redor do centro de coordenadas). Uma alteração no movimento cíclotron (n) causa uma alteração na largura e no raio da distribuição de probabilidade (veja figura 14). Por outro lado, uma alteração no eixo de coordenadas (m), altera apenas o raio da distribuição de probabilidade do estado quântico.

Considere um sistema 2D em forma de disco de raio R e portanto área $S = \pi R^2$. Uma vez que, no estado de menor energia, a distribuição de probabilidade forma um círculo de raio $r\sqrt{2m}$ e portanto de área $S_m = 2m\pi r^2$, somente é possível existir elétrons no estado $S_m \leq S$, ou $2m\pi r^2 \leq \pi R^2$, o que leva ao número quântico máximo

$$m_{max} = \frac{\pi R^2}{2\pi r^2} = \frac{S}{S_0}, \quad (7.25)$$

tendo definido $S_0 = 2\pi r^2$ como uma unidade de área. Em outras palavras, é possível coexistir um número m_{max} de elétrons, com a mesma energia (n), em uma superfície de área S , cada um com um número quântico m diferente (pelo princípio de exclusão de Pauli). Uma outra maneira de ver as coisas:

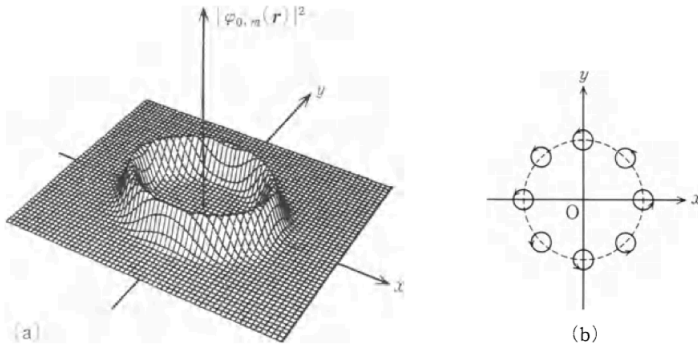


Figura 14 – (a) Estado quântico bidimensional de uma partícula carregada sob a ação de um campo magnético perpendicular constante. (b) Interpretação clássica do estado quântico definido em (a).

a quantidade de unidades de área que cabe em uma área S é m_{max} , ou seja, cada elétron “possui” uma unidade de área. Como esse limite geométrico, $S_m \leq S$, depende apenas do número quântico m , todos os outros níveis de Landau (cada n) têm a mesma degenerescência m_{max} .

Ao invés de área, podemos pensar em termos de fluxo magnético. A quantidade de fluxo magnético que atravessa a área S_0 é (veja eq. (7.24))

$$B_z S_0 = B_z 2\pi r^2 = \frac{h}{|e|} = \phi_0, \quad (7.26)$$

onde ϕ_0 é a unidade de fluxo magnético fundamental, ou quanta de fluxo. Sendo $B_z S = \phi$ o fluxo magnético total que atravessa o material, então

$$m_{max} = \frac{\phi}{\phi_0} \quad (7.27)$$

é o número de unidades de fluxo magnético que cabem na área S . Da mesma forma que antes, podemos pensar que existe um estado eletrônico (m) para cada unidade de fluxo magnético.

7.3 Sistema quântico

Nesta secção desenvolveremos a estrutura matemática necessária para compreender melhor o comportamento do efeito Hall quântico. Nosso interesse final aqui é calcular o número de Chern – um invariante topológico – e compreender sua relação com a topologia existente no QHE. Começaremos por estudar o surgimento da fase de Berry em sistemas que evoluem adiabaticamente, então fazer sua conexão com o QHE e finalmente com o número de Chern.

Fase de Berry surge em mecânica quântica quando analisamos a evolução temporal de um estado quântico. Mais precisamente, quando consideramos uma transformação cíclica e adiabática desse estado, ou seja, uma alteração temporal vagarosa nos parâmetros do hamiltoniano ao longo de um caminho fechado. Podemos chamar uma transformação adiabática de evolução “quase-estática”, fazendo um comparativo com processos quase-estáticos da termodinâmica. Nesse caso, a condição de equilíbrio termodinâmico exigido ao longo de todo o processo traduz-se na solução da função de onda manter-se não perturbada durante toda a transformação adiabática. Manter-se não perturbada significa que a solução matemática mantém-se na mesma forma, alterando apenas os valores de seus parâmetros. Como será mostrado mais a frente, em se tratando do QHE, estamos interessados na evolução adiabática da função de onda de Bloch – uma função de onda, por exemplo, de um elétron, sob a ação de um potencial periódico.

Antes de efetivamente discutirmos o conceito da fase de Berry, iniciamos o estudo pela equação de Schrödinger dependente do tempo e a aproximação adiabática.

7.3.1 Equação de Schrödinger dependente do tempo

Imagine um sistema descrito por um hamiltoniano independente do tempo, $H^0 = H^0(\mathbf{r})$, que obedece a equação de Schrödinger,

$$H^0 \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (7.28)$$

A solução geral, $\Psi = \Psi(\mathbf{r}, t)$ (função de onda), desse sistema pode ser escrita

por separação de variáveis²:

$$\Psi = \psi(\mathbf{r})\varphi(t). \quad (7.29)$$

A equação de Schrödinger divide-se em duas equações conectadas por uma constante E , não por acaso chamada de energia, ou seja,

$$\frac{1}{\psi(\mathbf{r})}H^0\psi(\mathbf{r}) = i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt} = E. \quad (7.30)$$

A equação dependente do tempo é fácil de ser resolvida e resulta na seguinte solução

$$\varphi(t) = e^{-i(E/\hbar)t}. \quad (7.31)$$

A solução espacial, comumente chamada de equação de Schrödinger independente do tempo, é escrita na forma³

$$H^0\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (7.32)$$

Sua solução depende fortemente do hamiltoniano H^0 e das condições de fronteira, que pode resultar nas mais fáceis às mais difíceis, por vezes intratáveis, equações. Assim, a solução geral da equação de Schrödinger é escrita na forma

$$\Psi = \psi(\mathbf{r})e^{-i(E/\hbar)t}, \quad (7.33)$$

na qual a parte espacial $\psi(\mathbf{r})$, por causa da equação (7.32), é chamada de autofunção, ou autoestado, do hamiltoniano e o termo dependente do tempo é chamado de fase dinâmica (por vezes, também chamarei de evolução natural do sistema). Uma vez que a função de onda é escrita dessa forma

² Usarei a notação adotada por [111].

³ Mais adiante veremos essa mesma equação no contexto de hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes, o qual é escrito em termos dos operadores de criação e aniquilação. Na altura, veremos que o próprio hamiltoniano pode ser escrito em duas partes: um vetor de operadores multiplicado por uma matriz hamiltoniano.

então as probabilidades e os valores esperados não dependem do tempo, veja abaixo:

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= \int \psi^*(\mathbf{r}) e^{+i(E/\hbar)t} \psi(\mathbf{r}) e^{-i(E/\hbar)t} d\mathbf{r} \\ &= \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \equiv \langle \psi(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}) \rangle. \end{aligned} \quad (7.34)$$

De modo geral não existe apenas um único conjunto de soluções $\varphi(t)$ e $\psi(\mathbf{r})$ que satisfazem a equação (7.30). Mas sim um conjunto de soluções $\varphi_n(t)$ e $\psi_n(\mathbf{r})$, tais que

$$\varphi_n(t) = e^{-i(E_n/\hbar)t} \quad \text{e} \quad H^0 \psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}), \quad (7.35)$$

sendo n o índice⁴ que representa cada solução linearmente independente, ou ortogonal, das demais. Nesse caso, qualquer solução possível pode ser escrita como a soma das soluções ortogonais, ou seja, a função de onda na sua forma mais geral é

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-i(E_n/\hbar)t}, \quad (7.36)$$

sendo c_n coeficientes constantes (independentes do tempo e do espaço), que determinam a probabilidade de uma medida encontrar o sistema no estado n . Se, além de ortogonais, exigirmos que os autoestados estejam normalizados (ortonormais), então eles obedecem a seguinte relação

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{n,m}, \quad (7.37)$$

onde usamos a notação de Dirac $|\psi_n\rangle \equiv \int \psi_n d\mathbf{r}$, $\langle \psi_m | \equiv \int \psi_m^* d\mathbf{r}$ e ainda

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle \equiv \int \psi_m^* \psi_n d\mathbf{r}.$$

⁴ Conforme veremos adiante, no contexto da teoria de bandas, o rótulo n representa o índice de banda de energia.

7.3.2 Hamiltoniano variável no tempo e a aproximação adiabática

O primeiro passo que aprendemos para descrever sistemas um pouco mais complicados, por exemplos, descritos por hamiltonianos dependentes do tempo, seria usar a teoria de perturbação. Podemos pensar que o hamiltoniano agora é adicionado de um termo dependente do tempo $H(\mathbf{r}, t) = H^0(\mathbf{r}) + H'(t)$, tal que esse novo termo permita transições entre diferentes níveis de energia (por exemplo, emissão e absorção de radiação por um átomo). Em geral é difícil tratar sistemas desse tipo, mas imagine que a parte temporal relacionada a troca de estados contribua muito pouco, assim, esta pode ser vista como uma pequena perturbação ao sistema. A teoria de perturbação então supõe que o hamiltoniano muda apenas as probabilidades de ocupação de cada estado, i.e., as evoluções temporais e as autofunções continuam aquelas descritas na equação (7.35), e a parte temporal do hamiltoniano altera apenas os coeficientes c_n da equação (7.36), agora escritos em função do tempo $c_n = c_n(t)$. Conhecendo as soluções $\varphi_n(t)$ e $\psi_n(\mathbf{r})$ do caso não perturbado, a teoria de perturbação dá conta de calcular os coeficientes $c_n(t)$ com uma boa aproximação até primeira ou segunda ordem.

Em seguida veremos um método de aproximação diferente, também baseado em hamiltonianos que variam no tempo, $H = H(\mathbf{r}, t)$, conforme enunciaremos no início deste capítulo. Por enquanto não faremos suposição alguma acerca da dependência temporal desse hamiltoniano, mas se ele varia no tempo, então as autofunções também variam, tal que a equação (7.32) assume a forma

$$H\psi(\mathbf{r}, t) = E(t)\psi(\mathbf{r}, t). \quad (7.38)$$

Nesse caso mais geral, continuamos com uma fase dinâmica e com uma autofunção cuja energia associada evolui no tempo junto com o hamiltoniano. Novamente, a solução $\psi(\mathbf{r}, t)$ não é única, podendo existir infinitas soluções ortogonais rotuladas por n . Nesse caso, a solução geral fica

$$\Psi = \sum_n c_n(t)\psi_n(\mathbf{r}, t)e^{i\theta_n(t)}, \quad (7.39)$$

com

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'. \quad (7.40)$$

Perceba que destacamos dois comportamentos: a evolução natural do sistema, dada pela fase $\theta_n(t)$ (chamada de fase dinâmica) e as mudanças temporais no hamiltoniano, descritas pelos coeficientes e autofunções.

A solução é dada como completa quando sabemos calcular os coeficientes $c_n(t)$. Substituindo a solução geral obtida, eq. (7.39), de volta na equação de Schrödinger temos

$$\begin{aligned} H\Psi &= i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ \sum_n c_n H\psi_n e^{i\theta_n} &= i\hbar \sum_n \left[\dot{c}_n \psi_n + c_n \dot{\psi}_n + c_n \psi_n i\dot{\theta}_n \right] e^{i\theta_n} \\ \sum_n \dot{c}_n \psi_n e^{i\theta_n} &= - \sum_n c_n \dot{\psi}_n e^{i\theta_n} \end{aligned} \quad (7.41)$$

sendo que omitimos as dependências temporais e espaciais das funções, assumindo que o leitor esteja ciente da dependência de cada uma delas.

Podemos usar a ortogonalidade dos autoestados e multiplicar a equação (7.41) por $\langle \psi_m |$, ou seja,

$$\dot{c}_m e^{i\theta_m} = - \sum_n c_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle e^{i\theta_n}, \quad (7.42)$$

ou ainda,

$$\dot{c}_m = - \sum_n c_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle e^{i(\theta_n - \theta_m)}. \quad (7.43)$$

Se notarmos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [H\psi_n] &= \frac{\partial}{\partial t} [E_n\psi_n] \\ \dot{H}\psi_n + H\dot{\psi}_n &= \dot{E}_n\psi_n + E_n\dot{\psi}_n \end{aligned}$$

e usando novamente a ortogonalidade dos autoestados, temos

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle + \langle \psi_m | H | \dot{\psi}_n \rangle &= \dot{E}_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle + E_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle \\ \langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle &= (E_n - E_m) \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle; \quad (m \neq n) \end{aligned}$$

onde usamos as relações $\langle \psi_m | H = E_m \langle \psi_m |$ e $\dot{E}_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0$ se $m \neq n$.

Por fim, substituindo esse resultado na equação (7.43) encontramos

$$\dot{c}_m = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle - \sum_{n \neq m} c_n \frac{\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)} e^{i(\theta_n - \theta_m)}, \quad (7.44)$$

na qual

$$\theta_n - \theta_m = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t [E_n(t') - E_m(t')] dt'. \quad (7.45)$$

Aproximação adiabática

Até esse último resultado, apresentado acima, temos um sistema qualquer, descrito por um hamiltoniano geral, $H = H(\mathbf{r}, t)$. Antes de restringirmos essa solução para a aproximação adiabática vamos recapitular o que foi feito até agora. Sabemos que, se o sistema tem apenas uma evolução natural no tempo, descrita pela fase dinâmica, caímos no caso mais simples mostrado na secção 7.3.1. Por outro lado, sabemos resolver o problema em que os coeficientes dos autoestados variam (pouco) no tempo, causada por uma pequena perturbação. Daqui em diante consideraremos que, além da evolução natural, o sistema também sofra uma alteração em seus parâmetros, desde sua evolução natural não se altere.

Um análogo clássico, mas que ilustra perfeitamente essa aproximação, é de um pêndulo totalmente livre de atritos preso em uma caixa fechada. Se movermos essa caixa vagarosamente, o pêndulo adquire um movimento de translação, de modo que seu movimento natural (de oscilação) permaneça inalterado. Dizemos que foi realizada uma transformação adiabática sobre esse sistema.

Voltando para a equação (7.44), se variarmos o hamiltoniano lentamente, tal que \dot{H} seja muito pequeno quando comparado com a evolução natural do movimento, podemos desprezar⁵ o último termo e a equação fica apenas

$$\dot{c}_m = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle. \quad (7.46)$$

⁵ A demonstração de \dot{H} muito pequeno não é trivial. Uma discussão detalhada da aproximação adiabática foi feita por Pinto et al. [112]. Ademais, esse resultado supõe que o sistema não seja degenerado, ou seja, $\nexists E_n = E_m, \forall n \neq m$.

A partir dela podemos calcular $c_m(t)$ conforme os passos seguintes:

$$\begin{aligned}\frac{\dot{c}_m}{c_m} &= -\langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle \\ \int_0^t \frac{1}{c_m} \frac{dc_m}{dt'} t' &= -\int_0^t \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle dt' \\ \ln(c_m(t)) - \ln(c_m(0)) &= -\int_0^t \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle dt',\end{aligned}$$

então

$$c_m(t) = c_m(0)e^{i\gamma_m(t)}, \quad (7.47)$$

com

$$\gamma_m(t) = i \int_0^t \langle \psi_m(t') | \partial_{t'} \psi_m(t') \rangle dt'. \quad (7.48)$$

A solução geral da equação de Schrödinger nos limites da aproximação adiabática assume a forma

$$\Psi = \sum_m c_m(0) \psi_m(\mathbf{r}, t) e^{i\theta_m(t)} e^{i\gamma_m(t)}. \quad (7.49)$$

Note que a parte temporal do coeficiente c_m , dentro da aproximação adiabática, apresenta-se como uma fase (tal como a fase dinâmica), entretanto, essa fase não depende das energias mas do comportamento temporal dos autoestados, ou seja, do próprio hamiltoniano. Como era de se esperar, essa aproximação mantém o movimento natural do sistema e os coeficientes dos autoestados permanecem os mesmos durante todo o processo. Para compreendermos melhor o significado dessa nova fase, vejamos a discussão a seguir.

Fase geométrica

Nos limites da aproximação adiabática, suponha que a autofunção $\psi_m(\mathbf{r}, t)$ (bem como seu respectivo hamiltoniano) dependa do tempo através de um conjunto de parâmetros $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$. Assim,

$$\frac{d\psi_m}{dt} = \frac{\partial\psi_m}{\partial R_1} \frac{dR_1}{dt} + \frac{\partial\psi_m}{\partial R_2} \frac{dR_2}{dt} + \dots = (\nabla_{\mathbf{R}} \psi_m) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt}. \quad (7.50)$$

Em função desse conjunto de parâmetros a fase descrita na equação (7.48) assume a forma

$$\begin{aligned}
 \gamma_m(t) &= i \int_0^t \langle \psi_m | (\nabla_{\mathbf{R}} \psi_m) \rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt'} dt' \\
 &= i \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \langle \psi_m | (\nabla_{\mathbf{R}} \psi_m) \rangle \cdot d\mathbf{R} \\
 &= \gamma_m(\mathbf{R}).
 \end{aligned} \tag{7.51}$$

Note que γ_m não depende mais explicitamente do tempo, mas apenas do caminho tomado, i.e., não importa o tempo (respeitando a aproximação adiabática) que o sistema levou para mudar seus parâmetros do ponto inicial \mathbf{R}_i ao ponto final \mathbf{R}_f , variando os parâmetros sempre da mesma forma a fase acrescida será sempre a mesma. Por isso, essa fase é chamada de fase geométrica. Por outro lado, a fase dinâmica (relacionada à evolução natural do sistema) é altamente dependente do tempo, seja ela

$$\theta_m(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_m(t') dt'. \tag{7.52}$$

Uma característica interessante dessa fase geométrica γ_m é que ela deve ser real. Perceba que o argumento da integral $\langle \psi_m | (\nabla_{\mathbf{R}} \psi_m) \rangle$ deve ser complexo e consequentemente γ_m deve ser real. Isso é facilmente mostrado conforme o seguinte: sendo $\langle \psi_m | \psi_m \rangle = 1$ então

$$\begin{aligned}
 \nabla_{\mathbf{R}} \langle \psi_m | \psi_m \rangle &= \langle \nabla_{\mathbf{R}} \psi_m | \psi_m \rangle + \langle \psi_m | \nabla_{\mathbf{R}} \psi_m \rangle \\
 &= \langle \psi_m | \nabla_{\mathbf{R}} \psi_m \rangle^* + \langle \psi_m | \nabla_{\mathbf{R}} \psi_m \rangle = 0,
 \end{aligned} \tag{7.53}$$

ou seja, $\langle \psi_m | \nabla_{\mathbf{R}} \psi_m \rangle$ é puramente imaginário. Caso contrário, o termo $e^{i\gamma_m}$ na equação (7.49) deixaria de contribuir como uma fase. Sendo assim, a solução geral da equação de Schrödinger na aproximação adiabática assume a forma

$$\Psi = \sum_m c_m e^{i\gamma_m(\mathbf{R})} e^{i\theta_m(t)} \psi_m(\mathbf{r}). \tag{7.54}$$

Comentaremos sobre alguns exemplos a seguir, para ilustrar esse processo de transformação adiabática. Maiores detalhes sobre cada um destes exemplos são encontrados na referência [111].

Exemplo 1 – Suponha que o sistema esteja em um estado puro no início de seu movimento. Matematicamente essa condição inicial é satisfeita se

$$c_m(0) = 1 \quad \text{e} \quad c_n(0) = 0, \quad \forall n \neq m. \quad (7.55)$$

A solução geral da equação de Schrödinger (veja eq. (7.54)) fica

$$\Psi = \Psi_m = e^{i\gamma_m(\mathbf{R})} e^{i\theta_m(t)} \psi_m(\mathbf{r}). \quad (7.56)$$

E mais uma vez, vemos que a solução mantém-se em seu estado original m , diferenciado por duas fases: a fase dinâmica $\theta_m(t)$ que descreve o movimento natural do sistema e a fase geométrica $\gamma_m(\mathbf{R})$ que refere-se a mudanças externas e adiabáticas, $\dot{\gamma}_m \ll \dot{\theta}_m$.

Exemplo 2 – Voltamos aquela analogia clássica do pêndulo oscilante dentro de uma caixa e totalmente livre de atritos. Podemos então transportar a caixa de um lado para o outro, adiabaticamente, sem destruímos seu movimento oscilatório. A solução obtida mostra que esse movimento adiabático pode vir a ocasionar uma diferença de fase em seu movimento, equação (7.54). Infelizmente, nesse exemplo, a fase γ_m obtida ao final do movimento é nula. Isso acontece pois, nesse caso, as autofunções são reais. Esse comportamento é geral, sempre que as autofunções forem reais a fase geométrica é nula [111].

Exemplo 3 – Vejamos um outro exemplo que resulta em uma fase geométrica diferente de zero. Imagine uma partícula com spin sob a atuação de um campo magnético. Esse campo está centralizado no eixo de coordenadas, mas sua direção faz um ângulo θ com o eixo z . Nessa configuração o spin da partícula encontra-se alinhado com o campo magnético externo aplicado (condição inicial). Suponha agora que esse campo comece a girar em torno do eixo z , mantendo o ângulo fixo, formando um cone em torno desse eixo. A medição do spin da partícula passa a ter uma probabilidade de estar no mesmo sentido que o campo, ou em sentido oposto. A aproximação adiabática nos diz que, se as mudanças no hamiltoniano (campo magnético) forem mais lentas que as mudanças características na função de onda, então a configuração inicial mantém-se durante todo o movimento, no

caso a partícula mantém seu spin no mesmo sentido que aponta o campo. Ademais, o movimento adquire uma fase adicional além da fase dinâmica. Como curiosidade, se o campo magnético girar rapidamente então o spin da partícula oscila entre spin para cima e spin para baixo, na direção do campo.

7.4 Fase de Berry

Por volta de 1980 Michael Berry notou um caso especial da fase geométrica. Ele percebeu que, em certos sistemas periódicos, a fase geométrica não é um termo irrelevante, veja a seguir.

1 parâmetro – Suponha uma autofunção $\psi_m(\mathbf{r}, t)$ (bem como seu respectivo hamiltoniano) dependa do tempo através de um parâmetro $R = R(t)$, assim

$$\frac{\partial \psi_m}{\partial t} = \frac{\partial \psi_m}{\partial R} \frac{dR}{dt}. \quad (7.57)$$

Nesse caso a fase representada na equação (7.48) fica

$$\begin{aligned} \gamma_m(t) &= i \int_0^t \langle \psi_m | \frac{\partial \psi_m}{\partial R} \rangle \frac{dR}{dt'} dt' \\ &= i \int_{R_i}^{R_f} \langle \psi_m | \partial_R \psi_m \rangle dR \\ &= \gamma_m(R) \end{aligned}$$

Se após um tempo T o sistema retorna para o seu estado inicial no parâmetro R , ou seja, $R(0) = R(T)$, então

$$\gamma_m(R(T)) = i \oint_C \langle \psi_m | \partial_R \psi_m \rangle dR = 0. \quad (7.58)$$

2 parâmetros ou mais – Agora, se a autofunção $\psi_m(\mathbf{r}, t)$ dependa do tempo através de um conjunto de parâmetros $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$. E se após um tempo T esse conjunto de parâmetros retorna para seu estado inicial $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$ então (veja eq. (7.51)):

$$\gamma_m(\mathbf{R}(T)) = i \oint_C \langle \psi_m | (\nabla_{\mathbf{R}} \psi_m) \rangle \cdot d\mathbf{R}. \quad (7.59)$$

podendo ser diferente de zero. Estamos acostumados a pensar que a fase da função de onda é arbitrária, no sentido que quando calculamos as quantidades físicas $|\psi|^2$ elas cancelam-se. Entretanto, Berry bem notou que se você evoluir um sistema e eventualmente voltar para o estado inicial a fase de Berry pode não cancelar. Mais do que isso, ela não pode ser cancelada através de uma transformação de *gauge* (conforme veremos adiante), deixando de ser apenas uma fase arbitrária. Com essa descoberta, a fase geométrica $\gamma_m(T)$, nesse caso especial, é chamada de fase de Berry.

Em resumo, vimos que se um sistema sofre uma transformação cíclica e adiabática, surge uma fase de Berry associada ao movimento se pelo menos dois parâmetros forem alterados durante a transformação e se as autofunções forem complexas.

Analogia com o campo magnético – Considere um fluxo magnético passando através de uma área, tal que,

$$\phi = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a}. \quad (7.60)$$

Se o campo for escrito em termos do potencial vetor

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (7.61)$$

então, usando o teorema de Stokes, resulta em

$$\phi = \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{a} = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}. \quad (7.62)$$

Podemos comparar essas equações com aquelas obtidas na fase de Berry. Mais precisamente, comparando as equações (7.59) e (7.62), supondo que o vetor de parâmetros $\mathbf{R}(T)$ representa coordenadas espaciais $\mathbf{R} = \mathbf{r}$, observamos a seguinte relação

$$\mathbf{A} \implies i \langle \psi_m | (\nabla_{\mathbf{R}} \psi_m) \rangle \equiv \mathcal{A}_m(\mathbf{R}), \quad (\text{potencial vetor de Berry}) \quad (7.63)$$

continuando,

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \implies \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathcal{A}_m(\mathbf{R}) \equiv \boldsymbol{\Omega}_m(\mathbf{R}). \quad (\text{curvatura de Berry}) \quad (7.64)$$

Se a analogia fosse levada ao pé da letra o nome curvatura de Berry seria campo de Berry. Indo mais além com a analogia,

$$\gamma_m(\mathbf{R}(T)) = \int_S \boldsymbol{\Omega}_m(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{a}. \quad (\text{fluxo de Berry, ou fase de Berry}) \quad (7.65)$$

Pode-se facilmente notar que, aplicando o teorema de Stokes na equação (7.59) obtemos a equação acima, ou seja, a equação acima se existir uma superfície S bem definida, delimitada pelo caminho \mathcal{C} . Assim, rescrevendo a equação (7.59) de acordo com a analogia ao campo magnético temos

$$\gamma_m(\mathbf{R}(T)) = \oint_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_m(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}. \quad (7.66)$$

A partir da definição acima, mais uma vez podemos ver que a fase de Berry γ_m não depende do tempo, nem de como o conjunto de parâmetros \mathbf{R} variam no tempo, mas apenas do caminho \mathcal{C} traçado por eles.

Exemplo – Podemos voltar ao exemplo 3 da secção anterior, de um campo magnético girando em torno do eixo z , atuando diretamente no spin de uma partícula em repouso. Suponha que essa partícula tenha spin $1/2$, é possível mostrar que a fase de Berry adquirida no movimento do spin após um ciclo completo é $-(1/2)\Omega$, sendo Ω o ângulo sólido descrito pelo vetor campo magnético. Essa fase adquirida não pode ser removida através de uma transformação de *gauge* conforme veremos adiante, deixando de ser apenas uma fase irrelevante.

Transformação de *gauge*

Sabe-se que em eletromagnetismo o sistema físico é invariante a uma transformação de *gauge*, matematicamente descrita por $\mathbf{A}(\mathbf{R}) \longrightarrow \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \nabla f(\mathbf{R})$.

Aproveitando essa simetria, podemos aplicar a transformação de *gauge* na equação (7.66). Começamos por calcular a fase geométrica para um caminho qualquer entre os pontos \mathbf{R}_i e \mathbf{R}_f (realizado em um tempo qualquer t)

$$\gamma_m(\mathbf{R}) = \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \mathcal{A}_m(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{r}. \quad (7.67)$$

Fazendo uma transformação de *gauge*,

$$\mathcal{A}_m(\mathbf{R}) \longrightarrow \mathcal{A}_m(\mathbf{R}) - \nabla f_m(\mathbf{R}), \quad (7.68)$$

temos

$$\begin{aligned} \gamma_m(\mathbf{R}) &\longrightarrow \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} [\mathcal{A}_m(\mathbf{R}) - \nabla f_m(\mathbf{R})] \cdot d\mathbf{r} \\ &= \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \mathcal{A}_m(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \nabla f_m(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{r} \\ &= \gamma_m(\mathbf{R}) - [f_m(\mathbf{R}_f) - f_m(\mathbf{R}_i)]. \end{aligned} \quad (7.69)$$

Podemos ver que uma transformação de *gauge* não altera a fase geométrica a menos de um termo do tipo $f_m(\mathbf{R}_f) - f_m(\mathbf{R}_i)$. Como nada impomos sobre a função f_m , podemos sempre escolhê-la tal que a fase de geométrica anule-se, i.e., $f_m(\mathbf{R}_f) - f_m(\mathbf{R}_i) = \gamma_m$.

Por outro lado, para uma evolução cíclica do sistema $\mathbf{R}_i \equiv \mathbf{R}(0) = \mathbf{R}_f \equiv \mathbf{R}(T)$, de período T , a fase $\gamma_m(\mathbf{R}(T))$ transforma-se como

$$\gamma_m(\mathbf{R}) \longrightarrow \gamma_m(\mathbf{R}) - \xi_m(\mathbf{R}), \quad (7.70)$$

sendo $\xi_m(\mathbf{R}) \equiv f_m(\mathbf{R}(0)) - f_m(\mathbf{R}(T))$. Até aí tudo bem, podemos ainda escolher uma função ξ_m que anule a fase γ_m . Entretanto, M. Berry bem notou que essa nova fase geométrica *gauge*-transformada representa uma transformação nas autofunções do tipo (substitua a eq. (7.70) na eq. (7.54))

$$\psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}(T)) \longrightarrow e^{i\xi_m(\mathbf{R})} \psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}(T)). \quad (7.71)$$

Note a diferença entre o vetor de parâmetros $\mathbf{R}(t)$ e o vetor posição espacial \mathbf{r} . Agora, notando também que as autofunções são de valor único (*single-valued*) então a relação $\psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}(0)) = \psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}(T))$ deve ser satisfeita. Fazendo uso da equação (7.71) essa relação expressa-se como

$$\psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}(0)) = e^{i\xi_m(\mathbf{R})} \psi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}(T)), \quad (7.72)$$

o que implica na condição $e^{i\xi_m(\mathbf{R})} = 1$, ou seja,

$$\xi_m(\mathbf{R}) = f_m(\mathbf{R}(0)) - f_m(\mathbf{R}(T)) = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.73)$$

Portanto, a conclusão de Berry foi que, se um sistema sofre uma transformação adiabática e retorna para seu estado inicial, sendo a função de estado uma função de valor único, então a fase geométrica (fase de Berry) não pode mais ser cancelada através de uma transformação de *gauge* adequada. Mais do que isso, a fase de Berry cancela-se apenas quando assume valores múltiplos de 2π . Nesse sentido, a fase γ_m torna-se um invariante de *gauge* e passa a ter um significado físico (em geral, processos que retornam para seu estado inicial são processos periódicos).

Efeito Aharonov-Bohm

Fugindo um pouco do problema acima – um elétron sob a atuação de um campo magnético – em princípio, nenhum efeito eletromagnético deve ser observado em regiões onde o campo elétrico \mathbf{E} e o campo magnético \mathbf{B} são nulos. Entretanto, Aharonov e Bohm descobriram que isso é possível através do potencial vetor \mathbf{A} . O problema abaixo pode ser visto com mais detalhes na referência [111].

Imagine uma partícula carregada, de carga q , que se move em um círculo (espira) de raio b . No centro desse círculo passa um solenóide de raio a , tal que o fluxo de campo magnético dentro desse solenoide seja uniforme. Fora do solenóide, incluindo a região de movimento da partícula, não existe campo magnético e nem elétrico. Por outro lado, o potencial vetor não é zero, em particular, podemos fazer uma escolha de *gauge* tal que o potencial

vetor fora do solenoide seja

$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\phi}, \quad (r > a) \quad (7.74)$$

no qual Φ é o fluxo magnético que atravessa o interior do solenoide. As possíveis energias para essa partícula são

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2} \left(n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (7.75)$$

Diferentemente do que acontece em uma espira sem campo magnético em seu interior, no caso acima a degenerescência da circulação para a direita e para a esquerda é levantada. Ou seja, mesmo sem campo elétrico ou magnético atuando diretamente em cima da espira, se a partícula girar para a esquerda ou para a direita ela não assume os mesmos valores de energia. Supondo que a carga q é positiva, então n positivo significa que a carga gira no mesmo sentido que a corrente que atravessa o solenoide, por conseguinte, n negativo representa uma carga viajando em sentido contrário. Note também que viajar no mesmo sentido que a corrente do solenoide custa menos energia do que viajar em sentido oposto. Por fim, mas não menos importante, as possíveis energias para essa partícula dependem claramente do campo magnético no interior do solenoide, através do fluxo, apesar de não existir campo magnético no local em que a partícula está viajando. Esse efeito é chamado de efeito Aharonov-Bohm (A-B).

Um exemplo parecido e confirmado experimentalmente é: suponha uma corrente que passa ao lado de um solenoide (perpendicular ao mesmo), então a corrente que passar pelo lado direito adquire uma fase diferente daquela que passar do lado esquerdo. Suponha que essas duas correntes partam de um mesmo ponto e chegam do outro lado do solenoide em outro ponto comum, então é possível identificar um padrão de referência devido a diferença de fase entre as duas.

Condição de quantização, efeito Aharonov-Bohm e fase de Berry

Vimos que o estado $|0, m\rangle$ está localizado circularmente, sendo o raio desta órbita da ordem de $r\sqrt{2m}$, com $m = 0, 1, 2, \dots$. Essa quantização de m vem

de uma restrição espacial do momento angular L_z . Suponha que o elétron encontra-se em cima desse círculo; se o movimentarmos adiabaticamente ao longo desse mesmo círculo então o elétron adquire uma fase geométrica, $\psi_m = e^{i\gamma_m(\mathbf{R})}\psi_m$, sendo \mathbf{R} os parâmetros que descrevem a transformação adiabática. Como sabemos, esse sistema é invariante a uma transformação de *gauge* na grandeza

$$i \langle \psi_m | (\nabla_{\mathbf{R}} \psi_m) \rangle \equiv \mathcal{A}_m(\mathbf{R}), \quad (7.76)$$

ou seja, $\mathcal{A}_m \rightarrow \mathcal{A}_m - \nabla f_m$ (que implica em $\gamma_m \rightarrow \gamma_m - \xi_m$), então essa fase geométrica pode ser anulada perante uma escolha adequada da função f . Por outro lado, ao completarmos o círculo e voltarmos para o mesmo ponto \mathbf{r}_0 , a função de onda deve ser de valor único e a transformação de *gauge* não consegue mais anular essa fase, pois assume valores discretos $\gamma_m(\mathbf{r}_0) \rightarrow \gamma_m(\mathbf{r}_0) - 2\pi n$, com $n = 0, 1, 2, \dots$. Essa é a chamada fase de Berry.

Após um ciclo fechado (em torno de uma área S) de uma transformação adiabática, a fase de Berry é calculada por

$$\gamma_m = \int_S \boldsymbol{\Omega}_m \cdot d\mathbf{a}, \quad \text{com} \quad \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathcal{A}_m \equiv \boldsymbol{\Omega}_m. \quad (7.77)$$

Em sistemas eletromagnéticos essa fase traduz-se para

$$\gamma_m = \frac{e}{\hbar} \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a} = \frac{e}{\hbar} B_z S = 2\pi \frac{e\Phi}{h}, \quad (7.78)$$

sendo Φ o fluxo de campo magnético que atravessa a superfície S .

Por outro lado, a área que o estado $|0, m\rangle$ ocupa é $S_m = \pi r^2 2m$, que podemos identificar como sendo a área na qual é feita a transformação adiabática descrita acima, ou seja, $S_m = S$. O fluxo de campo magnético que atravessa essa área é

$$\begin{aligned} \Phi &= B_z S_m \\ &= \Phi_0 m. \end{aligned} \quad (7.79)$$

Sendo assim, a mudança de fase devido ao momento angular do estado $|0, m\rangle$ é igual a fase consequente do efeito A-B,

$$\gamma_m = \frac{e\Phi_0}{h} 2\pi m. \quad (7.80)$$

Em outras palavras, um estado com um momento angular finito deve cercar um fluxo magnético correspondente. Perceba que a fase adquirida (devido ao efeito A-B) só depende do fluxo magnético total que existe no interior do círculo.

7.5 Número de Chern

Estudamos a fase de Berry em um contexto mais geral e alguns exemplos ilustrativos foram discutidos. Neste capítulo veremos esse conceito em sólidos cristalinos, cujos materiais são muito bem descritos pela teoria de bandas. É nesse contexto que estudaremos a fase de Berry em estado sólido.

Fazendo uso da aproximação de elétrons independentes, esses percorrem o sólido quase livres a menos de um potencial periódico, descritos pelo hamiltoniano de Bloch

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}) = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (7.81)$$

sendo $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ o potencial de periodicidade \mathbf{a} de acordo com a rede de Bravais.

As autofunções para tal sistema da forma

$$|\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle \quad (7.82)$$

onde \mathbf{r} representa a posição e \mathbf{k} o vetor de onda que relaciona a dispersão de energia $E_{n,\mathbf{k}}$ com o índice de banda n , tal que,

$$H(\mathbf{k}) |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle = E_{n,\mathbf{k}} |u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})\rangle \quad (7.83)$$

com $H(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathcal{H}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Na teoria de bandas, a periodicidade aparece no espaço recíproco através das zonas de Brillouin. Podemos então definir um caminho fechado \mathcal{C}_{BZ} de modo a varrer todos os momentos \mathbf{k} contidos na primeira zona de Brillouin (BZ). Dentro das mesmas considerações do

parágrafo anterior, podemos evoluir esse sistema ao longo desse caminho fechado e notar que a fase de Berry torna-se [57, 113]

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}_{\text{BZ}}} d\mathbf{k} \cdot \mathcal{A}_n(\mathbf{k}) \quad ; \quad \mathcal{A}_n(\mathbf{k}) \equiv i \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle. \quad (7.84)$$

Por sua vez, a curvatura de Berry assume a forma

$$\mathbf{\Omega}_n(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times i \langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} | u_n(\mathbf{k}) \rangle. \quad (7.85)$$

Invariante topológico TKNN

Thouless et al.[67] mostraram, de forma equivalente, que se calcularmos o fluxo de Berry por toda a BZ,

$$N_n = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} \mathbf{\Omega}_n(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} \quad \text{e} \quad N = \sum_n N_n, \quad (7.86)$$

e somarmos sobre todas as bandas, resulta exatamente no número de níveis de Landau ocupados, N , no efeito Hall quântico. Esse número N é chamado de número TKNN e representa o número de bandas ocupadas no efeito Hall quântico, ou seja, representa a topologia do sistema. Números que caracterizam uma fase topológica são chamados de invariantes topológicos. De maneira geral, encontraremos números inteiros N_n para cada banda n e o número TKNN é chamado de número de Chern. Esse número pode ser calculado para outros sistemas topológicos (e.g., supercondutores topológicos) e é o número resultante de correntes de carga que circulam na superfície do material.

Número topológico \mathbb{Z}_2

Outro número que classifica as fases topológicas é o invariante \mathbb{Z}_2 , para sistemas com simetria de reversão temporal. Em um supercondutor puro tripleto considerado neste trabalho, esse número é determinado pela dispersão $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ no estado normal, calculado a partir da equação[114]

$$(-1)^\nu = \prod_{\Gamma} \text{sign}(\varepsilon(\Gamma)), \quad (7.87)$$

sendo Γ valores especiais do momento \mathbf{k} , os quais são invariantes por reversão temporal. Sendo assim, o número \mathbb{Z}_2 , representado por ν na equação acima, representa uma fase trivial quando for par e uma fase topológica quando ν for ímpar.

Número de enrolamento (*winding number*)

Existem algumas fases topológicas supercondutoras, cujos números de Chern e \mathbb{Z}_2 são nulos. Nesse caso, podemos invocar um outro invariante topológico chamado de número de enrolamento. Diferentemente dos outros, esse número é definido apenas para alguns valores de momento específicos. Um exemplo simples e que ilustra bem esse invariante topológico é encontrado na referência [115]. Seu cálculo específico para o modelo usado neste trabalho é encontrado na referência [116]. O número de enrolamento identifica separadamente as correntes que circulam no entorno do material e não somente a resultante de cargas como o número de Chern. Por exemplo, duas correntes que circulam em sentidos contrários resultam em um número de Chern igual a zero, mas um número de enrolamento diferente de zero para cada uma delas.

Método de Bogoliubov-de Gennes

8.1 Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes

Neste capítulo usaremos uma formulação matemática, a qual para muitos sistemas deixa a interpretação física muito mais clara e intuitiva. Nessa formulação uma classe de problemas, cujos hamiltonianos podem ser escritos em termos dos operadores de criação (\hat{c}^\dagger) e aniquilação (\hat{c}), são resolvidos “facilmente” através de uma transformação canônica nos operadores.

Sempre que um sistema for descrito por um hamiltoniano quadrático em seus operadores de criação e aniquilação podemos escrevê-lo na forma que chamamos de hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes (BdG), seja ela:

$$\hat{H} = \hat{C}^\dagger \mathbf{H} \hat{C}, \quad (8.1)$$

onde \mathbf{H} é chamada de matriz hamiltoniano e satisfaz a relação de hermiticidade $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$. No caso especial dos supercondutores, escrevemos essa equação permitindo a combinação de dois operadores de criação e de aniquilação, ou seja,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{c}^\dagger & \hat{c} \end{pmatrix} \mathbf{H} \begin{pmatrix} \hat{c} \\ \hat{c}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (8.2)$$

Note que \hat{c} está na forma vetorial pois pode conter outras informações como spin, subrede, pseudospin, diferentes orbitais, etc. No caso do presente trabalho, estamos interessados na componente do spin e definiremos o operador \hat{C}^\dagger , por exemplo, como $\hat{C}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow^\dagger & \hat{c}_\downarrow^\dagger & \hat{c}_\uparrow & \hat{c}_\downarrow \end{pmatrix}$.

Um hamiltoniano que descreve a dinâmica de partículas no estado supercondutor BCS, tem sua matriz hamiltoniano escrita na forma geral [117]:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{\Delta} \\ -\mathbf{\Delta}^* & -\mathbf{H}_0^T \end{pmatrix}, \quad (8.3)$$

na qual \mathbf{H}_0 está associado às bandas de energia do sistema, medidas em relação ao potencial químico, e $\mathbf{\Delta}$ refere-se ao estado ligado do supercondutor. Por causa da hermiticidade,

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \mathbf{\Delta} \\ -\mathbf{\Delta}^* & -\mathbf{H}_0^T \end{pmatrix} = \mathbf{H}^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0^\dagger & -\mathbf{\Delta}^T \\ \mathbf{\Delta}^\dagger & -\mathbf{H}_0^* \end{pmatrix}, \quad (8.4)$$

as seguintes propriedades são satisfeitas: $\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}_0^\dagger$ e $\mathbf{\Delta} = -\mathbf{\Delta}^T$, que ressalta a natureza antissimétrica da função de onda do férmion.

8.1.1 Supercondutor onda- p e onda- s

¹Em supercondutores comuns, a correlação entre os elétrons do par de Cooper é o parâmetro de ordem da transição de fase, ou seja, o gap de energia é dado por

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \propto \langle \hat{c}_\alpha(\mathbf{k})\hat{c}_\beta(-\mathbf{k}) \rangle, \quad (8.5)$$

onde $\alpha, \beta = \uparrow$ ou \downarrow representam os spins de cada elétron e \mathbf{k} o momento de cada um deles. Como vimos, o parâmetro Δ obedece o princípio de exclusão de Pauli e precisa ser antissimétrico:

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -\Delta_{\beta\alpha}(-\mathbf{k}). \quad (8.6)$$

Quando não há acoplamento spin-órbita podemos separar as contribuições de spin e momento, então escrever o parâmetro de ordem como:

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \chi_{\alpha\beta}\Delta(\mathbf{k}) \quad \begin{cases} \chi_{\alpha\beta} = -\chi_{\beta\alpha} \Leftrightarrow \Delta(\mathbf{k}) = \Delta(-\mathbf{k}) & \text{(a)} \\ \chi_{\alpha\beta} = \chi_{\beta\alpha} \Leftrightarrow \Delta(\mathbf{k}) = -\Delta(-\mathbf{k}) & \text{(b)} \end{cases} \quad (8.7)$$

¹ Boa parte da discussão adiante foi elaborada por François Korschelle, em uma de suas postagens no site <http://physics.stackexchange.com>, cadastrado como FraSchelle. Sua página pessoal é <http://www.mendeley.com/profiles/francois-korschelle/>. Para maiores detalhes sobre SC onda- p e onda- s ver a ref. [60].

sendo $\chi_{\alpha\beta}$ uma matriz espinor. Dizemos que no caso (a) o par de Cooper tem emparelhamento de spins singlete – podendo ser do tipo onda- s ($l = 0$) ou do tipo onda- d ($l = 2$) – e no caso (b) dizemos que o par tem emparelhamento de spins tripleto – podendo ser do tipo onda- p ($l = 1$) ou do tipo onda- f ($l = 3$). Por conta da matriz de Pauli σ_y ser a única antissimétrica, é conveniente escrever o parâmetro de ordem como:

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \{[\Delta_0(\mathbf{k}) + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}](i\sigma_2)\}_{\alpha\beta}, \quad (8.8)$$

no qual $\Delta_0(\mathbf{k}) = \Delta_0(-\mathbf{k})$ representa a componente do estado singlete e $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = -\mathbf{d}(-\mathbf{k})$ é um vetor que contém informações sobre o estado tripleto. Na sua forma matricial o parâmetro de ordem fica escrito como:

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_0(\mathbf{k}) \\ -\Delta_0(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}_{\alpha\beta} + \begin{pmatrix} -d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & d_z(\mathbf{k}) \\ d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix}_{\alpha\beta}. \quad (8.9)$$

Apesar de desconsiderarmos uma interação do tipo spin-órbita na formulação acima, o modelo particular usado neste trabalho introduz um termo de acoplamento spin-órbita do tipo Rashba[118], o qual irá influenciar os spins dos pares de Cooper tripleto ($\mathbf{d}(\mathbf{k})$), que estarão emparelhados com o termo de Rashba.

8.1.2 Supercondutividade do tipo $p_x + ip_y$

A teoria para supercondutividade do tipo $p_x + ip_y$ é baseada na seguinte escolha: $\Delta_0 = 0$ e $\mathbf{d} = (k_x + ik_y, i(k_x + ik_y), 0)$. Esses valores substituídos na equação (8.9) nos remete a um parâmetro de ordem do tipo:

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2}(k_x + ik_y) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv -(k_x + ik_y) |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (8.10)$$

que é essencialmente um termo de fase quando $k_x = k \cos(\theta)$ e $k_y = k \sin(\theta)$, sobre um par de elétrons de spins polarizados, i.e.,

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -ke^{i\theta} |\uparrow\uparrow\rangle. \quad (8.11)$$

Observe que a notação $|\uparrow\uparrow\rangle$ refere-se a spins do par de Cooper. Um estado singleto teria spins do tipo $|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$. E para supercondutividade do tipo onda-s Δ_0 é independente de \mathbf{k} , com $\mathbf{d} = 0$. Note que onda- p também refere-se ao momento angular $l = 1$. Assim sendo, um par de elétrons tipo onda- p poderia ter momentos magnéticos $m = 0, \pm 1$. Os harmônicos esféricos $Y_{l,m}$ para esses estados são $Y_{1,\pm 1} \propto (k_x \pm ik_y)$ e também $Y_0 \propto k_z$, por isso a escolha de $\mathbf{d}(\mathbf{k})$. Note ainda que somente a escolha $m = +1$ aparece na supercondutividade $p_x + ip_y$.

8.1.3 Simetrias

De acordo com Schnyder et al.[66], no contexto do interesse deste trabalho, podemos classificar os hamiltonianos de isolantes topológicos e supercondutores conforme suas simetrias: simetria de reversão temporal (TRS), simetria partícula-buraco (PHS) e a simetria de subrede (ou quiral²) (SLS). De acordo com o interesse deste trabalho, veremos que hamiltonianos de BdG são classificados pelas simetrias presentes e pela invariância de rotação dos spin (simetria de rotação dos spins, SU(2)).

Considere uma matriz \mathcal{H} que representa um hamiltoniano de partícula única. Dado um operador O , dizemos que \mathcal{H} tem simetria de reversão temporal, classificada como tipo- O , se

$$\text{TRS: } \mathcal{H} = O\mathcal{H}^T O^{-1}. \quad \begin{cases} O^T = O & \text{boson} \\ O^T = -O & \text{fermion} \end{cases} \quad (8.12)$$

Por outro lado, dizemos que a matriz hamiltoniano tem simetria partícula-buraco, também classificada como simetria do tipo- O , se

$$\text{PHS: } \mathcal{H} = -O\mathcal{H}^T O^{-1}, \quad \begin{cases} O^T = O & \text{emparelhamento tripleto} \\ O^T = -O & \text{emparelhamento singleto} \end{cases} \quad (8.13)$$

² Em geometria, uma figura é quiral (e dita ter quiralidade) se ela não for idêntica a sua imagem espelhada, ou melhor, se ela não puder ser mapeada para sua imagem espelhada através de rotações e translações.

com $OO^\dagger = 1$ para todos os casos.

Quando ambas TRS e PHS estão presentes, podemos analisar um terceiro tipo de simetria, a simetria de subrede. Dado um operador P , dizemos que \mathcal{H} tem simetria de subrede, classificada como simetria do tipo- P , se

$$\text{TRS} \times \text{PHS} = \text{SLS}: \quad \mathcal{H} = -P\mathcal{H}P^{-1}, \quad \left\{ P^2 = 1 \right. \quad (8.14)$$

sendo $PP^\dagger = 1$. Não pertence à classe dos hamiltonianos de BdG mas também é possível que um sistema tenha apenas SLS sem que estejam presentes TRS e PHS.

Por fim, um hamiltoniano que carregue a simetria do tipo- O e tipo- P ao mesmo tempo é definido por:

$$\text{TRS} + \text{PHS} + \text{SLS}: \quad \mathcal{H} = \pm(PO)\mathcal{H}(PO)^{-1}. \quad (8.15)$$

Simetria partícula-buraco – Começamos por analisar as possíveis simetrias da matriz hamiltoniano definida na equação (8.3). Levando em conta sua hermiticidade e a natureza antissimétrica da função de onda do férmion, esse hamiltoniano de BdG satisfaz a seguinte relação:

$$\mathbf{H} = -\sigma_x \mathbf{H}^T \sigma_x, \quad \sigma_x^T = \sigma_x \quad (8.16)$$

onde $\sigma_x = \sigma_x^{-1}$ é a componente x da matriz de Pauli, portanto, apresenta simetria do tipo PHS com emparelhamento tripleto e pertence à classe D ou DIII (veja adiante). *Prova:*

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= -\sigma_x \mathbf{H}^T \sigma_x \\ &= -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\mathbf{H}_0)^T & (-\Delta^*)^T \\ (\Delta)^T & (-\mathbf{H}_0^T)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & -\Delta^T \\ \Delta^\dagger & -\mathbf{H}_0^T \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (8.17)$$

que não implica em nenhuma restrição no hamiltoniano, a menos da hermiticidade (eq. (8.4)). Também é possível que hamiltonianos de BdG apresentem PHS com emparelhamento singlete, nesse caso, pertencem à classe C ou

CI. No entanto, é importante observar que hamiltonianos de BdG sempre têm PHS.

A partir daqui podemos classificar o hamiltoniano de BdG de acordo com a presença ou ausência da TRS e a presença ou ausência da simetria SU(2).

Simetria de reversão temporal – Um hamiltoniano de BdG tem a presença ou ausência de TRS (férmion) se

$$\mathbf{H} = (i\sigma_y \otimes \sigma_0) \mathbf{H}^T (-i\sigma_y \otimes \sigma_0), \quad (i\sigma_y \otimes \sigma_0)^T = -(i\sigma_y \otimes \sigma_0) \quad (8.18)$$

onde $-(i\sigma_y \otimes \sigma_0) = (i\sigma_y \otimes \sigma_0)^{-1}$ e σ_0 é a matriz identidade de tamanho 2×2 . É fácil de mostrar que a TRS exige uma simetria de inversão dos spins. *Prova:*

$$\mathbf{H} = (\sigma_0 \otimes i\sigma_y) \mathbf{H}^T (-\sigma_0 \otimes i\sigma_y)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \Delta \\ -\Delta^* & -\mathbf{H}_0^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (i\sigma_y) (\mathbf{H}_0)^T (-i\sigma_y) & (i\sigma_y) (-\Delta^*)^T (-i\sigma_y) \\ (i\sigma_y) (\Delta)^T (-i\sigma_y) & (i\sigma_y) (-\mathbf{H}_0^T)^T (-i\sigma_y) \end{pmatrix} \quad (8.19)$$

onde cada termo é operado em seu spin. Tomemos as matrizes $\mathbf{H}_0 = H_{\alpha,\beta}$ e $\Delta_0 = \Delta_{\alpha,\beta}$, com $\alpha, \beta = \uparrow$ ou \downarrow . A equação anterior nos diz que

$$\begin{pmatrix} H_{\uparrow\uparrow} & H_{\uparrow\downarrow} \\ H_{\downarrow\uparrow} & H_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{\downarrow\downarrow} & -H_{\uparrow\downarrow} \\ -H_{\downarrow\uparrow} & H_{\uparrow\uparrow} \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow} & \Delta_{\uparrow\downarrow} \\ \Delta_{\downarrow\uparrow} & \Delta_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Delta_{\downarrow\downarrow}^* & \Delta_{\uparrow\downarrow}^* \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}^* & -\Delta_{\uparrow\uparrow}^* \end{pmatrix}, \quad (8.20)$$

o que só é verdade sob as condições $H_{\uparrow\uparrow} = H_{\downarrow\downarrow}$ e $H_{\uparrow\downarrow} = H_{\downarrow\uparrow} = 0$, bem como sob as condições $\Delta_{\uparrow\uparrow} = -\Delta_{\downarrow\downarrow}^*$ e $\Delta_{\uparrow\downarrow}, \Delta_{\downarrow\uparrow}$ reais.

Simetria de rotação dos spins – Além das simetrias TRS e PHS, bem como SLS, podemos detalhar ainda mais a classificação dos hamiltonianos de BdG de acordo com sua simetria de rotação dos spins, simetria SU(2). Sendo assim, a presença ou ausência da simetria SU(2) é representada por

$$[\mathbf{H}, \mathbf{J}_i] = 0, \quad \mathbf{J}_i = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i^T \end{pmatrix}, \quad i = x, y, z. \quad (8.21)$$

Sistemas com essa simetria são relevantes para os supercondutores com emparelhamento singleto. Por outro lado, sistemas sem simetria SU(2) são relevantes para os SC com emparelhamento tripleto. *Prova:*

$$[\mathbf{H}, \mathbf{J}_i] = 0$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \Delta \\ -\Delta^* & -\mathbf{H}_0^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i^T \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & -\sigma_i^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 & \Delta \\ -\Delta^* & -\mathbf{H}_0^T \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0 \sigma_i & -\Delta \sigma_i^T \\ -\Delta^* \sigma_i & \mathbf{H}_0^T \sigma_i^T \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sigma_i \mathbf{H}_0 & \sigma_i \Delta \\ \sigma_i^T \Delta^* & \sigma_i^T \mathbf{H}_0^T \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (8.22)$$

que escrita na forma de componentes fica

$$\begin{pmatrix} [\mathbf{H}_0, \sigma_y] & [\Delta, \sigma_y] \\ [\sigma_y, \Delta^*] & [\sigma_y, \mathbf{H}_0^T] \end{pmatrix} = 0 \quad (8.23)$$

e

$$\begin{pmatrix} [\mathbf{H}_0, \sigma_j] & \{\Delta, \sigma_j\} \\ \{\sigma_j, \Delta^*\} & [\mathbf{H}_0^T, \sigma_j] \end{pmatrix} = 0 \quad \text{com } j = x, z. \quad (8.24)$$

Consideraremos também um caso especial da simetria SU(2); quando ela está presente somente no eixo z , ou seja, $[\mathbf{H}, \mathbf{J}_z] = 0$. Nesse caso, diremos que o sistema tem simetria S_z e assume as restrições $H_{\uparrow\uparrow} = H_{\uparrow\downarrow} = 0$ e $\Delta_{\uparrow\uparrow} = \Delta_{\uparrow\downarrow} = 0$. A seguir listaremos seis casos particulares: quando um hamiltoniano de BdG tem ou não TRS, quando ele tem ou não simetria SU(2) e quando ele tem ou não simetria S_z .

Caso 1: sem TRS e sem simetria SU(2) (classe D) – Um exemplo desse hamiltoniano é o supercondutor de onda- p , sem spin (ou spin inteiro), bidimensional. No espaço dos momentos, a matriz hamiltoniano pode ser escrita na forma

$$H(k) = \delta(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + \varepsilon_k \sigma_z, \quad (8.25)$$

onde $k = (k_x, k_y)$ é o momento bidimensional, δ é a amplitude do parâmetro de ordem e ε_k é a dispersão da energia.

Caso 2: com TRS e sem simetria SU(2) (classe DIII) – Um exemplo de um hamiltoniano dessa classe é um supercondutor de onda- p_x (ou de onda- p_y) com o vetor \mathbf{d} que não aponta na direção z , dado pela equação (8.3), na qual

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_0 &= \varepsilon_k \sigma_0, \\ \Delta &= (\mathbf{d}_k \cdot \boldsymbol{\sigma})(i\sigma_y), \end{aligned} \quad (8.26)$$

onde $\mathbf{d}_k = \delta(-k_x, k_y, 0)$.

Caso 3: sem TRS e com simetria S_z (classe A) – Um exemplo é um supercondutor de onda- p , com spin fracionário e vetor \mathbf{d} paralelo a direção z . O hamiltoniano desse modelo é dado pelas equações (8.26) com $\mathbf{d}_k = \delta(0, 0, k_x + ik_y)$.

Caso 4: com TRS e com simetria S_z (classe AIII) – Um exemplo desses hamiltonianos é o SC de onda- p_x (ou de onda- p_y), com spin fracionário e vetor \mathbf{d} paralelo a direção z . O hamiltoniano desse modelo é dado pelas equações (8.26) com $\mathbf{d}_{k_x} = \delta(0, 0, k_x)$ (ou com $\mathbf{d}_{k_y} = \delta(0, 0, k_y)$).

Caso 5: sem TRS e com simetria SU(2) (classe C) – Um exemplo é o supercondutor de onda- $(d + id)$, cujo hamiltoniano pode ser expresso por

$$\hat{H} = \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{-k,\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{k\uparrow} & \delta_k \\ \delta_k^\dagger & -\xi_{-k\downarrow}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} \\ \hat{c}_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (8.27)$$

com $\xi_{k\uparrow} = \xi_{k\downarrow}$ e $\delta_k = d_1(k_x^2 - k_y^2) + id_2 k_x k_y$.

Caso 6: com TRS e com simetria SU(2) (classe CI) – Um exemplo desse sistema é o supercondutor de onda- d , cujo hamiltoniano é descrita pela equação (8.27) com $\delta_k = d(k_x^2 - k_y^2)$.

Um resumo da classificação do hamiltoniano de BdG, nos casos aqui considerados, pode ser visto na tabela 1. Uma classificação mais completa vê-se na referência [66].

Classe	TRS	SLS	SU(2)	S_z	classificação topológica
D	×	×	×	×	\mathbb{Z}
A	×	×	×	○	\mathbb{Z}
C	×	×	○	○	\mathbb{Z}
DIII	○	○	×	×	\mathbb{Z}_2
AIII	○	○	×	○	–
CI	○	○	○	○	–

Tabela 1 – Classificação dos hamiltonianos BdG 2D, com PHS, de acordo com suas simetrias (TRS e/ou SLS e/ou SU(2) e/ou S_z) e a classificação topológica correspondente. O símbolo ○ representa que a respectiva simetria está presente e × representa o caso contrário.

8.2 Equações de Bogoliubov-de Gennes

A matemática das equações de Bogoliubov-de Gennes será tratada da maneira mais geral possível e o contexto dessa formulação será feito no espaço real. Em seguida serão desenvolvidos dois exemplos no espaço dos momentos. Inicialmente, suponha um sistema fermiônico composto por N elementos posicionados em uma rede finita, tal que

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}_a; \quad a = 1, \dots, N \quad (8.28)$$

sendo a o posicionamento de uma partícula, ou buraco, nessa rede. Suponha também que esse hamiltoniano seja quadrático escrito na sua forma mais geral,

$$\hat{H}_a = \mathbf{C}_a^\dagger \mathbf{H}_a \mathbf{C}_a, \quad (8.29)$$

sendo \mathbf{C}_a uma representação dos operadores de aniquilação (c_a) e/ou criação (c_a^\dagger), os quais obedecem as relações de anti-comutação

$$\{c_a^\dagger, c_{a'}\} = \delta_{a,a'}, \quad (8.30)$$

$$\{c_a, c_{a'}\} = \{c_a^\dagger, c_{a'}^\dagger\} = 0.$$

Para resolver o sistema (encontrar as energias, ou o espectro de bandas) usamos a transformação de Bogoliubov-de Gennes que consiste em definir novos operadores de criação (γ_b^\dagger) e aniquilação (γ_b), tais que diagonalizam

o hamiltoniano, ou seja,

$$\hat{H} = E_0 + \sum_b \mathbf{E}_b \gamma_b^\dagger \gamma_b, \quad (8.31)$$

sendo γ_b uma representação dos novos operadores, que também obedecem às relações de anti-comutação (8.30) e \mathbf{E}_b uma matriz diagonal. A relação mais geral entre os antigos operadores e os novos é definida através das equações de Bogoliubov:

$$\mathbf{C}_a \equiv \sum_b \mathbf{U}_{a,b} \gamma_b \quad \text{com} \quad \mathbf{U}_{a,b}^\dagger \mathbf{U}_{a,b} = 1. \quad (8.32)$$

Para obter completamente a transformação é preciso determinar a matriz $\mathbf{U}_{a,b}$. Para isso, inicia-se por calcular o comutador do operador aniquilação antigo com o hamiltoniano, i.e.:

$$[\mathbf{C}_a, \hat{H}] = \mathbf{H}_a \mathbf{C}_a = \sum_b \mathbf{H}_a \mathbf{U}_{a,b} \gamma_b. \quad (8.33)$$

Convém relembrar da seguinte relação entre as operações comutador e anti-comutador de operadores:

$$[A, BC] = \{A, B\} C - B \{A, C\}. \quad (8.34)$$

Por outro lado, o comutador do operador aniquilação com o hamiltoniano, já diagonalizado na nova base de operadores (veja equação (8.31)), é:

$$[\mathbf{C}_a, \hat{H}] = \sum_b \mathbf{U}_{a,b} [\gamma_b, \hat{H}] = \sum_b \mathbf{U}_{a,b} \mathbf{E}_b \gamma_b. \quad (8.35)$$

Finalmente, compara-se os coeficientes de γ_b nas equações (8.33) e (8.35) e obtém-se:

$$\mathbf{U}_{a,b}^\dagger \mathbf{H}_a \mathbf{U}_{a,b} = \mathbf{E}_b. \quad (8.36)$$

Vê-se então que, diagonalizando a matriz hamiltoniano \mathbf{H}_a , obtém-se as energias definidas na matriz diagonal \mathbf{E}_b e os autovetores serão na verdade a matriz transformação de Bogoliubov $\mathbf{U}_{a,b}$. Uma formulação semelhante a essa é encontrada na seção II da referência 117. Exemplos do uso das equações de Bogoliubov no espaço real podem ser encontradas no capítulo 5 da referência 119, e também nas ref. 120 e 121.

8.2.1 Exemplo 1: hamiltoniano quadrático no espaço dos momentos

Considere um sistema fermiônico, com spin, composto por n elementos representados no espaço dos momentos, no qual cada momento k é descrito pelo hamiltoniano quadrático

$$\widehat{H} = \sum_k \widehat{H}_k, \quad (8.37)$$

tal que:

$$\widehat{H}_k = \mathbf{C}_k^\dagger \mathbf{H}_k \mathbf{C}_k; \quad k \in [-\pi, \pi] \quad (8.38)$$

sendo que a matriz hamiltoniano tem dimensão 2×2 e pode ser definida genericamente como:

$$\mathbf{H}_k \equiv \begin{pmatrix} H_1 & H_2 \\ H_3 & H_4 \end{pmatrix}. \quad (8.39)$$

E os operadores fermiônicos de aniquilação são definidos na forma de um vetor coluna de operadores fermiônicos com spin

$$\mathbf{C}_k \equiv \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow} & c_{k,\downarrow} \end{pmatrix}^T. \quad (8.40)$$

As equações de Bogoliubov-de Gennes são definidas tais que os novos operadores diagonalizam o hamiltoniano, veja eq. (8.31). Neste as equações que relacionam os operadores assumem a sua forma geral:

$$c_{k,\sigma} \equiv \sum_{n=1}^2 [u_n(k, \sigma) \gamma_n]; \quad \sigma = \{\uparrow, \downarrow\} \quad (8.41)$$

lembrando que os novos operadores também obedecem as relações de anti-comutação descritas na equação (8.30).

Definidas as equações de Bogoliubov, calcula-se o comutador do operador aniquilação com o hamiltoniano, ainda não diagonalizado, em termos dos novos operadores. Se expandir as equações (8.38), (8.39) e (8.40) então o hamiltoniano, para cada momento k , assume a forma:

$$\begin{aligned} \widehat{H}_k = & H_1 c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + H_2 c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow} \\ & H_3 c_{k,\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + H_4 c_{k,\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow}. \end{aligned} \quad (8.42)$$

Recordando a equação (8.34) e as relações de anti-comutação entre os operadores (8.30), fica trivial calcular o comutador dos operadores aniquilação com o hamiltoniano:

$$\left[c_{k,\uparrow}, \hat{H} \right] = \sum_{k'} \left[c_{k,\uparrow}, \hat{H}_{k'} \right] = H_1 c_{k,\uparrow} + H_2 c_{k,\downarrow}, \quad (8.43)$$

$$\left[c_{k,\downarrow}, \hat{H} \right] = \sum_{k'} \left[c_{k,\downarrow}, \hat{H}_{k'} \right] = H_3 c_{k,\uparrow} + H_4 c_{k,\downarrow}, \quad (8.44)$$

faltando apenas substituir os operadores antigos pelos novos (veja equações (8.41)) para obter as seguintes expressões:

$$\left[c_{k,\uparrow}, \hat{H} \right] = \sum_n \left(H_1 u_n(k, \uparrow) + H_2 u_n(k, \downarrow) \right) \gamma_n, \quad (8.45)$$

$$\left[c_{k,\downarrow}, \hat{H} \right] = \sum_n \left(H_3 u_n(k, \uparrow) + H_4 u_n(k, \downarrow) \right) \gamma_n. \quad (8.46)$$

Feito isso, é preciso calcular o comutador do operador aniquilação com o hamiltoniano, agora já diagonalizado em termos dos novos operadores, seja ele:

$$\hat{H} = E_0 + \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n. \quad (8.47)$$

Para facilitar o cálculo, vê-se das equações (8.34) e (8.30) que o comutador do novo operador com o hamiltoniano é:

$$\left[\gamma_n, \hat{H} \right] = \sum_{n'} E_{n'} \left[\gamma_n, \gamma_{n'}^\dagger \gamma_{n'} \right] = E_n \gamma_n, \quad (8.48)$$

$$\left[\gamma_n^\dagger, \hat{H} \right] = \sum_{n'} E_{n'} \left[\gamma_n^\dagger, \gamma_{n'}^\dagger \gamma_{n'} \right] = -E_n \gamma_n^\dagger. \quad (8.49)$$

E facilmente calcula-se o comutador do operador aniquilação (via equações (8.41)) com o hamiltoniano diagonalizado:

$$\left[c_{k,\uparrow}, \hat{H} \right] = \sum_n u_n(k, \uparrow) \left[\gamma_n, \hat{H} \right] = \sum_n u_n(k, \uparrow) E_n \gamma_n, \quad (8.50)$$

$$\left[c_{k,\downarrow}, \hat{H} \right] = \sum_n u_n(k, \downarrow) \left[\gamma_n, \hat{H} \right] = \sum_n u_n(k, \downarrow) E_n \gamma_n. \quad (8.51)$$

Os coeficientes das equações de Bogoliubov-de Gennes são obtidos comparando termo a termo os coeficientes do operador γ_n , a partir das equações (8.45) e (8.50), e também das equações (8.46) e (8.51). O sistema de equações resultante pode ser escrito na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} H_1 & H_2 \\ H_3 & H_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n(k, \uparrow) \\ u_n(k, \downarrow) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_n(k, \uparrow) \\ u_n(k, \downarrow) \end{pmatrix}. \quad (8.52)$$

Considerando todos os valores de n , a equação anterior pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} H_1 & H_2 \\ H_3 & H_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1(k, \uparrow) & u_2(k, \uparrow) \\ u_1(k, \downarrow) & u_2(k, \downarrow) \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} u_1(k, \uparrow) & u_2(k, \uparrow) \\ u_1(k, \downarrow) & u_2(k, \downarrow) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.53)$$

Vê-se então que, para cada momento k , diagonalizando a matrix hamiltoniano \mathbf{H}_k obtém-se as energias E_n , sendo que os autovetores correspondentes serão na verdade os coeficientes da transformação de Bogoliubov $u_n(k, \sigma)$. Outros exemplos do uso das equações de Bogoliubov no espaço dos momentos podem ser encontradas no capítulo 10 da referência 122.

8.2.2 Exemplo 2: supercondutor no espaço dos momentos

Considere um sistema fermiônico supercondutor, com spin, composto por n elementos representados no espaço dos momentos, no qual cada momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ é descrito pelo hamiltoniano quadrático $\hat{H} = \sum_k \hat{H}_k = \sum_k \mathbf{C}_k^\dagger \mathbf{H}_k \mathbf{C}_k$, com $\mathbf{k} \in [-\pi, \pi]$, sendo que agora a matrix hamiltoniano tem dimensão 4x4 e pode ser escrita na sua forma mais geral dada por:

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} H_0(k) & \Delta(k) \\ \Delta^\dagger(k) & -H_0^T(-k) \end{pmatrix}, \quad (8.54)$$

na qual $H_0(k)$ e $\Delta(k)$ representam matrizes de dimensão 2×2 . Os operadores fermiônicos de aniquilação são definidos na forma de um vetor coluna de

operadores fermiônicos com spin, tais que

$$\mathbf{C}_k \equiv \left(c_{k,\uparrow} \quad c_{k,\downarrow} \quad c_{-k,\uparrow}^\dagger \quad c_{-k,\downarrow}^\dagger \right)^T. \quad (8.55)$$

Para efeito de praticidade, pode-se definir relações de anti-comutação entre os vetores coluna de operadores da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \left\{ \mathbf{C}_k^\dagger, \mathbf{C}_{k'} \right\} &\equiv \frac{1}{N} \left(\mathbf{C}_k^\dagger \mathbf{C}_{k'} + \left(\mathbf{C}_{k'} \mathbf{C}_k^\dagger \right)^T \right) = \delta_{k,k'}, \\ \left\{ \mathbf{C}_k, \mathbf{C}_{k'} \right\} &\equiv \frac{1}{N} \left(\left(\mathbf{C}_k \right)^T \mathbf{C}_{k'} + \left(\mathbf{C}_{k'} \right)^T \mathbf{C}_k \right) = 0, \\ \left\{ \mathbf{C}_k^\dagger, \mathbf{C}_{k'}^\dagger \right\} &\equiv \frac{1}{N} \left(\mathbf{C}_k^\dagger \left(\mathbf{C}_{k'}^\dagger \right)^T + \mathbf{C}_{k'}^\dagger \left(\mathbf{C}_k^\dagger \right)^T \right) = 0, \end{aligned} \quad (8.56)$$

sendo N o número de componentes que constituem o vetor \mathbf{C}_k .

As equações de Bogoliubov-de Gennes são definidas tais que os novos operadores diagonalizam o hamiltoniano,

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{n=1}^4 \mathbf{E}_n \gamma_n^\dagger \gamma_n. \quad (8.57)$$

As equações de Bogoliubov, que relacionam os operadores, assumem a sua forma geral:

$$\mathbf{C}_k \equiv \sum_n \mathbf{U}_{k,n} \gamma_n \quad \text{com} \quad \mathbf{U}_{k,n}^\dagger \mathbf{U}_{k,n} = 1, \quad (8.58)$$

sendo que os novos operadores também obedecem as relações de anti-comutação (8.30) e são definidos na forma:

$$\gamma_n = \left(\gamma_n \quad \gamma_n^\dagger \right)^T. \quad (8.59)$$

É importante notar que os novos operadores, escritos na forma de vetor coluna, também obedecem as relações de anti-comutação segundo as equações

(8.56), com $N = 2$. Por fim, a matriz $\mathbf{U}_{k,n}$ é definida como:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{k,n} &= \begin{pmatrix} u_n(k, \sigma) & v_n^*(k, \sigma) \\ v_n(-k, \sigma) & u_n^*(-k, \sigma) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} u_n(k, \uparrow) & v_n^*(k, \uparrow) \\ u_n(k, \downarrow) & v_n^*(k, \downarrow) \\ v_n(-k, \uparrow) & u_n^*(-k, \uparrow) \\ v_n(-k, \downarrow) & u_n^*(-k, \downarrow) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.60)$$

Com a finalidade de encontrar os coeficientes das equações de Bogoliubov calcula-se o comutador do operador aniquilação com o hamiltoniano, ainda não diagonalizado, em termos dos novos operadores,

$$\begin{aligned} [\mathbf{C}_k, \hat{H}] &= \sum_{k'} \left(\{ \mathbf{C}_k, \mathbf{C}_{k'}^\dagger \} \mathbf{H}_{k'} \mathbf{C}_{k'} + \mathbf{C}_{k'}^\dagger \mathbf{H}_{k'} \{ \mathbf{C}_k, \mathbf{C}_{k'} \} \right) \\ &= \mathbf{H}_k \mathbf{C}_k = \sum_n \mathbf{H}_k \mathbf{U}_{k,n} \gamma_n. \end{aligned} \quad (8.61)$$

Por outro lado, o comutador do operador aniquilação com o hamiltoniano já diagonalizado na nova base de operadores, eq. (8.57), é:

$$[\mathbf{C}_k, \hat{H}] = \sum_n \mathbf{U}_{k,n} [\gamma_n, \hat{H}] = \sum_n \mathbf{U}_{k,n} \mathbf{E}_n \gamma_n \quad (8.62)$$

com

$$\mathbf{E}_n = \begin{pmatrix} E_n & 0 \\ 0 & -E_n \end{pmatrix}. \quad (8.63)$$

Os coeficientes das equações de Bogoliubov-de Gennes são obtidos comparando termo a termo os coeficientes do operador γ_n a partir das equações (8.61) e (8.62), ou seja,

$$\mathbf{U}_{k,n}^\dagger \mathbf{H}_k \mathbf{U}_{k,n} = \mathbf{E}_n. \quad (8.64)$$

Vê-se então que, para cada momento \mathbf{k} , diagonalizando a matrix hamiltoniano \mathbf{H}_k obtêm-se as energias \mathbf{E}_n , sendo que os autovetores correspondentes

serão na verdade a matriz transformação de Bogoliubov $U_{k,n}$. Uma apreciação mais detalhada deste exemplo encontra-se no apêndice C. Outros exemplos do uso das equações de Bogoliubov no espaço dos momentos, com spin, podem ser encontradas nas referências [49, 116, 123]

Técnicas da informação quântica

9.1 Técnicas da informação quântica

A falta de um parâmetro de ordem em sistemas topológicos faz com que a teoria de Landau, que até então descrevia todas as fases da matéria, venha a ser superada. O interesse desse estudo foi aplicar alguns métodos de informação quântica para detectar as fases topológicas de um supercondutor topológico, bem como suas transições. A seguir descrevemos um pouco cada um dos métodos usados e, sempre que possível, referenciar o uso dos mesmos em outros sistemas topológicos. No contexto de hamiltoniano quadrático que temos visto até então a entropia de emaranhamento pode ser obtida calculando os autovalores da matriz de correlação de partícula única definida inteiramente na sub-região A [124, 125, 126, 127, 128]. Primeiro, mostraremos esse procedimento para um sistema supercondutor genérico e definiremos algumas notações que serão usadas nas seções subsequentes, passando pelos conceitos de matriz densidade reduzida e emaranhamento. Em seguida, mostraremos o cálculo da entropia, da fidelidade e faremos uma discussão sobre a entropia topológica do emaranhamento.

Matriz densidade

Considere um sistema descrito pelo hamiltoniano quadrático de n férmions escrito na forma

$$H = \frac{1}{2} C^\dagger \mathbf{H} C, \tag{9.1}$$

sendo $\mathbf{C} = \{c_1, \dots, c_n, c_1^\dagger, \dots, c_n^\dagger\}^T$ um vetor coluna de operadores de criação e aniquilação de n modos fermiônicos e $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$ a matriz hamiltoniano dada por:

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ \Delta^\dagger & -h^T \end{pmatrix}, \quad (9.2)$$

com h e Δ duas matrizes $n \times n$ com as propriedades $h^\dagger = h$ and $\Delta = -\Delta^T$. A matriz densidade térmica correspondente a esse sistema é

$$\rho = \frac{e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger \mathbf{\Omega} \mathbf{C}}}{Z}, \quad (9.3)$$

sendo $\mathbf{\Omega} = \beta \mathbf{H}$, β o inverso da temperatura com

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left[e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger \mathbf{\Omega} \mathbf{C}} \right] \\ &= \text{Tr} \left[U e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger \mathbf{D}_\Omega \mathbf{C}} U^{-1} \right] = \prod_n \text{Tr} \left[e^{-\frac{1}{2}c_n^\dagger \lambda_n c_n + \frac{1}{2}c_n \lambda_n c_n^\dagger} \right] \\ &= \prod_n \left(e^{\frac{1}{2}\lambda_n} + e^{-\frac{1}{2}\lambda_n} \right) = \sqrt{\det \left(e^{\frac{1}{2}\mathbf{\Omega}} + e^{-\frac{1}{2}\mathbf{\Omega}} \right)} \\ &= \sqrt{\det \left(1 + e^{-\mathbf{\Omega}} \right)}, \end{aligned} \quad (9.4)$$

onde usamos a relação $\mathbf{\Omega} = U \mathbf{D}_\Omega U^{-1}$. Note que a matriz densidade e o hamiltoniano $\mathbf{\Omega}$ são diagonais na mesma base.

9.1.1 Matriz densidade reduzida e correlação

Se definirmos a matriz densidade de um sistema composto $A + \bar{A}$ por $\rho_{A, \bar{A}}$, onde definimos \bar{A} como o complemento de A , então chamamos de matriz densidade reduzida aquela que descreve o subsistema A tal que

$$\rho_A = \text{Tr}_{\bar{A}} \left[\rho_{A, \bar{A}} \right], \quad (9.5)$$

onde $\text{Tr}_{\bar{A}}$ é o traço sobre os graus de liberdade do subsistema \bar{A} . No entanto, nem sempre se conhece a matriz $\rho_{A, \bar{A}}$ para podermos calcular a matriz densidade reduzida. Por outro lado, podemos obter a matriz densidade reduzida

ρ_A a partir da matriz de correlação

$$\chi = \langle CC^\dagger \rangle. \quad (9.6)$$

Considere a transformação canônica $C^\dagger = \tilde{C}^\dagger R^{-1}$ e $C = R\tilde{C}$ que diagonaliza a matriz hamiltoniano $R^{-1}HR = D$. Usando essa base diagonal para calcular a correlação temos

$$\begin{aligned} \langle C_i C_j^\dagger \rangle &= \text{Tr} \left[\frac{e^{-\frac{1}{2}C^\dagger H C}}{Z} C_i C_j^\dagger \right] = R_{i,k} \text{Tr} \left[\frac{e^{-\frac{1}{2}\tilde{C}^\dagger D \tilde{C}}}{Z} \tilde{C}_k \tilde{C}_{k'}^\dagger \right] R_{k',j}^{-1} \\ &= R_{i,k} [1 + e^{-D}]_{kk'}^{-1} R_{k',j}^{-1} \\ &= [1 + e^{-H}]_{ij}^{-1} \end{aligned}$$

e portanto

$$\chi = \langle CC^\dagger \rangle = [1 + e^{-H}]^{-1}. \quad (9.7)$$

Considere agora a matriz densidade de um sistema composto $A + \bar{A}$ definida na equação (9.3). A partir de $\chi_{i,j} = \langle C_i C_j^\dagger \rangle$, podemos obter a matriz de correlação χ_A , que descreve as correlações do subsistema A , restringindo os índices i e j ao número de graus de liberdade do subsistema A [124]. Sendo assim, podemos inverter a equação (9.7) e calcular a matriz H_A como:

$$H_A = -\ln [\chi_A^{-1} - 1]. \quad (9.8)$$

Por analogia, chamamos H_A de pseudo hamiltoniano, o qual descreve o subsistema A , tal que a matriz densidade reduzida é dada por

$$\rho_A = \frac{e^{-1/2 C_A^\dagger \Omega_A C_A}}{Z_A} \quad \text{com} \quad Z_A = \sqrt{\det(1 + e^{-\Omega_A})}, \quad (9.9)$$

sendo C_A um vetor coluna de operadores de criação e aniquilação restritos ao sub-sistema A e $\Omega_A = \beta H_A$. Perceba que para obtermos a matriz de correlação do subsistema A , seja ela χ_A , não precisamos conhecer a matriz de correlação do sistema global, o que facilita muito a solução do problema através desse método.

9.1.2 Emaranhamento

A mecânica quântica trouxe consigo, dentre vários outros, um fenômeno bastante interessante chamado emaranhamento. Este nos diz que nem sempre dois sistemas podem existir separadamente e disso surgem consequências pouco intuitivas. Nas secções anteriores vimos que estados quânticos são descritos pelas chamadas matrizes densidade (um correspondente à função de partição no caso clássico). Considerando matrizes densidade reduzidas, na qual integra-se sobre parte dos graus de liberdade tal que divide o espaço real em dois subsistemas A e \bar{A} , foi mostrado (no contexto do efeito Hall quântico [129, 130, 131] e no contexto de cadeia de spins acoplados [132] que o estado fundamental do espectro do emaranhamento de A contém informação sobre os estados excitados da fronteira do subsistema A . Em particular, no efeito Hall quântico o espectro do emaranhamento no interior do sistema tem uma estrutura de níveis que coincide com os estados de borda. No caso de duas cadeias de spins de Heisenberg acopladas, o espectro do emaranhamento tem uma estrutura que coincide com as energias de excitação da cadeia única. Outras partições de sistema têm sido consideradas que levam a maiores informações [133]. Considerando partições no espaço dos momentos, foi mostrado que informações sobre os estados de energia excitados de uma cadeia de spins de Heisenberg estão contidas na função de onda do estado fundamental, através do espectro do emaranhamento [134]. Quando as fases topológicas resultam da simetria de inversão [135] foi mostrado que esse espectro nos dá informações ainda mais robustas acerca da topologia do que os estados de borda. Sua utilidade é também evidente na análise do fluxo espectral do espectro do emaranhamento, em particular do *trace index*, que pode estar relacionado a mudanças no número de Chern nos isolantes topológicos [136, 137].

Matematicamente, dizemos que um estado $\rho_{A,\bar{A}}$ é separável se puder ser escrito na forma

$$\rho_{A,\bar{A}} = \rho_A \otimes \rho_{\bar{A}}. \quad (9.10)$$

Os estados que não admitem a forma acima são chamados de estados emaranhados. O espectro do emaranhamento, introduzido por Li e Haldane [129] é definido como o conjunto de autovalores do logaritmo da matriz densidade

reduzida (veja eq. (9.9)):

$$\Omega_A = -\ln \rho_A + c, \quad (9.11)$$

a menos de uma constante de normalização c . O operador de muitos corpos Ω_A pode ser interpretado como um hamiltoniano efetivo se o subsistema A estiver em um estado de Gibbs na temperatura $T = 1$. Para sistemas quadráticos é natural definir o chamado “hamiltoniano do emaranhamento” como:

$$\Omega_A = -\ln \rho_A - \ln Z_A = \frac{1}{2} \mathbf{C}^\dagger \mathbf{\Omega}_A \mathbf{C}, \quad (9.12)$$

sendo que a constante $-\ln Z_A$ foi escolhida de modo que o espectro de Ω_A tenha simetria partícula-buraco e lembrando que $\mathbf{\Omega}_A$ pode ser calculado a partir da equação (9.8). Os autovalores de Ω_A podem ser escritos como:

$$\Lambda_{\mathbf{n}} = \sum_{\alpha: \varepsilon_\alpha > 0} (n_\alpha - 1/2) \varepsilon_\alpha, \quad (9.13)$$

no qual ε_α 's são os autovalores de $\mathbf{\Omega}_A$ e a soma é definida somente para os valores positivos de ε_α . O vetor \mathbf{n} rotula os autovetores de Ω_A com $n_\alpha = 0, 1$ representando o número de ocupação do modo α . Como $\mathbf{\Omega}_A$ é o operador de partícula única correspondente a Ω_A , ele é normalmente chamado de hamiltoniano de partícula única e dizemos que ε_α 's formam o espectro do emaranhamento de partícula única [135, 136, 137].

9.1.3 Entropia do emaranhamento

Fases topológicas são caracterizadas por estados fundamentais degenerados [29, 30] e podem ser estudadas através da entropia de von Neumann de sistemas à temperatura nula (uma medida direta da degenerescência). Microscopicamente, fases com ordem topológica correspondem a padrões de emaranhamentos quânticos de longo alcance [76]. Um estado possui exclusivamente emaranhamentos de curto alcance se e somente se o mesmo puder ser transformado em um estado não emaranhado (i.e., um produto direto de estados puros) através de uma evolução unitária local, chamada também de evolução adiabática (em outras palavras, perturbações locais removem

apenas emaranhamentos de curto alcance). Também é verdade que todos os estados com emaranhamentos de curto alcance podem ser transformados uns nos outros através de evoluções adiabáticas. Estados com essas características são ditos de ordem topológica trivial, portanto, ordens topológicas não-triviais estão relacionadas com emaranhamentos de longo alcance, em outras palavras, a ordem topológica descreve uma classe de sistemas equivalentes definidos por evoluções unitárias locais. Nesse sentido, pode-se dizer que a teoria de Landau descreve apenas emaranhamentos quânticos de curto alcance e que os emaranhamentos de longo alcance é que são responsáveis pelas ordens topológicas.

Mas a história não acaba por aqui, também existem fases topológicas com emaranhamento de curto alcance, nas quais a topologia existe por conta de alguma simetria existente [74, 75]. Nesse caso, algumas medidas da entropia não detectam a fase topológica. Entretanto, veremos durante a apresentação dos resultados deste trabalho, que a fase topológica volta a ser detectada através de uma escolha particular na geometria do sistema.

Sabe-se que em um sistema quântico, descrito pela matriz densidade ρ , a entropia de von Neumann é

$$S(\rho) = -\text{Tr} \rho \ln \rho. \quad (9.14)$$

Se esse sistema tem uma matriz densidade na forma definida pela equação (9.3), então a entropia pode ser rescrita como

$$\begin{aligned} S(\rho) &= -\text{Tr} \left[\frac{e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger \mathbf{\Omega} \mathbf{C}}}{Z} \left(-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger \mathbf{\Omega} \mathbf{C} - \ln Z \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\frac{e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger \mathbf{\Omega} \mathbf{C}}}{Z} (\mathbf{C}^\dagger \mathbf{\Omega} \mathbf{C}) \right] + \ln Z \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\frac{e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger \mathbf{\Omega} \mathbf{C}}}{Z} \text{tr} [\mathbf{\Omega} (1 - \mathbf{C} \mathbf{C}^\dagger)] \right] + \ln Z \\ &= \frac{1}{2} \text{tr} \left[\mathbf{\Omega} [1 + e^{\mathbf{\Omega}}]^{-1} + \ln (1 + e^{-\mathbf{\Omega}}) \right], \end{aligned} \quad (9.15)$$

ou ainda,

$$S(\rho) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left[\varepsilon_{\alpha} [1 + e^{\varepsilon_{\alpha}}]^{-1} + \ln(1 + e^{-\varepsilon_{\alpha}}) \right], \quad (9.16)$$

onde ε_{α} representa os autovalores de $\mathbf{\Omega}$, Tr é o traço sobre o número de ocupação dos estados e tr é o traço sobre os elementos da matriz.

Define-se entropia de emaranhamento aquela calculada a partir da matriz densidade reduzida ρ_A definida na equação (9.9), tal que,

$$\begin{aligned} S[\rho_A] &= \frac{1}{2} \text{tr} \left[\mathbf{\Omega}_A [1 + e^{\mathbf{\Omega}_A}]^{-1} + \ln(1 + e^{-\mathbf{\Omega}_A}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left[\varepsilon_{A;\alpha} [1 + e^{\varepsilon_{A;\alpha}}]^{-1} + \ln(1 + e^{-\varepsilon_{A;\alpha}}) \right], \end{aligned} \quad (9.17)$$

sendo que $\varepsilon_{A;\alpha}$ representa os autovalores de $\mathbf{\Omega}_A$. Por outro lado, vimos que é possível obter $\mathbf{\Omega}_A$ a partir da matriz de correlação, eq. (9.8), que substituída na equação da entropia fica:

$$\begin{aligned} S &= -\frac{1}{2} \text{tr} \{ [1 - \chi_A] \ln [1 - \chi_A] + \chi_A \ln [\chi_A] \} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} (1 - \lambda_{\alpha}) \ln(1 - \lambda_{\alpha}) + \lambda_{\alpha} \ln \lambda_{\alpha}. \end{aligned} \quad (9.18)$$

Notando que $\varepsilon_{\alpha} = -\ln(\lambda_{\alpha}^{-1} - 1)$, a Eq.(9.18) também pode ser escrita por

$$S[\rho_A] = - \int d\omega \nu(\omega) n_f(\omega) \ln n_f(\omega), \quad (9.19)$$

onde $\nu(\omega) = \sum_{\alpha} \delta(\omega - \varepsilon_{\alpha})$ é a densidade de estados partícula-buraco simétrica [$\nu(\omega) = \nu(-\omega)$] de um Hamiltoniano de uma única partícula $\mathbf{\Omega}_A$, e

$$n_f(\omega) = [1 + e^{\beta\omega}]^{-1} \quad (9.20)$$

é a função de Fermi tomada na Eq.(9.19) para que a temperatura seja unitária $\beta = 1$. Dessa forma, a interpretação da Eq.(9.19) é nítida: é simplesmente dada pela soma das entropias dos estados individuais de uma única partícula, ponderados pela estatística de Fermi.

Em seguida, estudamos dois sistemas de geometrias diferentes, ilustrados na Fig. 15.

9.1.4 Subregião de um sistema infinito

A matriz de correlação de um sistema supercondutor infinito com invariância translacional pode ser descrito como

$$\chi_{r,r'} = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \chi(\mathbf{k}), \quad (9.21)$$

com $\chi(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{C}_k \mathbf{C}_k^\dagger \rangle = \mathbf{1} - n_f [\mathbf{H}(\mathbf{k})]$, calculado para um ensemble de Gibbs térmico com temperatura $T = 1/\beta$. Para o estado fundamental, podemos simplesmente tomar o limite $\beta \rightarrow \infty$, neste caso n_f torna-se uma função teta de Heaviside. Diagonalizando $\mathbf{H}(\mathbf{k})$ explicitamente somos então capazes de calcular χ_A ao calcular numericamente a integral na Eq.(9.21) para $r, r' \in A$.

9.1.5 Subregião de um sistema cilíndrico finito

Para um sistema com uma geometria cilíndrica (veja a Fig. 15), a matriz de correlação $\chi(\mathbf{k})$ é descrita como uma função do momento da direção compacta (aqui identificada como k_x):

$$\chi_{r,r'} = \frac{1}{L_x} \sum_{k_x} e^{ik_x(x-x')} \chi_{y,y'}(k_x), \quad (9.22)$$

onde $\chi(k_x) = \mathbf{1} - n_f [\mathbf{H}(k_x)]$ com $\mathbf{H}(k_x)$ sendo o componente k_x do Hamiltoniano transformado por Fourier ao longo da direção x , e com condições

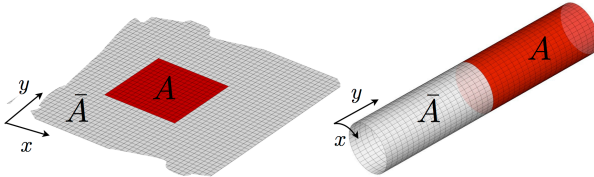


Figura 15 – Domínio A e seu complemento \bar{A} para as duas geometrias consideradas: Esquerda - subregião de um sistema infinito; Direita - metade de uma seção de um cilindro finito.

de contorno abertas ao longo da direção y . Restringindo ainda mais essa matriz a um subsistema A que respeita a invariância translacional ao longo da direção x , pode-se definir

$$\chi_A(k_x) = \sum_{y, y' \in A} |y\rangle \chi_{y, y'}(k_x) \langle y'| \quad (9.23)$$

como a matriz de correlação de uma única partícula calculado na direção k_x no domínio A . Da mesma maneira, o Hamiltoniano de emaranhamento pode ser calculado na direção k_x : $\Omega_A(k_x) = -\ln[\chi_A(k_x)^{-1} - 1]$. Sendo uma função de k_x , a entropia de emaranhamento portanto é descrita como $S[\rho_A] = \sum_{k_x} S_{k_x}$ com

$$S_{k_x} = \sum_{\alpha} \mathcal{I}[\varepsilon_{\alpha}(k_x)], \quad (9.24)$$

sendo a contribuição de cada setor de momento, onde $\varepsilon_{\alpha}(k_x)$ são os autovalores de $\Omega_A(k_x)$ e

$$\mathcal{I}(\omega) = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{1+e^{-\omega}} \ln \frac{1}{1+e^{-\omega}} + \frac{1}{1+e^{\omega}} \ln \frac{1}{1+e^{\omega}} \right]. \quad (9.25)$$

9.1.6 Fidelidade

Um dos interesses no campo da informação quântica é comparar dois estados quânticos; o quanto eles se parecem e o quão distante eles estão. Nesse contexto define-se algumas quantidades que, em alguns casos particulares, assemelham-se com distância euclidiana. Em física do estado sólido, a distinção entre estados tem sido usada como um possível critério para estudar transições de fase quânticas. Neste estudo, fizemos uso de uma grandeza chamada fidelidade. Veremos que, por sua natureza, a fidelidade entre estados fundamentais puros sinaliza uma mudança de estado quântico quando aproxima-se de uma transição de fase quântica [78, 82, 105, 106, 138, 139, 140, 141, 142, 143, 144]. A fidelidade entre estados mistos também tem sido usada como assinatura de transições de fase quânticas [121, 145] e para distinguir diferentes estados da matéria em temperaturas finitas [146, 147, 148]. Como uma medida global de distinção de estados, a fidelidade pode ser interpretada como um parâmetro de ordem geral, pois para estados idênticos

essa medida é unitária e nas transições de fase, como há mistura de diferentes estados, a fidelidade aproxima-se de zero.

Dadas duas matrizes densidade ρ_1 e ρ_2 o operador fidelidade é definido por

$$\mathcal{F}(1|2) = \sqrt{\sqrt{\rho_1}\rho_2\sqrt{\rho_1}}. \quad (9.26)$$

Quando ambas as matrizes densidade podem ser escritas como exponenciais de hamiltonianos quadráticos na forma da equação (9.3), seja ela,

$$\rho_i = \frac{e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger\Omega_i\mathbf{C}}}{Z_i}, \quad (9.27)$$

com $Z_i = \sqrt{\det(1 + e^{-\Omega_i})}$, o operador fidelidade pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(1|2) &= \sqrt{\sqrt{\rho_1}\rho_2\sqrt{\rho_1}} \\ &= \sqrt{\frac{e^{-\frac{1}{4}\mathbf{C}^\dagger\Omega_1\mathbf{C}}e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger\Omega_2\mathbf{C}}e^{-\frac{1}{4}\mathbf{C}^\dagger\Omega_1\mathbf{C}}}{Z_1Z_2}} \\ &= \frac{e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger\tilde{\Omega}\mathbf{C}}}{\sqrt{Z_1Z_2}}, \end{aligned} \quad (9.28)$$

onde $e^{-2\tilde{\Omega}} = e^{-\frac{1}{2}\Omega_1}e^{-\Omega_2}e^{-\frac{1}{2}\Omega_1}$.

Finalmente a fidelidade $F(1, 2)$ entre os estados ρ_1 e ρ_2 é definida como o traço do operador fidelidade $\mathcal{F}(1|2)$, ou seja,

$$\begin{aligned} F(1, 2) &= \text{Tr}\mathcal{F}(1|2) = \frac{\text{Tr}\left[e^{-\frac{1}{2}\mathbf{C}^\dagger\tilde{\Omega}\mathbf{C}}\right]}{\sqrt{Z_1Z_2}} = \sqrt{\frac{\det\left(1 + \sqrt{e^{-\frac{1}{2}\Omega_1}e^{-\Omega_2}e^{-\frac{1}{2}\Omega_1}}\right)}{\sqrt{\det(1 + e^{-\Omega_1})\det(1 + e^{-\Omega_2})}}} \\ &= \sqrt{\frac{\det\left(1 + \sqrt{e^{-\Omega_2}e^{-\Omega_1}}\right)}{\sqrt{\det(1 + e^{-\Omega_1})\det(1 + e^{-\Omega_2})}}}. \end{aligned}$$

Note que o cálculo da fidelidade para $F(1, 2)$ é igual ao de $F(2, 1)$. Além do mais, a fidelidade aproxima-se do valor zero quanto mais distantes estiverem os dois estados. Por outro lado, a fidelidade aproxima-se do valor um quanto mais próximos estiverem os dois estados, ou seja, $0 \leq F(1, 2) \leq 1$.

Pode-se também considerar o espectro do operador fidelidade [149, 150], $\mathcal{F}(\rho_1, \rho_2)$. O conjunto de valores λ_i (espectro do operador fidelidade) e

$-\ln \lambda_i$ (espectro da fidelidade) fornecem maiores informações quando comparados com a medida da fidelidade apenas – análogo à informação extra fornecida pelo espectro do emaranhamento [129], ou entropia do emaranhamento, quando comparado à entropia de von Neumann. No caso de dois estados misto idênticos, o operador \mathcal{F} tem um conjunto de autovalores, $\lambda_i = r_i$, tal que $-\ln r_i = \varepsilon_i$ reduz-se ao espectro do emaranhamento.

9.1.7 Entropia do emaranhamento topológico

No limite termodinâmico, o estado fundamental de um hamiltoniano local com um gap de energia finito é caracterizado por correlações de curto alcance em observáveis locais. Para tais sistemas, o estado fundamental da entropia do emaranhamento de um subsistema A (sendo ρ_A a matriz densidade reduzida desse subsistema) segue a chamada lei da área, ou seja, ela é proporcional ao tamanho da borda de A , no limite assintótico de grande sistemas. Para um sistema bidimensional de perímetro P , a lei da área traduz-se como:

$$S_A = \xi_A P - \gamma_A + \dots \quad (9.29)$$

Aqui, ξ_A é um termo constante não universal e que depende da geometria do subsistema A , γ_A contém a contribuição não extensiva para a entropia e \dots representa outras contribuições que desaparecem com $L \rightarrow \infty$.

Se uma fase tiver ordem topológica, na qual um emaranhamento de longo alcance é esperado, então deve existir uma redução na entropia, respeitando a lei da área em relação a um sistema não topológico com gap. Espera-se que correções não extensivas incluam efeitos sutis devido a presença ou ausência de ordem topológica ou ordem de longo alcance.

Uma prescrição para extrair o conteúdo topológico da entropia do emaranhamento foi dada por Kitaev e Preskil[107] e ao mesmo tempo por Levin e Wen[108]. Eles engenharam modos particulares de extrair a contribuição universal topológica, que representaremos por γ_{Topo} , para os termos não extensivos. Esta quantidade, dita entropia do emaranhamento topológico, foi proposta para caracterizar certas fases topológicas, em relação à dimensão quântica D do sistema: $\gamma_{\text{Topo}} = \ln(D)$ [107, 108] – dimensão quântica refere-

se à degenerescência do estado de menor energia do sistema¹. Em uma rede quadrada, a TEE pode ser calculada a partir da expressão:

$$S_{\text{Topo}} = S_A + S_B + S_C - S_{AB} - S_{BC} - S_{AC} + S_{ABC}, \quad (9.30)$$

sendo S_i a entropia calculada para as regiões mostradas na figura 16, com $S_{\text{Topo}} = -2\gamma_{\text{Topo}}$.

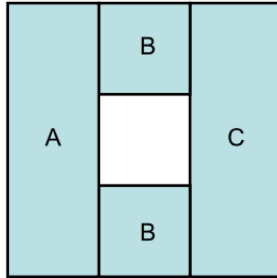


Figura 16 – Geometria usada para calcular a entropia do emaranhamento topológico.

Desde então, γ_{Topo} tem sido usada como uma assinatura de ordem topológica em vários sistemas, por exemplo, em modelos de dímero quântico frustrado e o modelo favo de mel de Kitaev[81, 151], ou ainda, aplicada para detectar ordem topológica em estados de spin líquido[152, 153]. Um rico conjunto de diferentes comportamentos têm sido encontrado, em particular para sistemas com gap que espontaneamente quebram uma simetria discreta, na qual correções para a lei da área foram observadas. Essas correções são negativas e são dadas pelo logaritmo do número de estados fundamentais degenerados[154]. Para sistemas com gap e excitações de quase partículas, mas modos coletivos sem gap resultantes de uma quebra espontânea de simetria contínua, também apresentam correções negativas que divergem logaritmicamente conforme o aumento do tamanho do sistema [155].

Sistemas descritos por hamiltonianos que são quadráticos em seus operadores eletrônicos, tais como isolantes topológicos e supercondutores topológicos, γ_{Topo} desaparece [156]. Consequentemente, mesmo sistemas que

¹ Uma discussão bastante esclarecedora sobre dimensão quântica é encontrada no fórum <http://physics.stackexchange.com> (procurar por 52537) e referências lá citadas. A discussão é feita pelo usuário Joe – sem maiores referências desse autor.

apresentam fases não-triviais, γ_{Topo} não identifica a ordem topológica [77]. Para um domínio qualquer A , γ_A pode ser diferente de zero e depende da geometria em particular. Isto foi observado, por exemplo, na referência [157], para um supercondutor $p_x + ip_y$ sem spin para o qual γ_A é igual ao número de cantos do domínio. Além do mais, embora o sistema tenha ambas as fases topológicas triviais e não triviais com dimensão quântica $D = 2$, γ_{Topo} desaparece em ambas e não distingue entre essas fases. Uma situação similar foi identificada no contexto do modelo de Kitaev, no qual, para uma geometria cilíndrica, uma contribuição extra para a entropia de emaranhamento ($\ln \sqrt{2}$) foi identificada [158]. Veremos nos resultados um método de extrair as informações topológicas de sistemas com topologia protegida por simetria, a saber, através de uma escolha adequada da geometria do sistema.

Supercondutores topológicos não centrossimétricos

*Uma estrutura cristalina centrossimétrica é aquela que possui um centro de inversão, ou seja, para cada ponto (x, y, z) na célula unitária, existe um ponto indistinguível em $(-x, -y, -z)$. Aquelas figuras que não possuem essa inversão são chamadas de não centrossimétricas, que podem ser classificadas como chiral ou polar. Uma figura chiral é aquela que **não** é idêntica à sua imagem especular, ou melhor, que **não** pode ser mapeada em sua imagem espelhada usando apenas rotação e translação.*

Supercondutividade com topologia não trivial pode ser obtida de diversas maneiras [32]. Neste trabalho, supercondutores não centrossimétricos, que não apresentam paridade bem definida devido à presença do acoplamento SO, são a motivação para o aparecimento de supercondutividade não convencional (com emparelhamentos tripletos dos pares de Cooper). Mas é importante ter em mente que as propriedades não centrossimétricas não são as únicas condições nem para a existência de supercondutores não convencionais, nem para a existência do acoplamento SO. Entretanto, supercondutores não centrossimétricos (NCS) tais como o CePt_3Si [159] e o $\text{Li}_2 \text{Pd}_x \text{Pt}_{3-x} \text{B}$ [160], descoberto mais recentemente, nos quais o emparelhamento de onda- s e onda- p podem coexistir, são ótimos candidatos naturais do ponto de vista experimental. A existência de um gradiente de potencial assimétrico ∇V devido a estrutura cristalina não centrossimétrica do metal faz surgir um acoplamento spin-órbita do tipo Rashba, $(\mathbf{p} \times \nabla V) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ [161], que quebra a simetria de rotação dos spins, sendo \mathbf{p} o momento e $\boldsymbol{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z)$ as matrizes de Pauli. Além disso, sistemas metálicos com estrutura cristalina não centrossimétrica exibem efeitos mag-

netoelétricos não triviais [162, 163, 164, 165, 166]. Em supercondutores não centrossimétricos o acoplamento assimétrico spin-órbita de Rashba é crucial para o aparecimento de fenômenos exóticos como o emparelhamento misto de pares de Cooper, efeitos magnetoelétricos e fases de vórtices helicoidais [166, 167, 168, 169, 170, 171]. Também sabe-se que um supercondutor não centrossimétrico bidimensional, sob certas circunstâncias, como veremos, é um candidato para experimentos físicos de fases topológicas, que suporta a existência de estados de borda e modos de energia zero em núcleos de vórtices [116].

Neste trabalho consideramos um modelo, recentemente proposto na referência [116], que inclui um acoplamento spin-órbita do tipo Rashba, que leva à adição de emparelhamento tipo onda- s e onda- p , e também um termo de Zeeman que quebra a simetria de reversão temporal. Na presença do termo de Zeeman e do acoplamento spin-órbita o diagrama de fases mostra várias transições entre fases topológicas caracterizadas por diferentes números de Chern, conforme estudado antes nas referências [49, 116, 172]. O hamiltoniano do qual falamos, na sua forma de hamiltonianos de Bogoliubov-de Gennes descrita no capítulo 8, é dado por

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \mathbf{H}(\mathbf{k}) \mathbf{C}_{\mathbf{k}} \quad (10.1)$$

sendo

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^{\dagger}(\mathbf{k}) & -\mathbf{H}_0^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (10.2)$$

$\mathbf{C}_{\mathbf{k}} = (c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{\mathbf{k}\downarrow}, c_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger})^T$ e \mathbf{k} é o vetor de onda no plano xy (a constante de rede é considerada unitária). O estado normal do Hamiltoniano é dado por

$$\mathbf{H}_0(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})\sigma_0 - M_z\sigma_z + \mathbf{H}_R(\mathbf{k}) \quad (10.3)$$

sendo $\epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \varepsilon_F$ a parte cinética e t a amplitude de tunelamento, ε_F representa a energia de Fermi, M_z é o termo de Zeeman (em unidades de energia) e finalmente

$$\mathbf{H}_R(\mathbf{k}) = \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \alpha(\sin k_y\sigma_x - \sin k_x\sigma_y) \quad (10.4)$$

é o termo de Rashba com $\mathbf{s} = \mathbf{s}(\mathbf{k}) = \alpha(\sin k_y, -\sin k_x, 0)$. As matrizes de Pauli $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ agem sobre o spin, e σ_0 representa a matriz identidade. Sendo assim, a matriz $\mathbf{H}_0(\mathbf{k})$ fica escrita na forma

$$\mathbf{H}_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) - M_z & \alpha(\sin k_y + i \sin k_x) \\ \alpha(\sin k_y - i \sin k_x) & \epsilon(\mathbf{k}) + M_z \end{pmatrix}. \quad (10.5)$$

Como podemos perceber pela expressão definida para $\epsilon(\mathbf{k})$, consideramos uma estrutura quadrada para o termo de tunelamento, apesar de considerarmos um SC NCS. Pode-se pensar que estamos descrevendo um SC bidimensional normal, porém, em contato com um material de estrutura não centrossimétrica. Essa aproximação é suficiente para induzir o acoplamento SO no SC que, por sua vez, permite emparelhamentos tripletos dos pares de Cooper como veremos a seguir.

A matriz de emparelhamento $\Delta(\mathbf{k})$, que contribui para a supercondutividade desse hamiltoniano, le-se:

$$\Delta(\mathbf{k}) = i(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \Delta_s \sigma_0) \sigma_y \quad (10.6)$$

onde $\mathbf{d} = \mathbf{d}(\mathbf{k})$ é responsável pelo emparelhamento tripleto do par de Cooper e Δ_s pelo emparelhamento singlete. Concentramos-nos no limite de um forte acoplamento spin-órbita, no qual espera-se que o vetor de emparelhamento $\mathbf{d} = (\Delta_t/\alpha)\mathbf{s}$ esteja alinhado com o acoplamento spin-órbita [167], especificando o emparelhamento supercondutor de onda- p (outros casos foram considerados em [49, 123]). A contribuição do emparelhamento singlete também é permitida. Sendo assim, a matriz de emparelhamento assume a forma

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} -d_x + id_y & d_z + \Delta_s \\ d_z - \Delta_s & d_x + id_y \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Delta_t(-\sin k_y - i \sin k_x) & \Delta_s \\ -\Delta_s & \Delta_t(\sin k_y - i \sin k_x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (10.7)$$

Embora o termo de Rashba possa ser desligado em cada fase sem afetar a topologia, sua presença, junto com o termo de Zeeman, leva a um efeito anômalo de Hall e uma condutividade de Hall finita que pode ser usada para obter informações acerca das fases topológicas [49].

As autofunções e os autovalores de energia podem ser obtidos resolvendo as equações de Bogoliubov-de Gennes:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_0(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{k}) & -\mathbf{H}_0^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = E_{\mathbf{k},n} \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix}, \quad (10.8)$$

sendo o spinor de quatro componentes escrito na seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{k}, \uparrow) \\ u_n(\mathbf{k}, \downarrow) \\ v_n(-\mathbf{k}, \uparrow) \\ v_n(-\mathbf{k}, \downarrow) \end{pmatrix}. \quad (10.9)$$

A matriz hamiltoniano $\mathbf{H}(\mathbf{k})$, conforme definida nas equações (10.3), (10.4) e (10.6), é escrita como

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} \mathbf{H}_0(\mathbf{k}) & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^\dagger(\mathbf{k}) & -\mathbf{H}_0^T(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k})\sigma_0 - M_z\sigma_z + \mathbf{s}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} & i(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \Delta_s\sigma_0)\sigma_y \\ i^*\sigma_y^\dagger(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}^\dagger + \Delta_s\sigma_0^\dagger) & -\epsilon(-\mathbf{k})\sigma_0^T + M_z\sigma_z^T - \mathbf{s}(-\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}^T \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \epsilon(\mathbf{k})\sigma_0 - M_z\sigma_z + \mathbf{s}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} & i(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \Delta_s\sigma_0)\sigma_y \\ -i\sigma_y(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \Delta_s\sigma_0) & -\epsilon(\mathbf{k})\sigma_0 + M_z\sigma_z + \mathbf{s}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}^T \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10.10)$$

Sendo assim, podemos diagonalizar essa matriz e obter os seus autovalores para cada momento \mathbf{k} , ou seja, o espectro das bandas de energia. Fazendo isso obtemos as seguintes soluções:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{Z_1 \pm 2\sqrt{Z_2}}, \quad (10.11)$$

sendo

$$Z_1 = \epsilon^2 + \Delta_s^2 + \mathbf{s} \cdot \mathbf{s} + \mathbf{d} \cdot \mathbf{d} + M_z^2 \quad (10.12)$$

e

$$Z_2 = (\epsilon^2 + \Delta_s^2) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{s} + \mathbf{d} \cdot \mathbf{d} + M_z^2) - (\epsilon\mathbf{d} - \Delta_s\mathbf{s})^2 + |(\mathbf{d} \times \mathbf{s})_z|^2. \quad (10.13)$$

Topologia em um SC não-convencional – Uma vez que a transição topológica deve ocorrer quando o *gap* fecha, procurar pontos sem *gap* pode indicar uma transição de fase topológica. Analisando a equação (10.11), vemos que o *gap* de energia fecha-se quando $Z_1 = 2\sqrt{Z_2}$, ou seja,

$$\epsilon \mathbf{d} = \Delta_s \mathbf{s} \quad \text{e} \quad \epsilon^2 + \Delta_s^2 = \mathbf{s} \cdot \mathbf{s} + \mathbf{d} \cdot \mathbf{d} + M_z^2, \quad (10.14)$$

ou então, alternativamente, se

$$\mathbf{s} = \mathbf{d} = (0, 0) \quad \text{e} \quad \epsilon^2 + \Delta_s^2 = M_z^2, \quad (10.15)$$

uma vez que o hamiltoniano proposto resulta em $(\mathbf{d} \times \mathbf{s})_z = 0$.

Sem campo magnético ($M_z = 0$) – quando não temos campo magnético aplicado apenas as equações (10.14) resultam em soluções não triviais. Podemos rescrever essas equações em termos de Δ_t e α (amplitudes dos vetores \mathbf{d} e \mathbf{s} , respectivamente) então ficamos com

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \Delta_s \frac{\alpha}{\Delta_t} \quad \text{e} \quad \Delta_s^2 \left(\frac{\alpha^2}{\Delta_t^2} + 1 \right) = (\Delta_t^2 + \alpha^2) \mathcal{L}(\mathbf{k})^2, \quad (10.16)$$

ou ainda,

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\Delta_s}{\Delta_t} \alpha \quad \text{e} \quad \left(\frac{\alpha^2}{\Delta_t^2} + 1 \right) (\Delta_s^2 - \Delta_t^2 \mathcal{L}(\mathbf{k})^2) = 0, \quad (10.17)$$

ou, finalmente,

$$\frac{\epsilon(\mathbf{k})}{\alpha} = |\mathcal{L}(\mathbf{k})| = \frac{\Delta_s}{\Delta_t}, \quad (10.18)$$

sendo $\mathcal{L}(\mathbf{k}) = (\sin k_y, -\sin k_x)$.

Com campo magnético ($M_z \neq 0$) **e emparelhamento tripleto forte** ($\Delta_t > \Delta_s$) – quando a amplitude do emparelhamento tripleto é mais forte do que a do singleto, então apenas as equações (10.15) são possíveis soluções para o fechamento do *gap* de energia. Sendo assim, em termos de $\mathcal{L}(\mathbf{k})$ essas equações assumem a forma

$$\mathcal{L}(\mathbf{k}) = (0, 0) \quad \text{e} \quad \epsilon^2 + \Delta_s^2 = M_z^2. \quad (10.19)$$

É fácil perceber que a primeira condição é satisfeita sempre que $k_x, k_y = 0, \pi$, ou seja, sempre que $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ assume um de seus valores de reversão temporal $\mathbf{k} = (0, 0), (\pi, 0), (0, \pi), (\pi, \pi)$, ou um de seus equivalentes na primeira BZ. Para esses valores de \mathbf{k} , lembrando que $\epsilon = \epsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$, o lado direito da equação (10.19) assume uma das seguintes condições:

$$\left[(-4t - \mu)^2 + \Delta_s^2 = M_z^2\right]_{\mathbf{k}=(0,0)} \quad \text{ou} \quad \left[(4t - \mu)^2 + \Delta_s^2 = M_z^2\right]_{\mathbf{k}=(\pi,\pi)} \quad (10.20)$$

$$\text{ou} \quad [\mu^2 + \Delta_s^2 = M_z^2]_{\mathbf{k}=(\pi,0),(\pi,0)}.$$

Vamos agora comparar os termos que envolvem t e μ , considerando $t > 0$ e $\mu < 0$ para facilitar, então

$$(4t - |\mu|)_{\mathbf{k}=(0,0)} < (4t + |\mu|)_{\mathbf{k}=(\pi,\pi)} \quad \forall \quad t, \mu, \quad (10.21)$$

$$|\mu|_{\mathbf{k}=(\pi,0),(\pi,0)} < (4t + |\mu|)_{\mathbf{k}=(\pi,\pi)} \quad \forall \quad t, \mu, \quad (10.22)$$

$$|\mu|_{\mathbf{k}=(\pi,0),(\pi,0)} < (4t - |\mu|)_{\mathbf{k}=(0,0)} \quad \text{quando} \quad |\mu| < 2t \quad (10.23)$$

Começamos por analisar o caso $\Delta_s = 0$ e aumentar o M_z a partir de zero. No caso de $|\mu| < 2t$ o gap fecha-se nos pontos

$$M_z = |\mu|, \quad M_z = (4t - |\mu|) \quad \text{e} \quad M_z = (4t + |\mu|), \quad (10.24)$$

nessa mesma ordem. Por outro lado, quando $|\mu| > 2t$ o gap de energia fecha-se, sequencialmente, nos pontos

$$M_z = (4t - |\mu|), \quad M_z = |\mu| \quad \text{e} \quad M_z = (4t + |\mu|). \quad (10.25)$$

O diagrama de fases em termos do campo magnético e da amplitude de emparelhamento é mostrado na figura 17.

Uma outra maneira de caracterizar as fases topológicas é através do número de Chern, obtido como a integral sobre a zona de Brillouin da curvatura de Berry [53, 173]. Os locais dos pontos sem *gap* também podem ser detectados pela curvatura de Berry das bandas. Quando duas bandas aproximam-se aparece um pico na curvatura de Berry. Pode-se mostrar que,

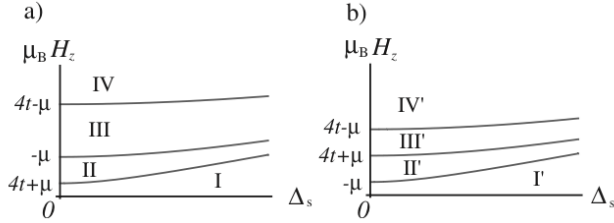


Figura 17 – Linhas de transição, nas quais ocorre um fechamento do gap de energia. As regiões IV e IV' correspondem a SC normais, topologicamente triviais. As regiões II, III e III' correspondem a SC topológicos com um estado de borda, ou seja, uma corrente de carga fluindo na superfície. No estado II' existem duas correntes de carga, de mesmo sentido, na borda do SC. Por fim, as fases I e I' apresentam ordem topológica, caracterizadas por duas correntes de carga de sentidos opostos, que resultam em um número de Chern $C = 0$.

Região	Chern (C)	$I(0)$	$I(\pi)$	Região	Chern (C)	$I(0)$	$I(\pi)$
I	0	-2	0	I'	0	-2	0
II	1	-1	0	II'	-2	-1	-1
III	-1	0	-1	III'	-1	0	-1
IV	0	0	0	IV'	0	0	0

Tabela 2 – Número de Chern (C) e número de enrolamento ($I(k_y)$) de um supercondutor bidimensional não centrossimétrico e com acoplamento spin-órbita do tipo Rashba. As diferentes regiões I, II, III, IV, I', II', III' e IV' estão definidas na figura 17.

para a banda mais baixa, existem picos estreitos nos momentos de tempo reverso (conforme definido na ref. 116) $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, $(0, \pi)$ e $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$. Somando sobre as bandas ocupadas o número de Chern foi calculado para esse sistema [49, 116]. Os resultados no espaço dos parâmetros estão mostrados na figura 18, usando os seguintes parâmetros: $t = 1$, $\alpha = 0.6$, $d = 0.6$ e $\Delta_s = 0.1$. De agora em diante todas as figuras usam o mesmo conjunto de parâmetros, a menos que seja especificado. Além disso, os cálculos do número de Chern e do número de enrolamento estão mostrados na tabela 2.

Antes de efetivamente apresentarmos os resultados, faremos alguns comentários sobre o sistema em questão. O supercondutor considerado aqui apresenta TRS somente na ausência do termo de Zeeman ($M_z = 0$) e o sistema então pertence à classe DIII. Para esta classe, o invariante topológico

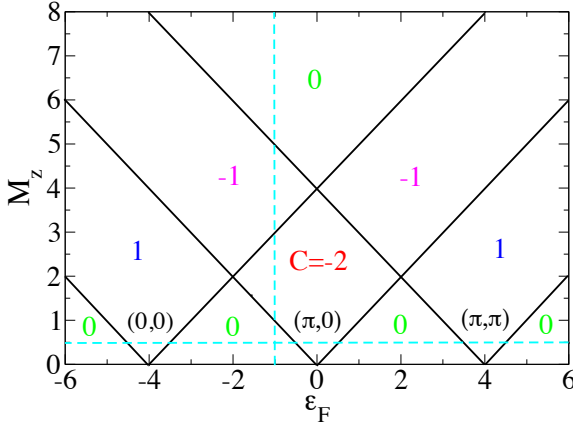


Figura 18 – Fases topológicas e o número de Chern correspondente em função do potencial químico e do campo magnético. As transições ocorrem nos momentos característicos $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ e seus correspondentes na primeira BZ.

pertence ao grupo \mathbb{Z}_2 (o operador TRS O é tal que $O^2 = -1$) [66, 68]. Na presença do termo de Zeeman, a TRS é quebrada e o sistema pertence à classe D (o operador TRS O é tal que $O^2 = 0$). O invariante topológico que caracteriza essa classe é o número de Chern C e o sistema é dito ser um supercondutor topológico do tipo \mathbb{Z} . A figura 18 mostra o diagrama de fases, rotulado pelos valores do número de Chern em cada fase, como função do potencial químico, ε_F , e do campo magnético, M_z .

Informações adicionais das fases topológicas e suas transições podem ser obtidas analisando os estados de borda. Se $M_z = 0$ e o emparelhamento é tipo onda- s , o sistema encontra-se em uma fase topologicamente trivial, ou seja, existe somente um *gap* de energia no interior do material sem que haja estados de borda. No caso de haver somente onda- p , ou se houver uma mistura de onda- s e onda- p , desde que a amplitude do emparelhamento tipo onda- p seja maior do que onda- s , então existirá dois modos de borda propagando-se em sentidos contrários e que dão contribuições opostas ao número de Chern total, $C = 0$ (fase \mathbb{Z}_2) [116].

Quando um campo magnético é ligado, a TRS é quebrada. Para peque-

nos campos, o supercondutor encontra-se numa fase trivial com número de Chern $C = 0$. Uma magnetização finita é necessária para causar uma transição de fase topológica, para uma fase com número de Chern não nulo [116]. Isto acontece para ambos os casos de emparelhamento, tipo onda- s e tipo onda- p . A seqüência de números de Chern é claramente correlacionada com o número de pares dos estados de borda, conforme é mostrado na referência 116. É importante notar que embora o sistema esteja em uma fase com $C = 0$, o número de estados de borda é 2; o mesmo que na sua fase anterior \mathbb{Z}_2 com $M_z = 0$ [116]. A presença dos modos de borda induzidos pela topologia no interior do material pode ser mostrada usando uma redução dimensional e então calculando o número de enrolamento [70]. O cálculo do número de enrolamento mostra o número de estados de borda sem *gap* mesmo quando o número de Chern é nulo [116].

A seguir apresentaremos os resultados que obtivemos ao estudar um SC NCS usando técnicas da informação quântica. Apresentaremos primeiro os resultados já publicados em OLIVEIRA, T. P.; SACRAMENTO, P. D. [Entanglement modes and topological phase transitions in superconductors. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 89, p. 094512, Mar 2014. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.094512>>](#). Em seguida, mostraremos os resultados de um artigo aceito para publicação em *Journal of Physics: Condensed Matter* no dia 20 de agosto de 2014, mas que pode ser encontrado nos arquivos online da livraria da Universidade de Cornell por OLIVEIRA, T. P.; RIBEIRO, P.; SACRAMENTO, P. D. [Entanglement entropy and entanglement spectrum of triplet topological superconductors. ArXiv e-prints, dez. 2013.](#)

10.1 Resultados publicados: Modos de emaranhamento em um sistema infinito

10.1.1 Entropia de von Neumann

Uma vez que o Hamiltoniano definido na equação (10.1) é separável no espaço dos momentos, o operador matriz densidade para um momento k

pode ser definido como

$$\hat{\rho}_k = \frac{e^{-\beta\hat{H}_k}}{Z_k}, \quad (10.26)$$

com $\hat{H} = (1/2) \sum_k \hat{H}_k$. Na base diagonal a matriz densidade é escrita como

$$\rho_k = \langle n | \hat{\rho}_k | n \rangle = \frac{e^{-\beta \langle n | \hat{H}_k | n \rangle}}{Z_k}. \quad (10.27)$$

É conveniente introduzir uma representação de base para a matriz densidade em termos dos números de ocupação para um dado momento (e seu simétrico) e as duas projeções de spin. Os autovalores da matriz densidade são obtidos se diagonalizarmos o Hamiltoniano na mesma base. Sendo assim, consideramos a seguinte representação

$$\tilde{H}_k = \langle n_{k\uparrow} n_{-k\uparrow} n_{k\downarrow} n_{-k\downarrow} | \hat{H}_k | n_{k\uparrow} n_{-k\uparrow} n_{k\downarrow} n_{-k\downarrow} \rangle. \quad (10.28)$$

A diagonalização da matriz Hamiltoniano nessa base estendida é escrita como

$$\tilde{H}_k \mathbf{Q}_{k,n} = \lambda_{k,n} \mathbf{Q}_{k,n}; \quad n = 1, \dots, 16 \quad (10.29)$$

note que n aqui é apenas um índice e não deve ser confundido com o número de ocupação da equação (10.28). Na mesma base, a matriz densidade pode ser escrita como

$$\rho_k = \frac{e^{-\beta\tilde{H}_k}}{Z_k}. \quad (10.30)$$

Portanto, os autovalores da matriz densidade podem ser escritos como

$$\rho_k \mathbf{Q}_{k,n} = \Lambda_{k,n} \mathbf{Q}_{k,n}, \quad \text{onde} \quad \Lambda_{k,n} = \frac{e^{-\beta\lambda_{k,n}}}{\sum_{n'} e^{-\beta\lambda_{k,n'}}}. \quad (10.31)$$

Por sua vez, a entropia para cada momento k pode ser obtida através da equação

$$S_k = - \sum_{n=1}^{16} \Lambda_{k,n} \ln(\Lambda_{k,n}), \quad (10.32)$$

sendo que a entropia total é obtida somando-se sobre a zona de Brillouin

$$S = \sum_k S_k. \quad (10.33)$$

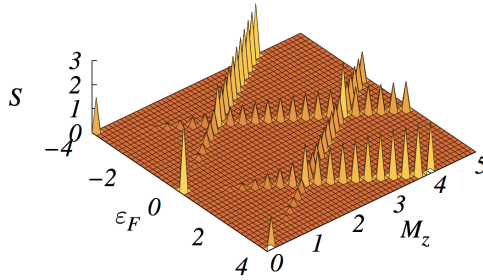


Figura 19 – Entropia total em função do potencial químico e da magnetização, para os parâmetros típicos $t = 1$, $\alpha = 0.6$, $d = 0.6$, $\Delta_s = 0.1$ e temperatura $T = 10^{-3}$.

Os resultados para a entropia em função do potencial químico e magnetização (termo de Zeeman) são mostrados na Fig. 19, para um parâmetro de temperatura $T = 10^{-3}$, onde $\beta = 1/T$ ($k_B = 1$). Em temperaturas bastante baixas, a entropia é do tipo $S = \ln \Omega$, onde Ω é a degenerescência do estado de mais baixa energia. Em geral, o estado de menor energia é não-degenerado e a entropia anula-se. Nos pontos de transição, o sistema perde o gap de energia e, em alguns pontos no espaço dos momentos, o estado de menor energia torna-se degenerado, que resulta em uma entropia finita. Integrando-se sobre os momentos, somamos sobre os vários pontos sem gap. Como pode ser visto comparando-se a Fig. 18 e a Fig. 19, a entropia identifica bastante bem as transições de fase topológicas. Exceto nas transições, a entropia é inexpressiva e não distingue entre as várias fases topológicas.

Uma melhor compreensão é obtida se analisarmos a entropia S_k em função do momento, com o intuito de entender a origem dos picos na Fig. 19. Em $M_z = 0.1$, há três picos na Fig. 19 em potenciais químicos $\varepsilon_F = -4, 0, 4$. Esses são pontos especiais, degenerados na temperatura de zero absoluto, com valores $\ln(4)$, $2 \ln(4)$ e $\ln(4)$, respectivamente. O fato que esses pontos ocorrem em $M_z = 0.1$ tem a ver com a escolha de $\Delta_s = 0.1$ (para $\Delta_s = 0$, esses picos ocorrem em $M_z = 0$). Esses picos são devido a singularidades nos momentos $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$, respectivamente, e seus pontos de equivalência na zona de Brillouin. Ainda em temperaturas bastante baixas, os picos ficam bem agudos. Portanto, uma pequena temperatura finita

é utilizada para melhor visualização.

Para além do cálculo da entropia, o espectro da energia com pontos de degenerescência (sem gap) também são vistos nas bandas do Hamiltoniano \tilde{H}_k . Esses são demonstrados na Fig. 20, onde consideramos os mesmos pontos especiais no diagrama de fase, $M_z = 0.1$. Sua relevância também estende-se além daqueles valores de potencial químico particulares. Como demonstrado na Fig. 21, os momentos responsáveis pelas várias linhas de transição são do mesmo conjunto. As linhas que emergem do $\varepsilon_F = -4$ estão associadas com $\mathbf{k} = (0, 0)$, as linhas que emergem de $\varepsilon_F = 0$ estão associadas com $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ e aqueles de $\varepsilon_F = 4$ com $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$.

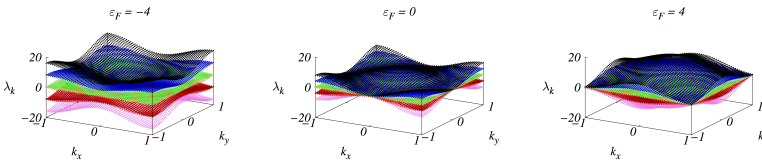


Figura 20 – Bandas de \tilde{H}_k para $M_z = 0.1$ e $\varepsilon_F = -4, 0, 4$, respectivamente.

10.1.2 Espectro do emaranhamento e autovetores

O espectro de emaranhamento de um sistema bipartido com uma partição do espaço real, fornece informações interessantes sobre os estados ao longo da interface entre os dois subsistemas, como discutido na introdução. A partição no espaço dos momentos, originada na diagonalização parcial do Hamiltoniano no espaço de Fourier, fornece informações sobre o espectro em cada momento separadamente. Embora essa participação seja trivial, uma análise detalhada revela informações interessantes sobre o emaranhamento do sistema, através do espectro do emaranhamento e dos autovetores da matriz densidade reduzida. O espectro do emaranhamento pode ser visto na Fig. 20, já que é simplesmente o espectro da matriz hamiltoniano \tilde{H}_k , sendo ambas diagonais nos mesmos estados de base. Em baixas temperaturas, isso se traduz no espectro da matriz densidade no espaço dos k , onde a banda de menor energia tem um autovalor próximo a unidade e todos os outros próximos a zero (exceto em pontos degenerados).

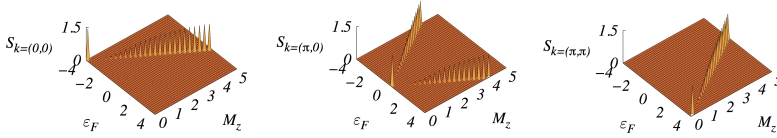


Figura 21 – Entropia em função do potencial químico e magnetização para $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$, respectivamente.

Os autovetores fornecem informações adicionais sobre as fases do sistema e em particular fornece informações sobre as transições. Em geral, cada autovetor é escrito como uma combinação linear dos 16 estados de base, $|n_{k_\uparrow} n_{-k_\uparrow} n_{k_\downarrow} n_{-k_\downarrow}\rangle$. Verifica-se que na maioria dos casos apenas uns poucos são diferentes de zero, para cada autovetor. A sua interpretação física é em vários casos clara, permitindo entender o conteúdo físico dos autoestados dominantes, que mudam quando a transição ocorre.

Os estados dominantes são: i) os estados $|1100\rangle$ e $|0011\rangle$ correspondendo ao emparelhamento de spin triplete, ii) o estado $|0000\rangle$ correspondendo a um estado vazio no espaço dos momentos e spin, iii) o estado $|1111\rangle$ correspondendo ao estado de base totalmente ocupado com 4 elétrons, iv) os estados $|1001\rangle, |0110\rangle$ correspondendo ao emparelhamento de spin singlete. Outros estados também estão presentes, mas seus coeficientes são tipicamente bem pequenos.

Nas Figs. 22, 23 e 24 mostramos os resultados para o valor absoluto dos coeficientes das contribuições mais importantes ao autovetor, correspondendo ao maior autovalor da matriz densidade k (correspondente a banda de menor energia da matriz hamiltoniano). Na Fig. 22, a magnetização é fixa, o potencial químico está mudando e cada painel corresponde aos três valores de momento singulares. O conjunto de valores do potencial químico são aqueles que correspondem à linha horizontal tracejada na Fig. 18. Já na Fig. 23, o potencial químico é fixo em $\epsilon_F = -1$ e a magnetização é variada ao longo da linha vertical tracejada na Fig. 18. Por fim, na Fig. 24, consideramos situações similares, mas para valores de momento arbitrários, diferentes de qualquer um dos momentos singulares.

Ao longo da linha horizontal tracejada, o número de Chern muda de

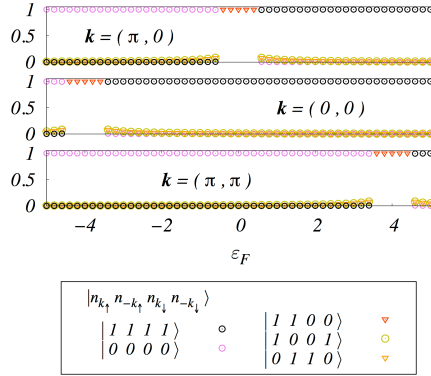


Figura 22 – Componentes dos autovetores para o maior autovalor da matriz densidade reduzida ρ_k para $M_z = 0.5$ em função do potencial químico ε_F para diferentes valores de momento $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$. Os componentes que não estão demonstrados são aproximadamente zero.

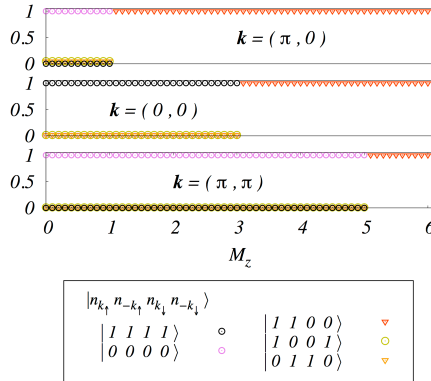


Figura 23 – Os componentes do autovetor para o maior autovalor da matriz densidade reduzida ρ_k , para $\varepsilon_F = -1$ em função da magnetização e para diferentes valores de momento $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$. Os componentes que não estão demonstrados são aproximadamente zero.

$C = 0 \rightarrow C = 1 \rightarrow C = 0 \rightarrow C = -2 \rightarrow C = 0 \rightarrow C = 1 \rightarrow C = 0$. Entretanto, a simetria na sequência de números de Chern, em torno da metade ($\varepsilon_F = 0$), não é diretamente manifestada, nem nos resultados para os coeficientes, nem nos momentos onde as transições são detectadas. Mas a simetria reaparece se agrupamos os coeficientes por estados de empare-

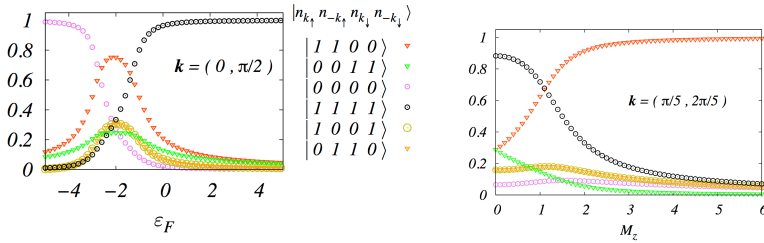


Figura 24 – Componentes do autovetor do maior autovalor da matriz densidade reduzida ρ_k , para valores de momento arbitrários, para $M_z = 0.5$ em função do potencial químico (painel esquerdo) e para $\varepsilon_F = -1$ em função da magnetização (painel direito). Os componentes que não estão demonstrados são aproximadamente zero.

lhamentos de spin similares, como mostrado no apêndice D. As transições cruzadas pela linha tracejada são detectadas considerando $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$, $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$, respectivamente. Isso é entendido dos resultados da Fig. 21.

A contribuição mais importante na análise dos coeficientes é que eles revelam a natureza dos estados em cada fase. Uma análise especial individual \mathbf{k} mostra que, para valores de potencial químico pequeno, o estado vazio $|0000\rangle$ tem o maior coeficiente. À medida que a transição ocorre, o estado base de spin tripleto $|1100\rangle$ torna-se dominante até que a próxima transição ocorra, quando o estado totalmente ocupado $|1111\rangle$ torna-se o dominante. Essa sequência ocorre em diferentes potenciais químicos: aqueles correspondentes a linha de transição específica para que, em dado valor de momento, a banda de menor energia torna-se gapless. Próxima a várias transições, os estados de spin singleto $|1001\rangle$ e $|0110\rangle$ também contribuem.

Resultados similares são obtidos cruzando as transições pela linha vertical tracejada, mostrada na Fig. 23, onde a sequência de transições é agora observada em função da magnetização variável, com o potencial químico fixo. Entretanto, é demonstrado que, após uma dada transição, o estado de spin tripleto torna-se o dominante e prevalece até valores maiores de magnetização. Também, para baixo M_z e antes da transição, dependendo do momento considerado, o estado dominante ou é o estado vazio ou o es-

tado totalmente ocupado. Parece que, contra-intuitivamente, para potencial químico $\varepsilon_F = -1$, o estado dominante é o estado totalmente ocupado para momentos próximos da origem da zona de Brillouin, enquanto o estado vazio é a contribuição dominante próxima as bordas da zona de Brillouin.

A nitidez da contribuição dos vários coeficientes é perdida, como mostra a Fig. 24, se os momentos não são os pontos singulares. Neste caso, nenhuma transição é observada, mas seus efeitos ainda são vistos em larga escala.

Como as Figs. 22, 23 indicam, as fases topológicas com número de Chern finito, são associados com um maior coeficiente da contribuição tripleto. Na Fig. 25 mostramos a dependência do momento do valor absoluto do coeficiente do emparelhamento tripleto para $M_z = 0$ (coluna esquerda) e $M_z = 1$ (coluna direita). Note que, para $M_z = 0$, o sistema está na fase \mathbb{Z}_2 , na região onde $|\varepsilon_F| < 4$. Para magnetização finita, o sistema está em uma fase \mathbb{Z} com um número de Chern finito ou nulo. Para ambos os valores de magnetização, há uma correlação clara entre o valor absoluto do coeficiente tripleto e o local da superfície de Fermi que expande à medida que o potencial químico é aumentado. Em potencial químico pequeno, a superfície de Fermi é centralizada em torno de momento zero. Aumentando o potencial químico, a superfície de Fermi irá se aproximar do ponto $\mathbf{k} = (\pi, 0)$. Quando o potencial químico aumenta mais ainda, a superfície de Fermi irá aumentar próximo ao ponto $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$. A amplitude do coeficiente é maior no caso de $M_z = 1$. Para $M_z = 0$, as duas orientações de spin do estado tripleto são degeneradas e pode-se ver que a amplitude é aproximadamente constante ao longo da superfície de Fermi. Quando a magnetização é finita, há uma maior amplitude na vizinhança dos pontos singulares anteriormente encontrados para a entropia do emaranhamento e fidelidade. Nesse caso, próximo a esses pontos, e dependendo do potencial químico, o coeficiente é próximo da saturação, que implica que o estado tripleto é dominante sobre todos os estados base.

No Apêndice D, resultados detalhados para a estrutura de autovetor são apresentados. Os resultados mostram que as fases topológicas podem ser identificadas pela saturação da contribuição de spin tripleto. Os estados vazio e duplamente ocupados usualmente dominam na zona de Brillouin, exceto próximo da superfície de Fermi, onde a principal contribuição vem

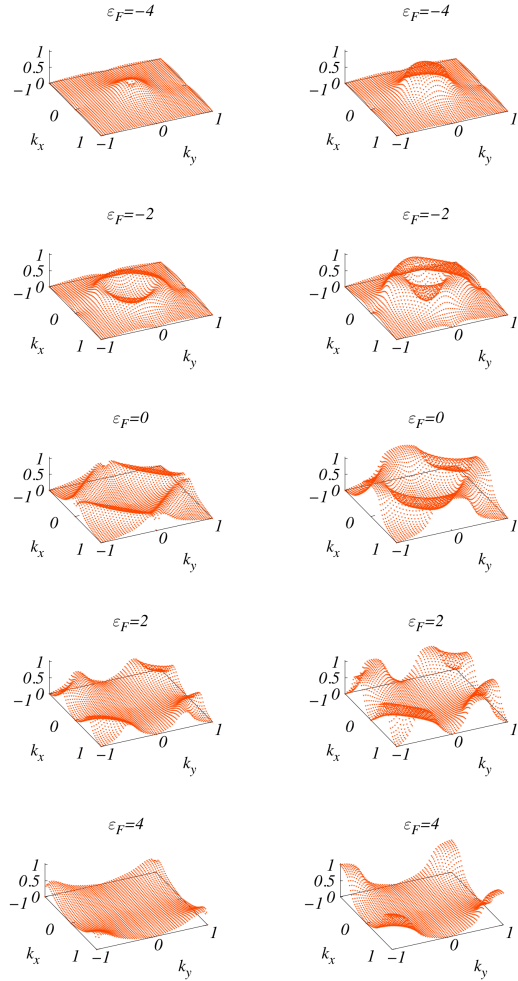


Figura 25 – Valor absoluto do coeficiente do estado de spin tripleto em função do momento. Na coluna esquerda, $M_z = 0$, e na coluna à direita $M_z = 1$. As linhas são para $\varepsilon_F = -4, -2, 0, 2, 4$, respectivamente, de cima para baixo.

dos estados de emparelhamento singlete e tripleto.

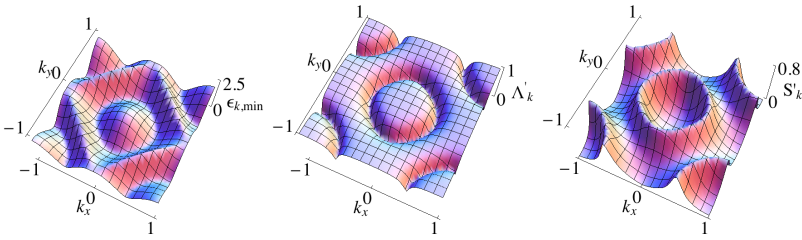


Figura 26 – a) Banda de menor energia, b) maior autovalor da matriz densidade reduzida e c) entropia em função do momento para $M_z = 2$, $\varepsilon_F = 0$ ($C = -2$).

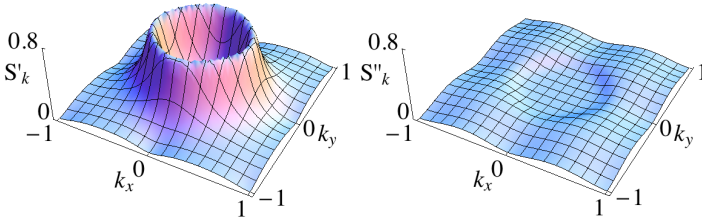


Figura 27 – Entropia em função do momento para $M_z = 4$ e $\varepsilon_F = 2$ para as matrizes densidade reduzida ρ' e ρ'' , respectivamente.

10.1.3 Matriz densidade reduzida no espaço dos momentos

Já que o Hamiltoniano é aditivo no espaço dos momentos, a matriz densidade fica expressa conforme a eq. (10.30). Ela foi diagonalizada usando a base do número de ocupação mostrado na equação (10.28). Isso gera a uma matriz 16×16 tanto para o Hamiltoniano quanto para a matriz densidade (essa matriz densidade pode ser entendida como uma matriz densidade reduzida ao integrar-se sobre todos os outros momentos). Embora o sistema de muitas partículas seja altamente emaranhado em termos de funções de onda (determinante de Slater), à temperatura zero esse emaranhamento é escondido pela representação de número de ocupação.

Os estados de base geram uma matriz densidade tal que

$$\rho = \rho(n_{k,\uparrow}, n_{-k,\uparrow}, n_{k,\downarrow}, n_{-k,\downarrow}; n'_{k,\uparrow}, n'_{-k,\uparrow}, n'_{k,\downarrow}, n'_{-k,\downarrow}), \quad (10.34)$$

onde cada operador número assume os valores 0, 1. A diagonalização do

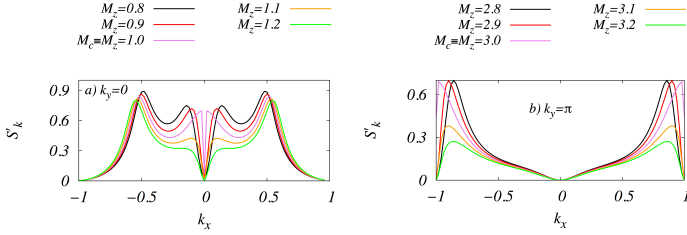


Figura 28 – Entropia em função de k_x para a) $\varepsilon_F = -3$ e $k_y = 0$ e b) para $\varepsilon_F = 1$ e $k_y = \pi$ para valores de M_z em torno das transições topológicas.

Hamiltoniano foi obtida através de uma transformação unitária na forma

$$\tilde{H}_d = \mathbf{Q}\tilde{H}\mathbf{Q}^{-1}. \quad (10.35)$$

Essa transformação também diagonaliza a matriz densidade, que nos permite calcular a forma diagonal dela, ρ_d , através da Eq. (10.31). Portanto, tendo diagonalizado o Hamiltoniano, podemos obter a matriz densidade

$$\rho = \mathbf{Q}^{-1}\rho_d\mathbf{Q}. \quad (10.36)$$

Podemos agora construir uma matriz densidade a partir do espaço k com dimensão 4×4 em um espaço reduzido calculando um traço nos graus de liberdade. Se definirmos como parte A o momento k (com spin up e down) e uma parte B com momento $-k$ (com spin up e down), a matriz densidade reduzida é obtida fazendo um traço nos graus de liberdade, por exemplo, da parte B, e ficamos com uma matriz densidade da parte A. Essa escolha dá o emaranhamento entre A e B que é o emaranhamento entre elétrons com momento k e momento $-k$, característico da supercondutividade, incluindo os emparelhamentos singlete e tripleto.

Chamamos de ρ' a matriz densidade reduzida de dimensão 4×4 . Essa, pode ser obtida elemento-a-elemento por

$$\begin{aligned} \rho'(n_{k,\uparrow}, n_{k,\downarrow}; n'_{k,\uparrow}, n'_{k,\downarrow}) &= \sum_{n_{-k,\uparrow}, n_{-k,\downarrow}} \\ &\rho(n_{k,\uparrow}, n_{-k,\uparrow}, n_{k,\downarrow}, n_{-k,\downarrow}; n'_{k,\uparrow}, n_{-k,\uparrow}, n'_{k,\downarrow}, n_{-k,\downarrow}). \end{aligned} \quad (10.37)$$

Essa matriz densidade dá informação sobre o emaranhamento entre elétrons de momentos opostos. Alternativamente, também podemos definir

$$\begin{aligned} \rho''(n_{k,\uparrow}, n_{-k,\uparrow}; n'_{k,\uparrow}, n'_{-k,\uparrow}) &= \sum_{n_{k,\downarrow}, n_{-k,\downarrow}} \\ &\rho(n_{k,\uparrow}, n_{-k,\uparrow}, n_{k,\downarrow}, n_{-k,\downarrow}; n'_{k,\uparrow}, n'_{-k,\uparrow}, n_{k,\downarrow}, n_{-k,\downarrow}) \end{aligned} \quad (10.38)$$

e agora essa matriz densidade dá informação sobre o emaranhamento entre elétrons de spins opostos.

A diagonalização dessas matrizes densidade reduzida gera 4 autovalores. Tipicamente, os dois menores autovalores geram valores bem pequenos e, já que eles são normalizados a um, o segundo maior autovalor é basicamente a diferença a um do maior autovalor. Como mostrado anteriormente [149], o maior autovalor assume valores próximos a unidade na maioria da zona de Brillouin, exceto próximo à superfície de Fermi, onde ele aumenta em valor. Isso é demonstrado na Fig. 26: no primeiro painel, mostramos a menor banda de energia positiva obtida da solução do Hamiltoniano, eq. (10.11) e no segundo painel mostramos o maior autovalor da matriz densidade reduzida ρ' . Informação adicional pode ser obtida calculando a entropia dessa matriz densidade reduzida do subespaço k , definida como

$$S'_k = - \sum_{n=1}^4 \Lambda'_{k,n} \ln(\Lambda'_{k,n}). \quad (10.39)$$

Os resultados para a entropia são encontrados no terceiro painel da Fig. 26 para o mesmo conjunto de parâmetros, $M_z = 2$ e $\varepsilon_F = 0$. A diminuição do maior autovalor é acompanhado pelo aumento da entropia, que portanto localiza a região da transição no espaço dos momentos entre os estados ocupados e os estados desocupados, definindo a superfície de Fermi.

Na Fig. 27 comparamos a entropia entre as matrizes densidade reduzida ρ' and ρ'' em outro ponto no diagrama de fases, $M_z = 4$ e $\varepsilon_F = 2$ ($C = -1$). A entropia é claramente maior no caso do emaranhamento entre momentos opostos, como esperado para um supercondutor.

É, entretanto, mais interessante estudar a entropia associada com a matriz densidade reduzida ρ' à medida que se aproxima uma transição topoló-

gica. Na Fig. 28 consideramos a dependência da entropia com o momento, para diferentes valores do potencial químico, $\varepsilon_F = -3$ e $\varepsilon_F = 1$, para diferentes valores da magnetização, M_z , à medida que se cruza as linhas de transição entre uma fase $C = 0$ e uma fase $C = 1$; e entre uma fase $C = -2$ e $C = -1$. Como em outras assinaturas, os valores dos momentos reversíveis no tempo desempenham um papel especial associado com as linhas de transição. No painel esquerdo da Fig. 28 há uma mudança de comportamento ao redor do momento $(0, 0)$ e no painel direito ao redor do momento (π, π) . A partir da análise dos dados, podemos dizer que na fase $C = 0$ a entropia tem um valor pequeno e fixo, porém finito, em momento zero. Quando se cruza a transição para a fase $C = 1$, a entropia anula-se neste momento. Também, quando se aproxima a linha de transição, a inclinação da entropia aumenta ao redor do momento zero. Depois da transição, a inclinação diminui consideravelmente e a entropia é menor que na fase com número de Chern zero. O painel inferior mostra um comportamento semelhante, mas ao redor do momento (π, π) , onde a inclinação torna-se bem grande na transição e então aumenta. Antes da transição, quando a magnetização está aumentando, a entropia também é finita (mas bem pequena) e depois da transição ela anula-se. Finalmente, a magnitude da entropia é menor depois da transição, já que o campo magnético é maior.

No Apêndice B apresentamos resultados para o autovetor do maior autovalor da matriz densidade reduzida do subespaço k .

10.1.4 Fidelidade e espectro da fidelidade

A fidelidade quântica entre dois estados puros (para dois conjuntos de parâmetros) é o valor absoluto da sobreposição entre os estados fundamentais para os dois conjuntos de parâmetros. Em geral, a fidelidade quântica [175], F , entre dois estados caracterizados por duas matrizes densidade, ρ_1 e ρ_2 , pode ser definida como o traço do operador fidelidade, \mathcal{F} , com $F(\rho_1, \rho_2) = \text{Tr} \mathcal{F} = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_1} \rho_2 \sqrt{\rho_1}}$.

O operador fidelidade \mathcal{F} pode ser estudado usando diferentes estados de base, associados com diferentes representações, tais como a posição, momento, energia ou carga e spin. Rescrevendo o operador fidelidade nessas

diferentes representações, nos permite olhar mais diretamente em modos relevantes específicos que participam mais ativamente no fenômeno crítico, acompanhando a transição de fase. Desta forma, podemos obter uma caracterização mais completa e física da transição de fase e seus mecanismos físicos básicos. Enquanto o espectro do emaranhamento tem alguma relação ao espectro de energia dos estados de borda ou mesmo dos estados no interior do material, o espectro da fidelidade contém informação sobre quais autovalores têm maior contribuição à distinção entre os estados quânticos [149].

Considerando duas matrizes densidade, que resultam da partição do espaço dos momentos, para dois pontos no espaço dos parâmetros, podemos escrever que

$$\rho_{1k} \mathbf{Q}_{1k} = \mathbf{Q}_{1k} \mathbf{\Lambda}_{1k} \quad \text{e} \quad \rho_{2k} \mathbf{Q}_{2k} = \mathbf{Q}_{2k} \mathbf{\Lambda}_{2k}. \quad (10.40)$$

Como mencionado acima, a fidelidade entre dois estados, caracterizada por duas matrizes densidade ρ_{1k} e ρ_{2k} para cada momento k , pode então ser definida como o traço do operador fidelidade, \mathcal{F}_k ,

$$F_k(\rho_{1k}, \rho_{2k}) = \text{Tr} \mathcal{F}_k = \text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_{1k}} \rho_{2k} \sqrt{\rho_{1k}}}. \quad (10.41)$$

A raiz quadrada da matriz densidade pode ser escrita como

$$\sqrt{\rho_{1k}} = \mathbf{Q}_{1k} \sqrt{\mathbf{\Lambda}_{1k}} \mathbf{Q}_{1k}^{-1}, \quad (10.42)$$

então

$$\mathcal{F}_k^2 = \sqrt{\rho_{1k}} \rho_{2k} \sqrt{\rho_{2k}}. \quad (10.43)$$

Diagonalizando temos

$$\mathcal{F}_k = \mathbf{U}_k \mathbf{f}_k \mathbf{U}_k^{-1}, \quad (10.44)$$

ou então

$$\mathcal{F}_{k,n} = \mathbf{U}_{k,n} \mathbf{f}_{k,n} \mathbf{U}_{k,n}^{-1}; \quad n = 1, \dots, 16 \quad (10.45)$$

Portanto a fidelidade k é obtida da seguinte forma

$$F_k = \text{Tr}(\mathcal{F}_k) = \sum_n f_{k,n}. \quad (10.46)$$

E a fidelidade total é finalmente calculada como

$$F = \prod_k F_k. \quad (10.47)$$

Começamos nossa análise da fidelidade considerando que as duas matrizes densidade, ρ_{1k} e ρ_{2k} , são para dois pontos próximos no espaço dos parâmetros. Como a fidelidade mede a distinguibilidade entre estados diferentes, quando se aproxima de uma transição, uma das matrizes densidade é calculada em um lado da transição e a outra é calculada no ponto de transição, ou na outra fase (dependendo do passo no espaço dos parâmetros), então a fidelidade mostra um mínimo.

Na Fig. 29 apresentamos os resultados para a fidelidade total em função do potencial químico e da magnetização. Longe dos pontos de transição, a fidelidade é aproximadamente um, à medida que os dois estados descritos pelas duas matrizes densidade são bastante similares. O mínimo na fidelidade acompanha fielmente as transições previamente descritas (note que o eixo vertical está ao contrário). Como para a entropia, fixando a magnetização em $M_z = 0.1$ a fidelidade k fielmente destaca os valores dos momentos singulares.

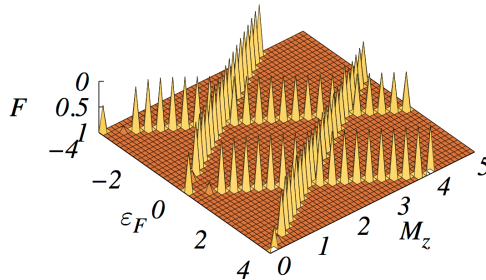


Figura 29 – Fidelidade total em função do potencial químico e da magnetização. A fidelidade foi calculada usando dois pontos no espaço dos parâmetros, M_z e $M_z + \delta M_z$, com $\delta M_z = 0.01$. Note que a escala vertical está invertida.

As transições podem também ser sinalizadas pela diminuição do maior autovalor do espectro da fidelidade k no ponto de transição. Isso é demonstrado na Fig. 30 para um exemplo em particular, $\varepsilon_F = -1$ e $M_z = 1$, para

que a linha de transição esteja associada com os pontos singulares $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, e seus pontos equivalentes na zona de Brillouin.

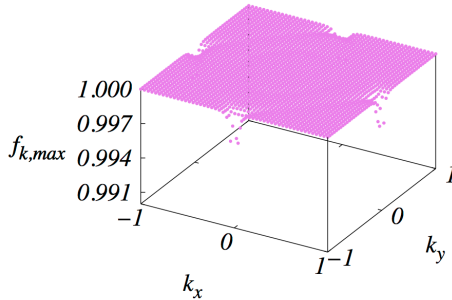


Figura 30 – Maior autovalor do espectro da fidelidade k em um ponto de transição $\varepsilon_F = -1$ e $M_z = 1$ em função do momento. A fidelidade foi calculada usando dois pontos no espaço de parâmetros, ε_F e $\varepsilon_F + \delta\varepsilon_F$, com $\delta\varepsilon_F = 0.01$. A transição ocorre para os momentos $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ e seus pontos equivalentes, como demonstrado pela diminuição da fidelidade, na vizinhança dos valores dos momentos singulares.

Uma informação complementar e interessante pode ser obtida pegando as duas matrizes densidade, na expressão da fidelidade, que correspondem a pontos no espaço dos parâmetros que estão distantes. Isso permite comparar fases diferentes, e não especificamente detectar os locais das transições de fase. Isso fornece informações interessantes sobre a natureza e os valores dos momentos responsáveis pelas transições. Além disso, ele descreve a distinção entre duas fases no espaço dos momentos.

Nas Figs. 31 e 32 apresentamos os resultados para o espectro do operador fidelidade, onde as duas matrizes densidade definem dois estados no espaço dos parâmetros e que estão inseridos dentro de diferentes fases topológicas. Na Fig. 31 consideramos uma matriz densidade em um estado especificado por um ponto em uma fase trivial com $C = 0$ (especificamente $\varepsilon_F = -1$ e $M_z = 0.5$) e a outra matriz densidade corresponde aos estados de várias magnetizações, ao longo da linha vertical tracejada da Fig. 18, para onde os números de Chern são $C = -2, C = -1, C = 0$ e a magnetização é $M_z = 2, M_z = 4, M_z = 5.5$, respectivamente. Ao nos movermos ao longo da linha no espaço dos parâmetros, cruzamos, em ordem sequencial, linhas caracterizadas pelos momentos $\mathbf{k} = (\pi, 0), \mathbf{k} = (0, 0), \mathbf{k} = (\pi, \pi)$, respec-

tivamente. A fidelidade no espaço k salienta as diferenças entre as várias fases. Seus desvios da unidade ao longo da zona de Brillouin são significativos, mesmo quando as fases tem o mesmo número de Chern, como uma consequência dos diferentes preenchimentos da banda. Pontos de transição singular transladam para zero no espectro do operador fidelidade. Como o painel esquerdo mostra, o espectro do operador fidelidade anula-se nos momentos $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ e pontos equivalentes (dois deles são independentes). O painel médio mostra em adição um zero no centro da zona de Brillouin, $\mathbf{k} = (0, 0)$. Consequentemente, o último painel mostra zeros em todos os locais de momento singular. O operador fidelidade portanto assinala o número mínimo de transições que precisam ocorrer quando se vai de uma fase trivial para outra fase trivial.

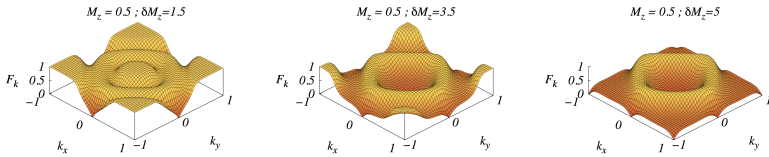


Figura 31 – Espectro do operador da fidelidade F_k para ρ_A correspondendo a $\varepsilon_F = -1$ e $M_z = 0.5$, onde o Chern $C = 0$, e ρ_B correspondendo a $\varepsilon_F = -1$ com $M_z = 2$, $C = -2$, $M_z = 4$, $C = -1$ e $M_z = 5.5$, $C = 0$, respectivamente.

Resultados semelhantes são demonstrados na Fig. 32. Neste caso, também começamos da mesma fase trivial com $C = 0$ ($\varepsilon_F = -2$ e $M_z = 0.5$) e consideramos uma sequência de matrizes densidade, associadas com estados ao longo da linha horizontal tracejada da Fig. 18. Neste caso, consideramos no painel esquerdo que a segunda matriz densidade corresponde a $M_z = 0.5$, $\varepsilon_F = 0$, $C = -2$. Uma linha associada com $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ é cruzada. No painel médio consideramos que a segunda matriz densidade está no ponto $M_z = 0.5$, $\varepsilon_F = 2$, $C = 0$. Uma segunda linha de transição no mesmo momento agora é cruzada, que implica um zero de ordem quadrática, já que o mesmo momento torna-se gapless duas vezes. Um resultado semelhante ocorre se consideramos uma matriz densidade em $M_z = 0.5$, $\varepsilon_F = 2$ e a outra na mesma magnetização com $\varepsilon_F = 6$. Neste caso, o momento $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ contribui duas vezes com um espectro gapless e a dispersão agora é qua-

drática ao redor desse momento (os vértices da zona de Brillouin), como mostrado no painel inferior dessa figura.

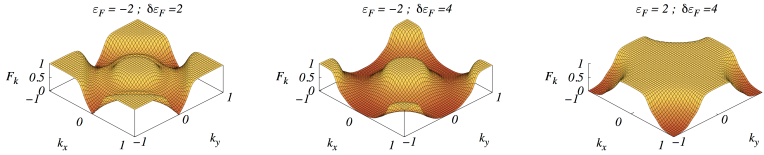


Figura 32 – Espectro do operador fidelidade F_k para ρ_A correspondendo a $\varepsilon_F = -2$ e $M_z = 0.5$ onde o Chern $C = 0$, e ρ_B correspondendo a $M_z = 0.5$ com $\varepsilon_F = 0, C = -2$, $\varepsilon_F = 2, C = 0$, respectivamente. E no painel direito ρ_A correspondendo a $\varepsilon_F = 2, M_z = 0.5$ onde o Chern $C = 0$ e ρ_B correspondendo a $M_z = 0.5, \varepsilon_F = 6, C = 0$, respectivamente.

10.2 Resultados no arXiv: Entropia do emaranhamento em um sistema finito

10.2.1 Entropia do emaranhamento, derivadas e números de Chern

A entropia do emaranhamento, $S[\rho_A]$, calculada para uma subregião quadrada $L \times L$ de tamanho $L = 6$, em função do potencial químico e do termo de Zeeman, é dada na Fig. 33 - painel esquerdo, para ilustrar o comportamento geral. As linhas de transição mostradas na Fig.18 não estão particularmente bem definidas na figura 33 (esquerda). Entretanto, tomando derivadas da entropia em relação ao potencial químico ou ao termo de Zeeman, como demonstrado na Fig.33 (painéis central e direito), revelam que, mesmo para tais subsistemas pequenos, a entropia do emaranhamento claramente sinaliza as linhas de transição. Perceba que a derivada em relação ao termo de Zeeman preserva a simetria do diagrama de fases, em função do potencial químico.

A Fig.34 mostra a convergência das derivadas rescalonadas da entropia do emaranhamento com o tamanho do sistema, juntamente com os três cortes no espaço de fases da Fig.33 (centro). Vemos que a convergência é mais rápida mesmo se considerarmos valores relativamente pequenos de L . Longe das linhas de transição de fases, onde a entropia do emaranhamento

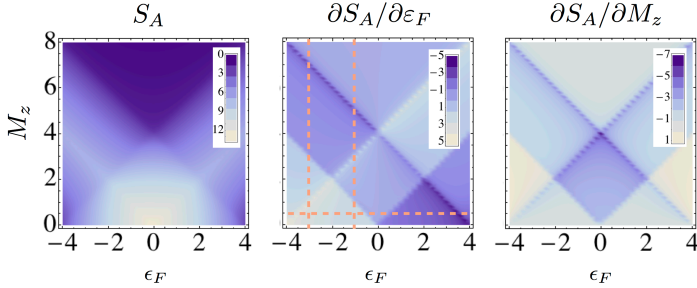


Figura 33 – Painel esquerdo: entropia de emaranhamento local de um sistema quadrático $L \times L$, com $L = 6$, como função do potencial químico e da magnetização. Painéis médio e direito: derivadas da entropia do emaranhamento em relação ao potencial químico e ao termo de Zeeman, respectivamente. As linhas laranjas correspondem a cortes específicos no diagrama de fase que serão considerados a seguir.

claramente sinaliza a transição, observamos que a derivada da entropia varia levemente com cada fase, exibindo uma estrutura do tipo platô. De fato, dentro de cada fase as derivadas atingem um conjunto de valores que são aproximadamente proporcionais ao valor do número de Chern da respectiva fase, com um rescalonamento próprio de cerca de 0,1. Particularmente, no regime em que o número de Chern desaparece, a entropia do emaranhamento é fracamente independente da magnetização. Isso também é observado para outros cortes no espaço de fases. Mesmo que na fase supercondutora uma quantização não seja esperada, a estrutura do tipo platô fornece uma assinatura sensível das fases. Como demonstrado anteriormente [49], um resultado semelhante foi obtido para a condutividade de Hall e suas derivadas. Embora a condutividade de Hall também não seja quantizada, ela permite uma assinatura clara das transições entre fases topológicas e, em certo grau, fornece informação sobre a mudança no número de Chern, embora não forneça informação sobre o verdadeiro número de Chern. Nesse aspecto, a entropia de emaranhamento fornece uma informação mais detalhada sobre as fases topológicas.

Na sequência, estudamos separadamente as contribuições extensivas (proporcionais ao perímetro) e não-extensivas à entropia de emaranhamento, sua dependência com a fase topológica e a geometria da fronteira. Primeiro consideramos as geometrias mostradas no painel acima da Fig.35, quando

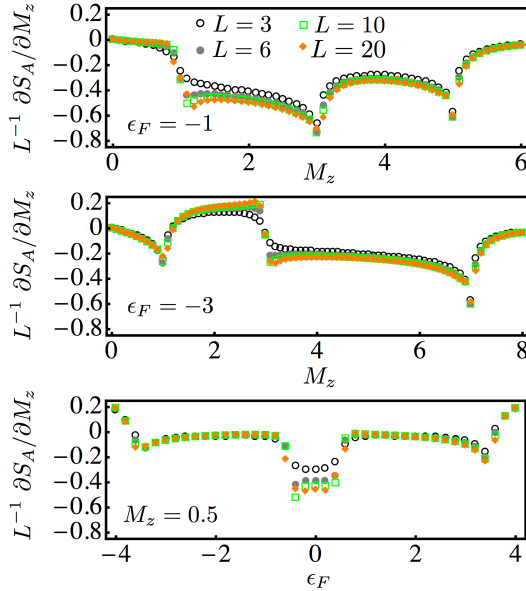


Figura 34 – Derivada da entropia do emaranhamento local em relação à magnetização de uma geometria quadrada, com sítios $L \times L$ para $L = 3, 6, 10$ como função do campo de Zeeman M_z para $\epsilon_F = -1, -3$, e como função do potencial químico ϵ_F para $M_z = 0.5$.

calculamos a entropia do emaranhamento usando o método explicado na seção 9.1.4 e analisamos a lei das áreas para esses sistemas. Nas soluções numéricas, tipicamente consideramos o tamanho linear $L \lesssim 30$.

10.2.1.1 Entropia - contribuição extensiva

Conforme discutido acima, a geometria da subregião afeta diretamente os resultados da entropia do emaranhamento. Aqui consideramos as seguintes geometrias: quadrada (S), em formato de L (L), em formato de U (U), de quadrado rotacionado (rS), em formato de L rotacionado (rL) e do tipo triangular (T), veja o painel superior da Fig.35. Analisamos a influência dos formatos na contribuição extensiva ξ_A à entropia do emaranhamento de acordo com a Eq. (9.29), onde A assume os contornos S, L, U, rS, rL ou T.

A Fig.35 (painel inferior) mostra as várias contribuições extensivas (ξ_S , ξ_L , ξ_U , ξ_{rS} , ξ_{rL} e ξ_T) obtidas ajustando o limite do perímetro assintótico

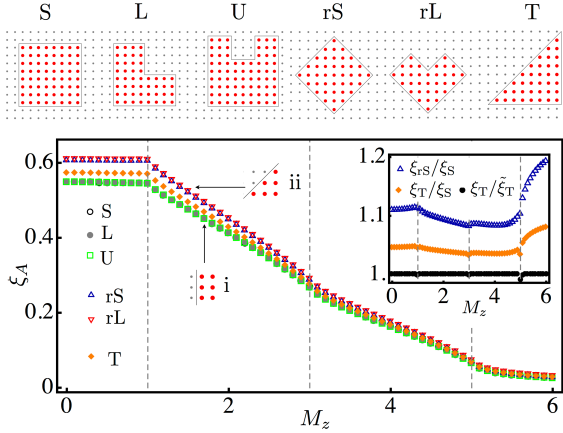


Figura 35 – Painel superior: diferentes geometrias de subsistemas utilizados para calcular a entropia de emaranhamento. Os pontos vermelhos correspondem aos graus de liberdade da rede considerados. As linhas pretas definem a fronteira de uma dada geometria e foram usadas para calcular seu perimetro P . Painel inferior: Coeficiente da contribuição do perimetro à entropia do emaranhamento, ξ_A , para diferentes geometrias, $A = S, L, \dots$, obtido ajustando essa entropia, calculada numericamente para vários tamanhos de sistemas, como função de M_z com $\epsilon_F = -1$. Inset: razões de ξ 's como função de M_z .

(P) para os diferentes formatos sobre um corte no espaço de fases, onde $\epsilon_F = -1$ é mantido constante. A tendência geral é uma diminuição dessas contribuições, já que à medida que a magnetização aumenta, a entropia diminui. Os formatos em S, L e U geram a mesma contribuição. Os valores para os formatos rS e rL também coincidem, mas apresentam um maior valor que o visto nos formatos S, L e U. Esse fenômeno ocorre à medida que as dois tipos de fronteiras, rotuladas como i e ii na figura, tem orientações diferentes em relação à rede subjacente.

A geometria com formato T tem fronteiras mistas, possuindo uma fração $2/(2 + \sqrt{2})$ da fronteira do tipo i e uma fração $\sqrt{2}/(2 + \sqrt{2})$ do tipo ii. Os valores de ξ_T ficam entre ξ_S e ξ_{rS} . O inset mostra que as razões ξ_{rS}/ξ_S e ξ_T/ξ_S variam com M_z e são, portanto, específicas do modelo. Também é demonstrado que o comportamento de ξ_T com M_z pode ser reproduzido definindo $\tilde{\xi}_T = (2\xi_T + \sqrt{2}\xi_{rS})/(2 + \sqrt{2})$.

A partir dessas observações, podemos concluir que a contribuição extensiva varia com os detalhes específicos da fronteira, e a razão entre os tipos

diferentes de fronteiras não é universal, dependendo de detalhes específicos do sistema. Todavia, quando fronteiras mistas são consideradas, seus efeitos são aditivos e a contribuição extensiva total é uma média sobre os ξ 's dos tipos diferentes de fronteiras.

10.2.1.2 Entropia - contribuição não-extensiva

Voltamos agora ao estudo das contribuições não-extensivas ($\gamma_S, \gamma_L, \gamma_U, \gamma_{rS}, \gamma_{rL}$ e γ_T) à entropia do emaranhamento. A Fig.36 (painel esquerdo) mostra os resultados para γ_L (γ_U) e γ_S correspondendo ao conjunto de valores $[0, 6]$ do acoplamento de Zeeman M_z para $\varepsilon_F = -1$ fixo. Esse gráfico claramente mostra que todas as contribuições não-extensivas são devido aos vértices da geometria, já que ela não distingue entre fases topológicas diferentes, como observado antes em outros problemas [157, 158, 176]. O efeito dos vértices do tipo I (veja painel direito) sobre a contribuição não-extensiva γ_I à entropia do emaranhamento é aditiva[157] à medida que se obtém $\gamma_S/4 = \gamma_L/6 = \gamma_U/8$, isto é, $\gamma_A = n_A \gamma_I$ com n_A sendo o número de vértices e A assumindo as formas S, L ou U. Uma conclusão semelhante pode ser deduzida da Fig.36 (painel médio) à contribuição não extensiva γ_{II} quando considera-se os vértices do tipo II. A verificação numérica desse fato nos permite calcular a contribuição relativa de cada tipo de vértice à entropia do emaranhamento. A Fig.36 (painel direito) mostra a comparação das diferentes contribuições em função de M_z . Podemos ver que há uma diminuição geral dessas contribuições à medida que a magnetização aumenta, como esperado, exceto nos pontos de transição. A razão γ_{II}/γ_I e γ_{III}/γ_I é dependente dos detalhes do sistema e é, portanto, uma quantidade não-universal. Uma conclusão semelhante surge ao observar o gráfico de γ_A em função de ξ_A , para qualquer subsistema A . Portanto, os resultados para a contribuição não-extensiva à entropia do emaranhamento não mostram natureza topológica. Perceba que as relações $\gamma_L = 3/2\gamma_S$ e $\gamma_U = 2\gamma_S$ obtidos previamente implicam ausência de um termo topológico, já que caso estivesse presente isso adicionaria um termo constante a essas relações.

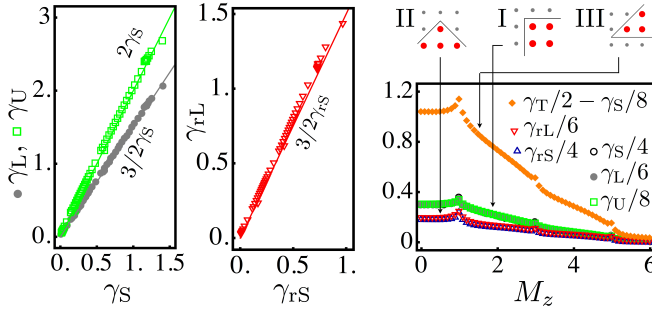


Figura 36 – Painel esquerdo: correção para as geometrias L e U em função da correção da geometria S. Painel do meio: correção para as geometrias rL em função da geometria rS. Painel direito: Contribuição de tipos diferentes de vértices à entropia do emaranhamento.

10.2.2 Entropia do emaranhamento topológica

Para um sistema genérico, o termo γ_A da Eq. (9.29) pode ter contribuições vindas dos vértices da geometria, assim como contribuições topológicas. Entretanto, como mencionado acima, esse termo para o modelo e as geometrias consideradas não tem contribuição topológica. Isso é esperado para certos sistemas [156, 157], incluindo hamiltonianos quadráticos, mesmo com números de Chern diferentes de zero ou fases Z_2 .

Com o intuito de confirmar a ausência da contribuição topológica, consideramos o método descrito na Ref. [107], que permite calcular o termo topológico. O procedimento é designado para minimizar os efeitos de tamanho finito e isolar uma possível contribuição topológica. Aqui a chamada TEE é obtida considerando três regiões A, B, C (definidas na Fig. 16), calculada a partir da eq. (9.30), seja ela,

$$\begin{aligned} S_{\text{Topo}} &= S_A + S_B + S_C - S_{AB} - S_{BC} - S_{AC} + S_{ABC} \\ &= -2\gamma_{\text{Topo}}. \end{aligned} \quad (10.48)$$

No primeiro painel da Fig. 37 apresentamos os resultados para $L = 24$, em função do potencial químico e do termo de Zeeman. Consideramos as três regiões A, B, C imersas em um sistema infinito, em que podemos calcular as matrizes de correlação em termos da solução no espaço dos momentos do supercondutor topológico. Os resultados claramente mostram as linhas de

transição entre as várias fases. Um olhar próximo aos resultados numéricos mostra que dentro das várias regiões a TEE é pequena, porém finita para sistemas finitos. Contudo, como demonstrado em outros painéis da Fig. 37, longe das linhas de transição, temos $\gamma_{\text{topo}} \rightarrow 0$, para todas as fases, sem distinção, à medida que o tamanho do sistema aumenta. Isso é esperado para um supercondutor do tipo \mathbb{Z} (relacionado ao efeito Hall quântico inteiro em que não há ordem topológica, no sentido de Wen [77, 177]). Portanto, nessas geometrias a TEE não distingue as várias fases. Entretanto, na próxima seção, veremos que um sistema finito com geometria cilíndrica permite isolar o termo que possui informação sobre a natureza topológica das várias fases [152, 158].

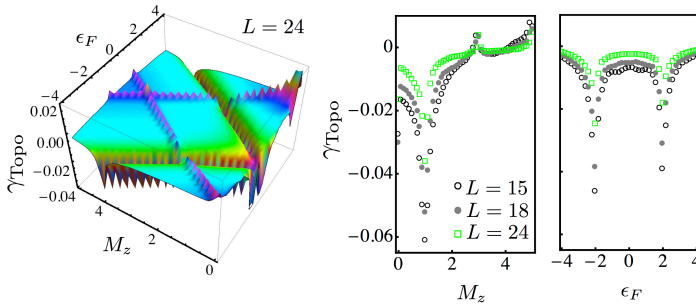


Figura 37 – Painel esquerdo: γ_{Topo} para $L = 24$ em função do potencial químico e da magnetização. Painéis médio e direito: efeitos de tamanho finito de γ_{Topo} , juntamente com cortes no diagrama de fases.

10.2.3 Entropia do emaranhamento em geometria cilíndrica

Agora abordamos a entropia do emaranhamento em uma geometria cilíndrica (Cy) (veja Fig. 15). A subregião A é, neste caso, metade do cilindro (finito). Para os cálculos numéricos, consideramos cilindros de tamanhos até $L_y = 70$ e perímetros de tamanhos variados até $L_x = 400$. Consideramos condições de fronteira aberta ao longo da direção y e condições periódicas de contorno na direção x .

Em relação à contribuição que é extensiva no perímetro do sistema $P = L_x$, encontramos, como esperado, um bom acordo entre ξ_S (veja se-

ção 10.2.1.2) e ξ_{C_Y} , já que em ambos os casos a fronteira é do tipo i (veja Fig.35). Essa geometria não tem vértices e a componente não-extensiva da entropia do emaranhamento, γ_{C_Y} , recebe contribuições apenas dos estados dos vértices. Encontramos que, em fases topologicamente triviais [49, 116] com $C = 0$ (sem estados de borda), γ_{C_Y} anula-se. Nas fases topológicas não-triviais encontramos que $\gamma_{C_Y} \sim -\ln 2$ quando $C = 0$ ou $C = -2$ (ambas as fases têm 4 estados de borda) e $\gamma_{C_Y} \sim -1/2 \ln 2$ quando $C = 1$ or $C = -1$ (com 2 estados de borda), como indicado na Fig.38. Portanto, nesse caso as contribuições à TEE podem ser escritas como $\gamma_{C_Y} = -(1/2 \ln 2)g_{\text{edge}}$, onde g_{edge} é o número de pares de estados de borda. Já que os estados de borda são quirais, γ_{C_Y} parece concordar com o resultado $(1/2) \ln(2)$ encontrado em líquidos de spin quirais [177]. Um resultado semelhante foi encontrado para o modo de Majorana do modelo de Kondo de n-canais com $n = 2$ e $S = 1/2$, devido à contribuição de impurezas [178].

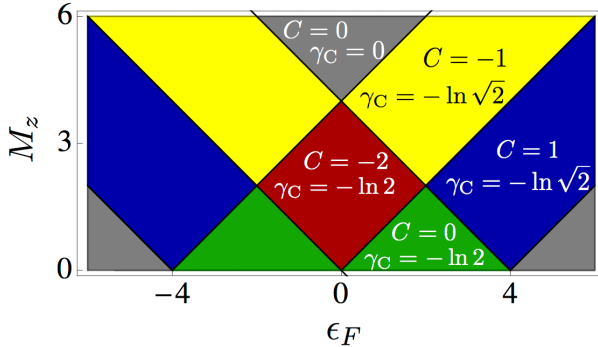


Figura 38 – Fases topológicas e seus números de Chern, C , como função do potencial químico ε_F , e da magnetização, M_z . γ_C é a entropia topológica do emaranhamento (veja o texto). As fases com $C = 0$ e $\gamma_C = 0$ são topologicamente triviais, sem gap.

Para entender a origem desses termos, analisamos cada contribuição α à entropia do emaranhamento, como dado na Eq.(9.18). Há uma série de termos robustos de valores $+(1/2) \ln(2)$, que são independentes do tamanho do sistema. Esses termos estão relacionados aos estados de borda (veja abaixo). Por outro lado, extrapolando os termos não robustos ao limite de tamanho infinito gera uma contribuição negativa à entropia do emaranha-

mento. Como se constata, somando as contribuições dos modos robustos com o valor extrapolado das contribuições remanescentes dá um valor negativo para γ_{Cy} . Checamos que no sistema finito com uma geometria quadrada (condições de contorno livres em ambas as direções espaciais) não há modos robustos, isto é, todas as contribuições à entropia do emaranhamento não são robustas a mudanças em L_x .

Espectro do emaranhamento

Com o intuito de entender melhor esses resultados, analisamos em detalhes o espectro da entropia do emaranhamento de geometria cilíndrica. A Fig. 39 mostra o espectro do emaranhamento de uma partícula para cada uma das fases da Fig. 18 em função de k_x . Perceba que o Hamiltoniano tem simetria partícula-buraco, $\Omega(k_x) = -\Omega(-k_x)$.

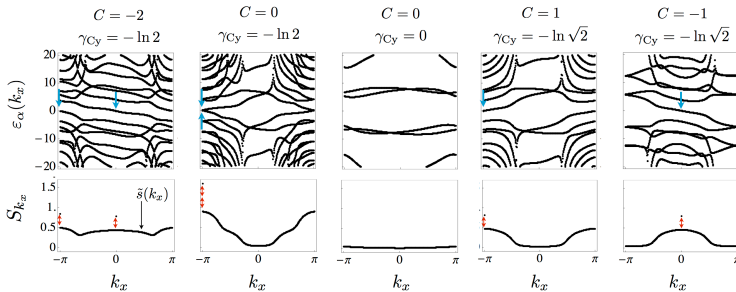


Figura 39 – Painéis superiores: espectro do emaranhamento de uma única partícula em função de k_x , calculado para um ponto representativo das diferentes fases topológicas da Fig. 18, correspondendo respectivamente, a $\{\epsilon_F, M_z\} = \{1., 2.\}, \{2., 1.\}, \{6., 1.\}, \{4., 2.\}, \{2., 4.\}$ (da esquerda para direita) com $L_x = 400$ e $L_y = 70$. A seta azul refere-se a estados extras surgindo em $\epsilon_\alpha = 0$, que gera o termo extra $1/2 \ln 2$ à entropia. Painéis inferiores: contribuição à entropia do emaranhamento para cada setor de momentos. A seta vermelha corresponde a uma contribuição extra de $1/2 \ln 2$.

Quando o espectro do emaranhamento não tem gap, o modo de energia zero é duplamente degenerado. Essa característica foi observada previamente em um supercondutor [133] e o estudo do espectro do emaranhamento no modelo de Kitaev [158]. Como consequência, no cálculo de S_{k_x} , os estados degenerados são responsáveis pela contribuição de um termo extra $1/2 \ln 2$:

$S_{k_x} = \tilde{s}(k_x) + 1/2 \ln 2 \sum_p \delta_{k_x, k_p}$, com $\tilde{s}(k_x)$ sendo uma função contínua de k_x e onde o k_p 's ($= 0, -\pi$ no exemplos da Fig. 39) são os valores dos momentos para os quais a degenerescência surge. A função $\tilde{s}(k_x)$ é mostrada na Fig. 39 onde os pontos k_p também são identificados. Para grandes valores de L_x , a entropia do emaranhamento pode ser aproximada por

$$S[\rho_A] \simeq \left[\int \frac{dk_x}{2\pi} \tilde{s}(k_x) \right] L_x + (1/2 \ln 2) g_{\text{edge}}, \quad (10.49)$$

trocando a soma sobre os valores dos momentos por uma integral. Isso corresponde a $\xi_{C_Y} = \int \frac{dk_x}{2\pi} \tilde{s}(k_x)$ and $\gamma_{C_Y} = -(1/2 \ln 2) g_{\text{edge}}$.

A Fig. 39 mostra uma diferença marcante entre o espectro do emaranhamento de isolantes topológicos e estados topologicamente triviais: para $C \neq 0$, pequenas deformações nas “bandas” de emaranhamento não geram um espectro de emaranhamento sem gap. Para $C = 0$, duas situações podem surgir: se não houver modos de bordas, o espectro do emaranhamento apresenta um gap (veja a Fig. 39, terceiro painel); na presença de modos de borda, ainda é possível abrir um gap ao aumentar a degenerescência surgida em k_p (veja a Fig. 39, segundo painel com $k_p = -\pi$).

Na Ref. [136], uma observação relacionada, porém de certa forma diferente, foi feita por Hughes et al. para o espectro do emaranhamento de uma única partícula para isolantes de Chern e de spin Hall. Em seu trabalho, os autores reportaram que, para um isolante trivial com modos de borda, mesmo se o espectro do emaranhamento não tenha gap as bandas que passam pelo zero são desconectadas do resto do espectro.

Conclusões

Várias técnicas da informação quântica foram utilizadas neste trabalho para detectar e distinguir transições de fase topológicas em supercondutores. Em particular, o espectro do emaranhamento, a entropia do emaranhamento de von Neumann, a entropia do emaranhamento topológica, a fidelidade e o recentemente introduzido espectro da fidelidade. Em adição a uma identificação fiel das transições, esses métodos claramente sinalizam os modos relevantes responsáveis pelas transições. A análise do autovetor de maior contribuição esclarece a natureza de cada fase e os conteúdos associados a uma transição entre duas fases. Além disso, essa análise permite distinguir entre uma fase trivial e uma topológica, bem como as fases topológicas \mathbb{Z}_2 e \mathbb{Z} . Especificamente, para o supercondutor de onda- p considerado aqui, o estado de base de spin tripleto tem um papel particular nas fases topológicas não-triviais, alcançando a saturação.

A análise do espectro do operador fidelidade permite uma caracterização da sequência de transições que precisam ocorrer entre dois pontos arbitrários no diagrama de fases.

Também mostramos que a entropia do emaranhamento claramente sinaliza as transições topológicas e suas derivadas têm características nítidas ao redor das linhas de transição, mesmo para sistemas de tamanho pequeno. Além disso, a derivada da entropia do emaranhamento em relação ao termo de Zeeman mostra platôs aproximados que fornecem uma assinatura sensível a cada fase topológica e parece estar conectada com o número de Chern. Verificamos que resultados similares podem ser obtidos para isolantes topológicos.

Em um sistema finito, analisamos separadamente as diferentes contribuições para a entropia do emaranhamento, as quais podem ser proporcionais ou independentes do perímetro do subsistema. Estudamos essas contribuições como função das constantes de acoplamento do Hamiltoniano e da geometria do subsistema finito (A). Confirmamos que a contribuição extensiva, ξ_A , é genericamente não-universal dependendo dos detalhes específicos do sistema. Por outro lado, a contribuição não-extensiva, γ_A , está diretamente relacionada com os vértices da geometria. Sua relação é devido à orientação dos vértices em relação à rede subjacente e pequenos ângulos dão uma contribuição maior à entropia do emaranhamento.

Devido à natureza quadrática do Hamiltoniano BCS, espera-se que a TEE seja nula dentro de cada fase topológica. O presente trabalho verificou essa expectativa, mas também demonstrou que a TEE para um sistema finito ainda sinaliza as transições de fase topológicas.

Vimos também que em uma geometria cilíndrica, a contribuição topológica à entropia do emaranhamento é finita e é, em geral, negativa [152]. A razão está associada com uma contribuição negativa robusta devido a estados de borda sem gap, com cada estado contribuindo com $(1/2) \ln 2$ à entropia, característico de estados de borda do tipo Majorana. A análise do espectro do emaranhamento [158] mostra que contribuições extras à entropia estão associadas com degenerescências espectrais, em concordância com trabalhos anteriores para outros sistemas topológicos.

Como uma nota final, salientamos que embora a TEE seja nula nesse problema (no limite termodinâmico e dentro de cada região no diagrama de fase) e não mostra ordem topológica no sentido de Wen, informações complementares são obtidas escolhendo condições de contorno apropriadas. Um estudo detalhado revela a informação contida na entropia do emaranhamento e no espectro do emaranhamento, que pode ser relacionada diretamente às fases topológicas, alternativamente caracterizadas pela presença de números de Chern não-nulos ou pela presença de estados de borda.

Referências Bibliográficas

- 1 FIELDS, G. S. Guía para los modelos multisectoriales del mercado de trabajo en los países en desarrollo. El Trimestre Económico, v. 0, n. 298, p. 257–297, abril-jun 2008. Disponível em: <<http://ideas.repec.org/a/elt/journal/v75y2008i298p257-297.html>>. Citado na página 19.
- 2 AGÉNOR, P.; MONTIEL, P. Development macroeconomics. [S.l.]: Princeton Univ Pr, 2008. Citado na página 19.
- 3 SILVEIRA, J.; ESPÍNDOLA, A.; PENNA, T. Agent-based model to rural–urban migration analysis. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, Elsevier, v. 364, p. 445–456, 2006. Citado 3 vezes nas páginas 19, 21 e 36.
- 4 GARCÍA-DÍAZ, C.; MORENO-MONROY, A. Social influence, agent heterogeneity and the emergence of the urban informal sector. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, Elsevier, v. 391, n. 1563-1574, 2012. Citado 4 vezes nas páginas 19, 21, 61 e 62.
- 5 MALONEY, W. F. Informality revisited. World Development, v. 32, n. 7, p. 1159 – 1178, 2004. ISSN 0305-750X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0305750X04000555>>. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 61.
- 6 FIELDS, G. Segmented labor market models in developing countries. Cornell University, 2009. Disponível em: <<http://digitalcommons.ilr.cornell.edu/articles/162/>>. Citado na página 21.
- 7 DIXIT, A. Models of dual economies. Models of economic growth, Wiley New York, p. 325–357, 1973. Citado na página 21.
- 8 BASU, K. Analytical development economics: the less developed economy revisited. [S.l.]: the MIT press, 2003. Citado na página 21.

- 9 HARRIS, J.; TODARO, M. Migration, unemployment and development: a two-sector analysis. The American Economic Review, JSTOR, v. 60, n. 1, p. 126–142, 1970. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 23.
- 10 ESPÍNDOLA, A. L.; PENNA, T. J. P.; SILVEIRA, J. J. Rural-urban migration in D-dimensional lattices. International Journal of Modern Physics C, v. 16, n. 12, p. 1831–1840, 2005. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0129183105008357>>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 48.
- 11 DOUGLAS, P. The Cobb-Douglas production function once again: its history, its testing, and some new empirical values. The Journal of Political Economy, JSTOR, p. 903–915, 1976. Citado na página 23.
- 12 ROMER, D. Advanced macroeconomics. [S.l.]: Mcgraw-hill, 1996. Citado 3 vezes nas páginas 23, 24 e 31.
- 13 TODARO, M. A model of labor migration and urban unemployment in less developed countries. The American Economic Review, JSTOR, v. 59, n. 1, p. 138–148, 1969. Citado na página 23.
- 14 POLLAK, R.; WALES, T. Demand system specification and estimation. [S.l.]: Oxford University Press, USA, 1995. Citado na página 27.
- 15 SUMMERS, L. H. Relative wages, efficiency wages, and keynesian unemployment. The American Economic Review, American Economic Association, v. 78, n. 2, p. pp. 383–388, 1988. ISSN 00028282. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1818155>>. Citado na página 31.
- 16 ARTHUR, W. et al. The economy as an evolving complex system II. [S.l.]: Addison-Wesley Reading, MA, 1997. Citado na página 39.
- 17 BLUME, M.; EMERY, V. J.; GRIFFITHS, R. B. Ising model for the λ transition and phase separation in $\text{he}^3\text{-he}^4$ mixtures. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 4, p. 1071–1077, Sep 1971. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.4.1071>>. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 198.
- 18 TRAIN, K. Discrete choice methods with simulation. [S.l.]: Cambridge Univ Pr, 2003. Citado na página 44.
- 19 MCFADDEN, D.; CALIFORNIA, B. I. o. U. a. R. D. University of. Conditional logit analysis of qualitative choice behavior. Institute of Urban and Regional Development, University of California, 1973. Citado na página 45.

- 20 NEWMAN, M.; BARKEMA, G. Monte Carlo methods in statistical physics. [S.l.]: Oxford University Press, 1999. Citado na página 46.
- 21 STAUFFER, D.; PENNA, T. Crossover in the Cont-Bouchaud percolation model for market fluctuations. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, Elsevier, v. 256, n. 1, p. 284–290, 1998. Citado na página 48.
- 22 RAY, D. Development economics. [S.l.]: Princeton Univ Pr, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 52 e 61.
- 23 GRIFFITHS, R. First-order phase transitions in spin-one Ising systems. Physica, v. 33, p. 689–690, 1967. Citado 2 vezes nas páginas 55 e 198.
- 24 GOYAL, S. Connections: an introduction to the economics of networks. [S.l.]: Princeton Univ Pr, 2009. Citado na página 62.
- 25 ALBERT, R.; BARABASI, A. Statistical mechanics of complex networks. Review of Modern Physics, v. 74, p. 47–97, 2002. Citado na página 62.
- 26 LANDAU, L. Zur theorie der phasenumwandlungen ii. Phys. Z. Sowjetunion, v. 11, p. 26–35, 1937. Citado na página 66.
- 27 LANDAU, L. D.; GINZBURG, V. L. On the theory of superconductivity. Zh. Eksp. Teor. Fiz., v. 20, p. 1064, 1950. Citado na página 66.
- 28 WEN, X. G. Vacuum degeneracy of chiral spin states in compactified space. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 40, p. 7387–7390, Oct 1989. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.40-7387>>. Citado 2 vezes nas páginas 67 e 71.
- 29 WEN, X. G. Topological orders in rigid states. International Journal of Modern Physics B, v. 04, n. 02, p. 239–271, 1990. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979290000139>>. Citado 2 vezes nas páginas 67 e 123.
- 30 WEN, X. G.; NIU, Q. Ground-state degeneracy of the fractional quantum Hall states in the presence of a random potential and on high-genus Riemann surfaces. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 41, p. 9377–9396, May 1990. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.9377>>. Citado 2 vezes nas páginas 67 e 123.

- 31 HASAN, M. Z.; KANE, C. L. *Colloquium: Topological insulators*. Rev. Mod. Phys., American Physical Society, v. 82, p. 3045–3067, Nov 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.3045>>. Citado 2 vezes nas páginas 67 e 70.
- 32 QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Topological insulators and superconductors. Rev. Mod. Phys., American Physical Society, v. 83, p. 1057–1110, Oct 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.83.1057>>. Citado 3 vezes nas páginas 67, 70 e 133.
- 33 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. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0034-4885/75/i=7/a=076501>>. Citado na página 67.
- 34 KÖNIG, M. et al. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. Science, v. 318, n. 5851, p. 766–770, 2007. Disponível em: <<http://www.sciencemag.org/content/318/5851/766.abstract>>. Citado 2 vezes nas páginas 67 e 70.
- 35 HSIEH, D. et al. A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. Nature, v. 452, p. 970–974, 2008. Disponível em: <http://www.nature.com/nature/journal/v452/n7190/supinfo/nature06843_S1.html>. Citado 2 vezes nas páginas 67 e 70.
- 36 XIA, Y. et al. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface. Nature Physics, v. 5, p. 398 – 402, 2009. Disponível em: <http://www.nature.com/nphys/journal/v5/n6/supinfo/nphys1274_S1.html>. Citado 2 vezes nas páginas 67 e 70.
- 37 MOURIK, V. et al. Signatures of Majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. Science, v. 336, n. 6084, p. 1003–1007, 2012. Disponível em: <<http://www.sciencemag.org/content/336/6084/1003.abstract>>. Citado na página 67.
- 38 DAS, A. et al. Zero-bias peaks and splitting in an Al–InAs nanowire topological superconductor as a signature of Majorana fermions. Nature Physics, v. 8, p. 887 – 895, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nphys2479>>. Citado na página 67.
- 39 DENG, M. T. et al. Anomalous zero-bias conductance peak in a Nb–InSb nanowire–Nb hybrid device. Nano Letters, v. 12, n. 12, p. 6414–6419, 2012. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/nl303758w>>. Citado na página 67.

- 40 ZHANG, F.; KANE, C. L.; MELE, E. J. Time-reversal-invariant topological superconductivity and Majorana Kramers pairs. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 111, p. 056402, Aug 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.056402>>. Citado na página 67.
- 41 ZHANG, F.; KANE, C. L.; MELE, E. J. Topological mirror superconductivity. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 111, p. 056403, Aug 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.056403>>. Citado na página 67.
- 42 NADJ-PERGE, S. et al. Proposal for realizing Majorana fermions in chains of magnetic atoms on a superconductor. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 88, p. 020407, Jul 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.020407>>. Citado na página 67.
- 43 VELDHORST, M. et al. Josephson supercurrent through a topological insulator surface state. Nature Materials, v. 11, p. 417–421, 2012. Citado na página 67.
- 44 WILLIAMS, J. R. et al. Unconventional Josephson effect in hybrid superconductor-topological insulator devices. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 109, p. 056803, Jul 2012. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.056803>>. Citado na página 67.
- 45 ROKHINSON, L. P.; LIU, X.; FURDYNA, J. K. The fractional a.c. Josephson effect in a semiconductor-superconductor nanowire as a signature of Majorana particles. Nature Physics, v. 8, p. 795 – 799, 2012. Citado na página 67.
- 46 SAN-JOSE, P. et al. Multiple Andreev reflection and critical current in topological superconducting nanowire junctions. New Journal of Physics, v. 15, p. 075019, 2013. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/1367-2630/15/7/075019/>>. Citado na página 67.
- 47 SCHNYDER, A. P.; BRYDON, P. M. R.; TIMM, C. Types of topological surface states in nodal noncentrosymmetric superconductors. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 85, p. 024522, Jan 2012. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.024522>>. Citado na página 67.

- 48 OJANEN, T.; KITAGAWA, T. Anomalous electromagnetic response of superconducting Rashba systems in trivial and topological phases. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 87, p. 014512, Jan 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.014512>>. Citado na página 67.
- 49 SACRAMENTO, P. D.; ARAÚJO, M. A. N.; CASTRO, E. V. Hall conductivity as bulk signature of topological transitions in superconductors. EPL (Europhysics Letters), v. 105, n. 3, p. 37011, 2014. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0295-5075/105/i=3/a=37011>>. Citado 9 vezes nas páginas 67, 73, 118, 134, 135, 136, 139, 159 e 165.
- 50 KLITZING, K. V.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 45, p. 494–497, Aug 1980. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.494>>. Citado na página 67.
- 51 HALPERIN, B. I. Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 25, p. 2185–2190, Feb 1982. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.25.2185>>. Citado na página 68.
- 52 HATSUGAI, Y. Chern number and edge states in the integer quantum Hall effect. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 71, p. 3697–3700, Nov 1993. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.71.3697>>. Citado na página 68.
- 53 XIAO, D.; CHANG, M.-C.; NIU, Q. Berry phase effects on electronic properties. Rev. Mod. Phys., American Physical Society, v. 82, p. 1959–2007, Jul 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.1959>>. Citado 2 vezes nas páginas 69 e 139.
- 54 NAGAOSA, N. et al. Anomalous Hall effect. Rev. Mod. Phys., American Physical Society, v. 82, p. 1539–1592, May 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.1539>>. Citado na página 69.
- 55 JAIN, J. K. Composite-fermion approach for the fractional quantum Hall effect. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 63, p. 199–202, Jul 1989. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.63.199>>. Citado na página 69.

- 56 SHEN, S.-Q. Spin transverse force on spin current in an electric field. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 95, p. 187203, Oct 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.187203>>. Citado na página 69.
- 57 SHEN, S. Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters. Springer, 2013. (Springer Series in Solid-State Sciences, v. 174). ISBN 9783642328589. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=ER9EAAAQBAJ>>. Citado 2 vezes nas páginas 69 e 101.
- 58 HALL, E. H. On a new action of the magnet on electric currents. The American Journal of Mathematics, v. 2, p. 287, 1879. Citado na página 69.
- 59 BALIAN, R.; WERTHAMER, N. R. Superconductivity with pairs in a relative p wave. Phys. Rev., American Physical Society, v. 131, p. 1553–1564, Aug 1963. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.131.1553>>. Citado na página 69.
- 60 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. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 61, p. 10267–10297, Apr 2000. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.10267>>. Citado 2 vezes nas páginas 70 e 104.
- 61 VOLOVIK, G. The Universe in a Helium Droplet. Clarendon Press, 2003. (International Series of Monographs on Physics). ISBN 9780198507826. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=cbngYQWaiDEC>>. Citado na página 70.
- 62 SATO, M.; TAKAHASHI, Y.; FUJIMOTO, S. Non-abelian topological order in s-wave superfluids of ultracold fermionic atoms. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 103, p. 020401, Jul 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.020401>>. Citado 2 vezes nas páginas 70 e 73.
- 63 SAU, J. D. et al. Generic new platform for topological quantum computation using semiconductor heterostructures. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 104, p. 040502, Jan 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.040502>>. Citado na página 70.

64 FU, L.; KANE, C. L. Superconducting proximity effect and Majorana fermions at the surface of a topological insulator. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 100, p. 096407, Mar 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.096407>>. Citado na página 70.

65 QI, X.-L.; HUGHES, T. L.; ZHANG, S.-C. Chiral topological superconductor from the quantum Hall state. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 82, p. 184516, Nov 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.184516>>. Citado na página 70.

66 SCHNYDER, A. P. et al. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 78, p. 195125, Nov 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.195125>>. Citado 4 vezes nas páginas 70, 106, 110 e 140.

67 THOULESS, D. J. et al. Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 49, p. 405–408, Aug 1982. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.405>>. Citado 3 vezes nas páginas 70, 71 e 101.

68 RYU, S. et al. Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy. New Journal of Physics, v. 12, n. 6, p. 065010, 2010. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/1367-2630/12/i=6/a=065010>>. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 140.

69 WEN, X. G. Gapless boundary excitations in the quantum Hall states and in the chiral spin states. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 43, p. 11025–11036, May 1991. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.11025>>. Citado na página 71.

70 WEN, X.; ZEE, A. Winding number, family index theorem, and electron hopping in a magnetic field. Nuclear Physics B, v. 316, n. 3, p. 641–662, 1989. ISSN 0550-3213. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/055032138990062X>>. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 141.

71 AMICO, L. et al. Entanglement in many-body systems. Rev. Mod. Phys., American Physical Society, v. 80, p. 517–576, May 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.517>>. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 72.

- 72 SACHDEV, S. Quantum Phase Transitions. John Wiley & Sons, Ltd, 2007. ISBN 9780470022184. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/9780470022184.hmm108>>. Citado na página 71.
- 73 GU, Z.-C.; WEN, X.-G. Tensor-entanglement-filtering renormalization approach and symmetry-protected topological order. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 80, p. 155131, Oct 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.155131>>. Citado na página 71.
- 74 CHEN, X.; LIU, Z.-X.; WEN, X.-G. Two-dimensional symmetry-protected topological orders and their protected gapless edge excitations. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 84, p. 235141, Dec 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.235141>>. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 124.
- 75 CHEN, X. et al. Symmetry-protected topological orders in interacting bosonic systems. Science, v. 338, n. 6114, p. 1604–1606, 2012. Disponível em: <<http://www.sciencemag.org/content/338/6114/1604.abstract>>. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 124.
- 76 CHEN, X.; GU, Z.-C.; WEN, X.-G. Local unitary transformation, long-range quantum entanglement, wave function renormalization, and topological order. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 82, p. 155138, Oct 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.155138>>. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 123.
- 77 WEN, X.-G. Topological orders and edge excitations in fractional quantum Hall states. Advances in Physics, v. 44, n. 5, p. 405–473, 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/00018739500101566>>. Citado 3 vezes nas páginas 72, 131 e 164.
- 78 GU, S.-J. Fidelity approach to quantum phase transitions. International Journal of Modern Physics B, v. 24, n. 23, p. 4371–4458, 2010. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979210056335>>. Citado 2 vezes nas páginas 72 e 127.
- 79 LATORRE, J.; RICO, E.; VIDAL, G. Ground state entanglement in quantum spin chains. Quantum Inf. Comput., v. 4, 2004. Citado na página 72.
- 80 GU, S.-J.; TIAN, G.-S.; LIN, H.-Q. Ground-state entanglement in the XXZ model. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 71, p. 052322, May 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.71.052322>>. Citado na página 72.

- 81 HAMMA, A. et al. Entanglement, fidelity, and topological entropy in a quantum phase transition to topological order. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 77, p. 155111, Apr 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.155111>>. Citado 2 vezes nas páginas 72 e 130.
- 82 YANG, M.-F. Ground-state fidelity in one-dimensional gapless models. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 76, p. 180403, Nov 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.180403>>. Citado 2 vezes nas páginas 72 e 127.
- 83 YANG, S. et al. Fidelity susceptibility and long-range correlation in the Kitaev honeycomb model. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 78, p. 012304, Jul 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.78.012304>>. Citado na página 72.
- 84 GU, S.-J. et al. Fidelity susceptibility, scaling, and universality in quantum critical phenomena. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 77, p. 245109, Jun 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.245109>>. Citado na página 72.
- 85 WANG, Z.; LIANG, Q.-F.; YAO, D.-X. Fidelity in topological superconductors with end Majorana fermions. Physics Letters A, v. 377, n. 38, p. 2653 – 2658, 2013. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960113006993>>. Citado na página 72.
- 86 ABASTO, D. F.; HAMMA, A.; ZANARDI, P. Fidelity analysis of topological quantum phase transitions. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 78, p. 010301, Jul 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.78.010301>>. Citado na página 72.
- 87 VENUTI, L. C. et al. Fidelity approach to the Hubbard model. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 78, p. 115410, Sep 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.115410>>. Citado na página 72.
- 88 ABASTO, D. F.; ZANARDI, P. Thermal states of the Kitaev honeycomb model: Bures metric analysis. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 79, p. 012321, Jan 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.79.012321>>. Citado na página 73.

- 89 ZHAO, J.-H.; ZHOU, H.-Q. Singularities in ground-state fidelity and quantum phase transitions for the Kitaev model. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 80, p. 014403, Jul 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.014403>>. Citado na página 73.
- 90 ERIKSSON, E.; JOHANNESSON, H. Reduced fidelity in topological quantum phase transitions. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 79, p. 060301, Jun 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.79.060301>>. Citado na página 73.
- 91 CASTELNOVO, C.; CHAMON, C. Quantum topological phase transition at the microscopic level. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 77, p. 054433, Feb 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.054433>>. Citado na página 73.
- 92 TREBST, S. et al. Breakdown of a topological phase: Quantum phase transition in a loop gas model with tension. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 98, p. 070602, Feb 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.070602>>. Citado na página 73.
- 93 WANG, Z. et al. Reduced fidelity in the Kitaev honeycomb model. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 81, p. 062350, Jun 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.81.062350>>. Citado na página 73.
- 94 NIELSEN, M.; CHUANG, I. Quantum Computation and Quantum Information. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. Citado na página 73.
- 95 WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 80, p. 2245-2248, Mar 1998. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.80.2245>>. Citado na página 73.
- 96 VEDRAL, V. Mean-field approximation and multipartite thermal correlations. New Journal of Physics, v. 6, p. 22, 2004. Citado na página 73.
- 97 GU, S.-J.; SUN, C.-P.; LIN, H.-Q. Universal role of correlation entropy in critical phenomena. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, v. 41, n. 2, p. 025002, 2008. Citado na página 73.

- 98 VIDAL, G.; WERNER, R. F. Computable measure of entanglement. Phys. Rev. A, v. 65, p. 032314, Feb 2002. Citado na página 73.
- 99 MEYER, D. A.; WALLACH, N. R. Global entanglement in multipartite systems. Journal of Mathematical Physics, v. 43, n. 9, p. 4273-4278, 2002. Citado na página 73.
- 100 OLIVEIRA, T. R. de; RIGOLIN, G.; OLIVEIRA, M. C. de. Genuine multipartite entanglement in quantum phase transitions. Phys. Rev. A, v. 73, p. 010305, Jan 2006. Citado na página 73.
- 101 OLIVEIRA, T. R. de et al. Multipartite entanglement signature of quantum phase transitions. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 97, p. 170401, Oct 2006. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.170401>>. Citado na página 73.
- 102 LUNKES, C.; BRUKNER, C.; VEDRAL, V. Natural multipartite entanglement in a Fermi gas. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 95, p. 030503, Jul 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.030503>>. Citado na página 73.
- 103 HEANEY, L.; ANDERS, J.; VEDRAL, V. Spatial entanglement of a free bosonic field. arXiv: quant-ph, v. 0607069v3, 2007. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/quant-ph/0607069>>. Citado na página 73.
- 104 OH, S.; KIM, J. Entanglement of electron spins in superconductors. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 71, p. 144523, Apr 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.144523>>. Citado na página 73.
- 105 ZANARDI, P.; GIORDA, P.; COZZINI, M. Information-theoretic differential geometry of quantum phase transitions. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 99, p. 100603, Sep 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.100603>>. Citado 2 vezes nas páginas 73 e 127.
- 106 VENUTI, L. C.; ZANARDI, P. Quantum critical scaling of the geometric tensors. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 99, p. 095701, Aug 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.095701>>. Citado 2 vezes nas páginas 73 e 127.

- 107 KITAEV, A.; PRESKILL, J. Topological entanglement entropy. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 96, p. 110404, Mar 2006. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.110404>>. Citado 3 vezes nas páginas 73, 129 e 163.
- 108 LEVIN, M.; WEN, X.-G. Detecting topological order in a ground state wave function. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 96, p. 110405, Mar 2006. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.110405>>. Citado 2 vezes nas páginas 73 e 129.
- 109 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. Solid State Physics. 6277 Sea Harbor Drive, Orlando, FL: Harcourt College, 1976. Citado na página 75.
- 110 YOSHIOKA, D. The quantum Hall effect. [S.l.]: Springer, 2002. Citado na página 79.
- 111 GRIFFITHS, D. J. Introduction to Quantum Mechanics. second edition. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 85, 91, 92 e 97.
- 112 PINTO, A. C. A. et al. Comment on the adiabatic condition. American Journal of Physics, v. 68, n. 10, p. 955–958, 2000. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aapt/journal/ajp/68/10/10.1119/1.1285944>>. Citado na página 89.
- 113 SHEN, S.-Q. Spin Hall effect and Berry phase in two-dimensional electron gas. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 70, p. 081311, Aug 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.081311>>. Citado na página 101.
- 114 SATO, M. Topological properties of spin-triplet superconductors and Fermi surface topology in the normal state. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 79, p. 214526, Jun 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.214526>>. Citado na página 101.
- 115 PERSHOGUBA, S. S.; YAKOVENKO, V. M. Shockley model description of surface states in topological insulators. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 86, p. 075304, Aug 2012. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.075304>>. Citado na página 102.
- 116 SATO, M.; FUJIMOTO, S. Topological phases of noncentrosymmetric superconductors: Edge states, Majorana fermions, and non-abelian

- statistics. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 79, p. 094504, Mar 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.094504>>. Citado 6 vezes nas páginas 102, 118, 134, 139, 141 e 165.
- 117 SIGRIST, M.; UEDA, K. Phenomenological theory of unconventional superconductivity. Reviews of Modern physics, APS, v. 63, n. 2, p. 239, 1991. Citado 2 vezes nas páginas 104 e 112.
- 118 BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E. I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. Journal of Physics C: Solid State Physics, v. 17, n. 33, p. 6039, 1984. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0022-3719/17/i=33/a=015>>. Citado na página 105.
- 119 GENNES, P.-G. d. Superconductivity of metals and alloys. 2465 Central Avenue, Boulder, CO 80301: Advanced Book Program, Perseus Books Group, 1999. Citado na página 112.
- 120 SACRAMENTO, P.; DUGAEV, V.; VIEIRA, V. Magnetic impurities in a superconductor: Effect of domain walls and interference. Physical Review B, APS, v. 76, n. 1, p. 014512, 2007. Citado na página 112.
- 121 PAUNKOVIĆ, N. et al. Fidelity between partial states as a signature of quantum phase transitions. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 77, p. 052302, May 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.77.052302>>. Citado 2 vezes nas páginas 112 e 127.
- 122 FETTER, A. L.; WALECKA, J. D. Quantum theory of many-particle systems. 31 East 2nd Street, Mineola, N.Y. 11501: Courier Dover Publications, 2003. Citado na página 115.
- 123 SACRAMENTO, P. et al. Anomalous Hall effect in superconductors with spin-orbit interaction. Physical Review B, APS, v. 85, n. 1, p. 014518, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 118 e 135.
- 124 PESCHEL, I. Calculation of reduced density matrices from correlation functions. Journal of Physics A: Mathematical and General, v. 36, n. 14, p. L205, 2003. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0305-4470/36/i=14/a=101>>. Citado 2 vezes nas páginas 119 e 121.
- 125 CHUNG, M.-C.; PESCHEL, I. Density-matrix spectra of solvable fermionic systems. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 64, p.

- 064412, Jul 2001. Disponível em: <[http://link.aps.org/doi/10.1103-PhysRevB.64.064412](http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.64.064412)>. Citado na página 119.
- 126 CHEONG, S.-A.; HENLEY, C. L. Many-body density matrices for free fermions. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 69, p. 075111, Feb 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.075111>>. Citado na página 119.
- 127 PESCHEL, I.; EISLER, V. Reduced density matrices and entanglement entropy in free lattice models. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, v. 42, n. 50, p. 504003, 2009. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/1751-8121/42/i=50/a=504003>>. Citado na página 119.
- 128 PESCHEL, I. Special review: Entanglement in solvable many-particle models. Brazilian Journal of Physics, v. 42, n. 3-4, p. 267–291, 2012. Citado na página 119.
- 129 LI, H.; HALDANE, F. D. M. Entanglement spectrum as a generalization of entanglement entropy: Identification of topological order in non-abelian fractional quantum Hall effect states. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 101, p. 010504, Jul 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.010504>>. Citado 2 vezes nas páginas 122 e 129.
- 130 REGNAULT, N.; BERNEVIG, B. A.; HALDANE, F. D. M. Topological entanglement and clustering of Jain hierarchy states. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 103, p. 016801, Jun 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.016801>>. Citado na página 122.
- 131 STERDYNIK, A.; REGNAULT, N.; BERNEVIG, B. A. Extracting excitations from model state entanglement. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 106, p. 100405, Mar 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.100405>>. Citado na página 122.
- 132 POILBLANC, D. Entanglement spectra of quantum Heisenberg ladders. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 105, p. 077202, Aug 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.077202>>. Citado na página 122.
- 133 FIDKOWSKI, L. Entanglement spectrum of topological insulators and superconductors. Phys. Rev. Lett., American Physical Society,

- v. 104, p. 130502, Apr 2010. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.130502>>. Citado 2 vezes nas páginas 122 e 167.
- 134 THOMALE, R.; AROVAS, D. P.; BERNEVIG, B. A. Nonlocal order in gapless systems: Entanglement spectrum in spin chains. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 105, p. 116805, Sep 2010. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.116805>>. Citado na página 122.
- 135 TURNER, A. M.; ZHANG, Y.; VISHWANATH, A. Entanglement and inversion symmetry in topological insulators. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 82, p. 241102, Dec 2010. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.241102>>. Citado 2 vezes nas páginas 122 e 123.
- 136 HUGHES, T. L.; PROGAN, E.; BERNEVIG, B. A. Inversion-symmetric topological insulators. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 83, p. 245132, Jun 2011. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.245132>>. Citado 3 vezes nas páginas 122, 123 e 167.
- 137 ALEXANDRADINATA, A.; HUGHES, T. L.; BERNEVIG, B. A. Trace index and spectral flow in the entanglement spectrum of topological insulators. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 84, p. 195103, Nov 2011. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.195103>>. Citado 2 vezes nas páginas 122 e 123.
- 138 ZANARDI, P.; PAUNKOVIĆ, N. Ground state overlap and quantum phase transitions. Phys. Rev. E, American Physical Society, v. 74, p. 031123, Sep 2006. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.74.031123>>. Citado na página 127.
- 139 ZANARDI, P.; COZZINI, M.; GIORDA, P. Ground state fidelity and quantum phase transitions in free Fermi systems. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, n. L02002, 2007. Disponível em: <http://iopscience.iop.org/1742-5468/2007/02/L02002/fulltext/>>. Citado na página 127.
- 140 BUONSANTE, P.; VEZZANI, A. Ground-state fidelity and bipartite entanglement in the Bose-Hubbard model. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 98, p. 110601, Mar 2007. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.110601>>. Citado na página 127.

- 141 OELKERS, N.; LINKS, J. Ground-state properties of the attractive one-dimensional Bose-Hubbard model. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 75, p. 115119, Mar 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.115119>>. Citado na página 127.
- 142 CHEN, S. et al. Fidelity and quantum phase transition for the Heisenberg chain with next-nearest-neighbor interaction. Phys. Rev. E, American Physical Society, v. 76, p. 061108, Dec 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.76.061108>>. Citado na página 127.
- 143 ZHOU, H.-Q.; BARJAKTAREVIĆ, J. P. Fidelity and quantum phase transitions. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, v. 41, p. 412001, 2008. Disponível em: <<http://iopscience.iop.org/1751-8121/41/41/412001>>. Citado na página 127.
- 144 YOU, W.-L.; LI, Y.-W.; GU, S.-J. Fidelity, dynamic structure factor, and susceptibility in critical phenomena. Phys. Rev. E, American Physical Society, v. 76, p. 022101, Aug 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.76.022101>>. Citado na página 127.
- 145 ZHOU, H.-Q. Renormalization group flows and quantum phase transitions: fidelity versus entanglement. arXiv:cond-mat.stat-mech, 04 2007. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/0704.2945>>. Citado na página 127.
- 146 PAUNKOVIĆ, N.; VIEIRA, V. R. Macroscopic distinguishability between quantum states defining different phases of matter: Fidelity and the Uhlmann geometric phase. Phys. Rev. E, American Physical Society, v. 77, p. 011129, Jan 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.77.011129>>. Citado na página 127.
- 147 ZANARDI, P. et al. Mixed-state fidelity and quantum criticality at finite temperature. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 75, p. 032109, Mar 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.75.032109>>. Citado na página 127.
- 148 ZANARDI, P.; VENUTI, L. C.; GIORDA, P. Bures metric over thermal state manifolds and quantum criticality. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 76, p. 062318, Dec 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.76.062318>>. Citado na página 127.

- 149 SACRAMENTO, P. D.; PAUNKOVIĆ, N.; VIEIRA, V. R. Fidelity spectrum and phase transitions of quantum systems. Phys. Rev. A, American Physical Society, v. 84, p. 062318, Dec 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.84.062318>>. Citado 3 vezes nas páginas 128, 152 e 154.
- 150 GU, S.-J.; YU, W.-C.; LIN, H.-Q. A spin chain with spiral orderes: perspectives of quantum information and mechanical response. International Journal of Modern Physics B, v. 27, n. 21, p. 1350106, 2013. Disponível em: <<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979213501063>>. Citado na página 128.
- 151 FURUKAWA, S.; MISGUICH, G. Topological entanglement entropy in the quantum dimer model on the triangular lattice. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 75, p. 214407, Jun 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.75.214407>>. Citado na página 130.
- 152 JIANG, H.-C.; WANG, Z.; BALENTS, L. Identifying topological order by entanglement entropy. Nat Phys, Nature Publishing Group, v. 8, n. 12, p. 902–905, 12 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nphys2465>>. Citado 3 vezes nas páginas 130, 164 e 170.
- 153 DEPENBROCK, S.; MCCULLOCH, I. P.; SCHOLLWÖCK, U. Nature of the spin-liquid ground state of the $s = 1/2$ Heisenberg model on the Kagome lattice. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 109, p. 067201, Aug 2012. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.067201>>. Citado na página 130.
- 154 JIANG, H.-C.; YAO, H.; BALENTS, L. Spin liquid ground state of the spin- $\frac{1}{2}$ square J_1 - J_2 Heisenberg model. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 86, p. 024424, Jul 2012. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.024424>>. Citado na página 130.
- 155 KALLIN, A. B. et al. Anomalies in the entanglement properties of the square-lattice Heisenberg model. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 84, p. 165134, Oct 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.165134>>. Citado na página 130.
- 156 NUSSINOV, Z.; ORTIZ, G. A symmetry principle for topological quantum order. Annals of Physics, v. 324, n. 5, p. 977 – 1057, 2009.

- ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491608001711>>. Citado 2 vezes nas páginas 130 e 163.
- 157 BRAY-ALI, N.; DING, L.; HAAS, S. Topological order in paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 80, p. 180504, Nov 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.180504>>. Citado 3 vezes nas páginas 131, 162 e 163.
- 158 YAO, H.; QI, X.-L. Entanglement entropy and entanglement spectrum of the Kitaev model. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 105, p. 080501, Aug 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.080501>>. Citado 5 vezes nas páginas 131, 162, 164, 167 e 170.
- 159 BAUER, E. et al. Heavy-fermion superconductivity and magnetic order in noncentrosymmetric CePt3Si. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 92, p. 027003, Jan 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.027003>>. Citado na página 133.
- 160 TOGANO, K. et al. Superconductivity in the metal rich Li-Pd-B ternary boride. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 93, p. 247004, Dec 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.247004>>. Citado na página 133.
- 161 GOR'KOV, L. P.; RASHBA, E. I. Superconducting 2d system with lifted spin degeneracy: Mixed singlet-triplet state. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 87, p. 037004, Jul 2001. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.037004>>. Citado na página 133.
- 162 LEVITOV, L.; V., N. Y.; ELIASHBERG, G. Magnetoelectric effects in conductors with mirror isomer symmetry. JETP: Sov. Phys., v. 61, n. 1, p. 133, 1985. Citado na página 134.
- 163 EDELSTEIN, V. Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems. Solid State Communications, v. 73, n. 3, p. 233 – 235, 1990. ISSN 0038-1098. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/003810989090963C>>. Citado na página 134.

- 164 EDELSHTEIN, V. M. Characteristics of the Cooper pairing in two-dimensional noncentrosymmetric electron systems. Journal of Experimental and Theoretical Physics, v. 68, n. 6, p. 1244, Jan 1989. Citado na página 134.
- 165 EDELSTEIN, V. M. Magnetoelectric effect in polar superconductors. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 75, p. 2004–2007, Sep 1995. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.2004>>. Citado na página 134.
- 166 YIP, S. K. Two-dimensional superconductivity with strong spin-orbit interaction. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 65, p. 144508, Mar 2002. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.144508>>. Citado na página 134.
- 167 FRIGERI, P. A. et al. Superconductivity without inversion symmetry: MnSi versus CePt3Si. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 92, p. 097001, Mar 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.097001>>. Citado 2 vezes nas páginas 134 e 135.
- 168 SAMOKHIN, K. V. Magnetic properties of superconductors with strong spin-orbit coupling. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 70, p. 104521, Sep 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.104521>>. Citado na página 134.
- 169 KAUR, R. P.; AGTERBERG, D. F.; SIGRIST, M. Helical vortex phase in the noncentrosymmetric CePt3Si. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 94, p. 137002, Apr 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.137002>>. Citado na página 134.
- 170 FUJIMOTO, S. Magnetoelectric effects in heavy-fermion superconductors without inversion symmetry. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 72, p. 024515, Jul 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.024515>>. Citado na página 134.
- 171 FUJIMOTO, S. Fermi liquid theory for heavy fermion superconductors without inversion symmetry: Magnetism and transport coefficients. Journal of the Physical Society of Japan, v. 76, n. 3, p. 034712, 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.76.034712>>. Citado na página 134.

- 172 OLIVEIRA, T. P.; SACRAMENTO, P. D. Entanglement modes and topological phase transitions in superconductors. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 89, p. 094512, Mar 2014. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.094512>>. Citado 2 vezes nas páginas 134 e 141.
- 173 FUKUI, T.; HATSUGAI, Y.; SUZUKI, H. Chern numbers in discretized Brillouin zone: Efficient method of computing (spin) Hall conductances. Journal of the Physical Society of Japan, v. 74, n. 6, p. 1674–1677, 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.74.1674>>. Citado na página 139.
- 174 OLIVEIRA, T. P.; RIBEIRO, P.; SACRAMENTO, P. D. Entanglement entropy and entanglement spectrum of triplet topological superconductors. ArXiv e-prints, dez. 2013. Citado na página 141.
- 175 JOZSA, R. Fidelity for mixed quantum states. Journal of Modern Optics, v. 41, n. 12, p. 2315–2323, 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/09500349414552171>>. Citado na página 154.
- 176 PAPANIKOLAOU, S.; RAMAN, K. S.; FRADKIN, E. Topological phases and topological entropy of two-dimensional systems with finite correlation length. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 76, p. 224421, Dec 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.224421>>. Citado na página 162.
- 177 ZHANG, Y.; GROVER, T.; VISHWANATH, A. Topological entanglement entropy of F_2 spin liquids and lattice Laughlin states. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 84, p. 075128, Aug 2011. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.075128>>. Citado 2 vezes nas páginas 164 e 165.
- 178 EMERY, V. J.; KIVELSON, S. Mapping of the two-channel Kondo problem to a resonant-level model. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 46, p. 10812–10817, Nov 1992. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.10812>>. Citado na página 165.

Apêndices

Probabilidade de escolha de setor

Conforme suposto na seção 3.2, as utilidades não-observáveis $\varepsilon_i \equiv \varepsilon(\sigma_i)$ são identicamente e independentemente distribuídas. Vimos que essas escolhas não-observáveis são bem descritas por uma distribuição de valor extremo, descrita pela equação (3.12), seja ela:

$$f(\varepsilon_i) = e^{-\varepsilon_i} \exp(-e^{-\varepsilon_i}).$$

Calculamos também a probabilidade do agente i escolher o setor σ_i para um dado valor de ε_i , dada pelas equações (3.15) e (3.16):

$$P_{\varepsilon_i}(\sigma_i) = \prod_{\sigma'_i \neq \sigma_i} \exp(-e^{-(\varepsilon_i + \Delta\mathcal{U})}), \quad (\text{A.1})$$

sendo $\Delta\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}^d(\sigma_i) - \mathcal{U}^d(\sigma'_i)$. Devemos demonstrar agora o cálculo da probabilidade do agente i optar pelo setor σ_i a partir da equação (3.17), seja ela:

$$P(\sigma_i) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} P_{\varepsilon_i}(\sigma_i) f(\varepsilon_i) d\varepsilon_i.$$

Iniciamos por explicitar os termos da equação acima:

$$P(\sigma_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\sigma'_i \neq \sigma_i} \exp(-e^{-(\varepsilon_i + \Delta\mathcal{U})}) e^{-\varepsilon_i} \exp(-e^{-\varepsilon_i}) d\varepsilon_i. \quad (\text{A.2})$$

Note que $\exp(-e^{-\varepsilon_i}) = \exp(-e^{-(\varepsilon_i + \Delta U)})$ quando $\sigma_i = \sigma'_i$, sendo assim, podemos incluir esse termo no produtório de modo que:

$$\begin{aligned}
 P(\sigma_i) &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\sigma'_i} \exp(-e^{-(\varepsilon_i + \Delta U)}) e^{-\varepsilon_i} d\varepsilon_i \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\sum_{\sigma'_i} e^{-(\varepsilon_i + \Delta U)}\right) e^{-\varepsilon_i} d\varepsilon_i \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-e^{-\varepsilon_i} \sum_{\sigma'_i} e^{-\Delta U}\right) e^{-\varepsilon_i} d\varepsilon_i. \tag{A.3}
 \end{aligned}$$

Para resolver essa integral, dispomos da seguinte substituição de variáveis: $t = e^{-\varepsilon_i}$, que na forma diferencial fica $dt = -e^{-\varepsilon_i} d\varepsilon_i$. Analisando os limites temos $t \rightarrow 0$ quando $\varepsilon \rightarrow \infty$ e $t \rightarrow \infty$ quando $\varepsilon \rightarrow -\infty$. Sendo assim, a equação anterior assume a forma:

$$\begin{aligned}
 P(\sigma_i) &= \int_0^{\infty} \exp\left(-t \sum_{\sigma'_i} e^{-\Delta U}\right) dt \\
 &= \frac{\exp\left(-t \sum_{\sigma'_i} e^{-\Delta U}\right) \Big|_0^{\infty}}{\left(-\sum_{\sigma'_i} e^{-\Delta U}\right)} \\
 &= \frac{1}{\sum_{\sigma'_i} e^{-\Delta U}}. \tag{A.4}
 \end{aligned}$$

Por fim, utilizando a definição $\Delta U = U^d(\sigma_i) - U^d(\sigma'_i)$, podemos escrever a equação da probabilidade do agente i optar pelo setor σ_i na sua forma final:

$$P(\sigma_i) = \frac{e^{U^d(\sigma_i)}}{\sum_{\sigma'_i} e^{U^d(\sigma'_i)}},$$

como queríamos demonstrar, eq. (3.18).

Mapeamento no modelo de Ising

Quando tratamos nosso modelo apenas com interações sociais como incentivo migratório, podemos entender melhor o comportamento migratório se mapearmos a nossa hamiltoniana, eq. (3.10), com $k = 0$, seja ela:

$$\mathcal{H}(\sigma_i) = \Delta \sum_i \sigma_i^2 - 4J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^2 \sigma_j^2, \quad (\text{B.1})$$

sendo $\Delta \equiv 2zJ$ um termo de campo cristalino e $4J$ um termo de interação biquadrática, em uma hamiltoniana de Ising. Fazemos isto através da substituição $S_i = 2\sigma_i^2 - 1$, ou seja, quando $\sigma_i = +1$ (setor urbano formal) ou $\sigma_i = -1$ (setor urbano informal) então $S_i = +1$, e quando $\sigma_i = 0$ (setor rural) então $S_i = -1$. Temos portanto o modelo de Ising com degenerescência no estado $S_i = +1$, veja eq. (4.2). Desse modo, a equação (B.1) torna-se:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}(S_i) &= \frac{\Delta}{2} \sum_i (S_i + 1) - J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + 1)(S_j + 1) \\ &= \frac{\Delta}{2} \sum_i (S_i + 1) - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + S_j + 1). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Se notarmos que as somas sobre pares primeiros vizinhos em S_i ou em S_j , na verdade, resultam em um mesmo valor e que podemos reescrever este somatório como $\sum_{\langle i,j \rangle} (\dots) = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j (\dots)$, sendo que a soma em j é sobre os z primeiros vizinhos, então a hamiltoniana da equação (B.2) pode ser

reescrita na forma:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}(S_i) &= \frac{\Delta}{2} \sum_i (S_i + 1) - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{Jz}{2} \sum_i (2S_i + 1) \\ &= \left(\frac{\Delta}{2} - Jz \right) \sum_i S_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \left(\frac{\Delta}{2} - \frac{Jz}{2} \right) N, \quad (\text{B.3})\end{aligned}$$

sendo N o número total de agentes (sítios) existentes. Esse resultado é geral, demonstrado por Griffiths [23], e mostra que a hamiltoniana de Blume-Emery-Griffiths [17], com apenas os termos de campo cristalino e interação bilinear, pode ser mapeada em uma hamiltoniana de Ising com campo externo e degenerescência em um dos estados. Lembrando que, em nosso modelo econômico, $\Delta = 2zJ$, notamos que a equação (B.3) tem um termo de campo nulo e fica escrita como:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}(S_i) &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{JzN}{2} \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i S_j + 1).\end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Mostramos portanto que nossa hamiltoniana inicial, eq. (B.1), pode ser mapeada no modelo de Ising, sem campo, com degenerescência no estado +1, eq. (4.1).

Para calcularmos a energia livre, primeiro escrevemos a função de partição:

$$Z = \sum_{\text{estados}} e^{-\beta\tilde{\mathcal{H}}} = \sum_{\{S_i\}} 2^{f(S_i)} e^{-\beta\tilde{\mathcal{H}}(S_i)}, \quad (\text{B.5})$$

com $f(S_i) \equiv \frac{1}{2} \sum_i (S_i + 1)$ e $\beta = \frac{1}{k_B T}$. A soma em $\{S_i\}$ é sobre todos os possíveis conjuntos de estados $\{S_1, S_2, \dots, S_N\}$. O fator $2^{f(S_i)}$ atribui peso 2 aos agentes i que estiverem no estado $S_i = +1$, devido à sua degenerescência, e peso 1 aos estados $S_i = -1$. Se notarmos que o fator $2^{f(S_i)}$ pode ser escrito

como $\exp\left(\frac{\ln 2}{2} \sum_i (S_i + 1)\right)$, então a equação (B.5) fica:

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{\{S_i\}} \exp\left(\frac{\ln 2}{2} \sum_i (S_i + 1) - \beta \tilde{\mathcal{H}}\right) \\
 &= 2^{N/2} \sum_{\{S_i\}} \exp\left(-\beta\left(\tilde{\mathcal{H}} - \frac{\ln 2}{2\beta} \sum_i S_i\right)\right) \\
 &= 2^{\frac{N}{2}} e^{-\beta \frac{JzN}{2}} \sum_{\{S_i\}} \exp\left(-\beta\left(J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \frac{\ln 2}{2\beta} \sum_i S_i\right)\right). \quad (\text{B.6})
 \end{aligned}$$

Sendo assim, em termos gerais, a energia livre pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 F &= -\frac{\ln(Z)}{\beta} \\
 &= -HN + \frac{JzN}{2} - F_I[J, H], \quad (\text{B.7})
 \end{aligned}$$

sendo $H \equiv \frac{\ln 2}{2\beta}$ e o termo $F_I[J, H]$ é a energia livre do modelo de Ising de spin $\frac{1}{2}$, com campo magnético.

Exemplo 2: supercondutor no espaço dos momentos (detalhado)

O sistema proposto na seção 8.2.2 será feito com mais detalhes, ou seja, sem a notação vetorial. Considere a matriz hamiltoniano \mathbf{H}_k , eq. (8.54), e do operador escrito na forma de vetor coluna \mathbf{C}_k , eq. (8.55). Sabendo que as componentes da matriz hamiltoniano são matrizes de tamanho 2x2, estas podem ser definidas de forma generalizada como:

$$H_0(k) \equiv \begin{pmatrix} H_1 & H_2 \\ H_3 & H_4 \end{pmatrix} \quad ; \quad -H_0^T(-k) \equiv \begin{pmatrix} H_{11} & H_{22} \\ H_{33} & H_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

e

$$\Delta(k) \equiv \begin{pmatrix} \Delta_1 & \Delta_2 \\ \Delta_3 & \Delta_4 \end{pmatrix} \quad ; \quad \Delta^\dagger(k) \equiv \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{22} \\ \Delta_{33} & \Delta_{44} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

Quando expandido da sua notação compacta o hamiltoniano $\widehat{H}_k = \mathbf{C}_k^\dagger \mathbf{H}_k \mathbf{C}_k$ assume a forma:

$$\begin{aligned} \widehat{H}_k = & H_1 c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + H_2 c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow} + \Delta_1 c_{k,\uparrow}^\dagger c_{-k,\uparrow}^\dagger + \Delta_2 c_{k,\uparrow}^\dagger c_{-k,\downarrow}^\dagger \\ & H_3 c_{k,\downarrow}^\dagger c_{k,\uparrow} + H_4 c_{k,\downarrow}^\dagger c_{k,\downarrow} + \Delta_3 c_{k,\downarrow}^\dagger c_{-k,\uparrow}^\dagger + \Delta_2 c_{k,\downarrow}^\dagger c_{-k,\downarrow}^\dagger \\ & \Delta_{11} c_{-k,\uparrow} c_{k,\uparrow} + \Delta_{22} c_{-k,\uparrow} c_{k,\downarrow} + H_{11} c_{-k,\uparrow} c_{-k,\uparrow}^\dagger + H_{22} c_{-k,\uparrow} c_{-k,\downarrow}^\dagger \\ & \Delta_{33} c_{-k,\downarrow} c_{k,\uparrow} + \Delta_{44} c_{-k,\downarrow} c_{k,\downarrow} + H_{33} c_{-k,\downarrow} c_{-k,\uparrow}^\dagger + H_{44} c_{-k,\downarrow} c_{-k,\downarrow}^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

As equações de Bogoliubov-de Gennes definem novos operadores γ_n tais que diagonalizam o hamiltoniano,

$$\widehat{H} = E_0 + \sum_n E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n. \quad (\text{C.4})$$

Essas equações relacionam os novos operadores com os antigos (veja eq. (8.58)) e também podem ser expandidas da sua forma compacta, mas ainda escrita de forma geral:

$$c_{k,\sigma} \equiv \sum_{n=1}^4 [u_n(k, \sigma) \gamma_n + v_n^*(k, \sigma) \gamma_n^\dagger], \quad (\text{C.5})$$

sendo que todos os operadores obedecem as relações de anti-comutação. Com a finalidade de encontrar os coeficientes das as equações de Bogoliubov, calcula-se o comutador do operador aniquilação com o hamiltoniano, ainda não diagonalizado,

$$[c_{k,\uparrow}, \widehat{H}] = \sum_{k'} [c_{k,\uparrow}, \widehat{H}_{k'}] \quad (\text{C.6})$$

$$= H_1 c_{k,\uparrow} + H_2 c_{k,\downarrow} + \Delta_1 c_{-k,\uparrow}^\dagger + \Delta_2 c_{-k,\downarrow}^\dagger,$$

$$[c_{k,\downarrow}, \widehat{H}] = \sum_{k'} [c_{k,\downarrow}, \widehat{H}_{k'}] \quad (\text{C.7})$$

$$= H_3 c_{k,\uparrow} + H_4 c_{k,\downarrow} + \Delta_3 c_{-k,\uparrow}^\dagger + \Delta_4 c_{-k,\downarrow}^\dagger,$$

que em termos dos novos operadores (veja equações (C.5)) obtém-se as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} [c_{k,\uparrow}, \widehat{H}] &= \sum_n \left(H_1 u_n(k, \uparrow) + H_2 u_n(k, \downarrow) \right. \\ &\quad \left. + \Delta_1 v_n(-k, \uparrow) + \Delta_2 v_n(-k, \downarrow) \right) \gamma_{n,k} \\ &+ \sum_n \left(H_1 v_n^*(k, \uparrow) + H_2 v_n^*(k, \downarrow) \right. \\ &\quad \left. + \Delta_1 u_n^*(-k, \uparrow) + \Delta_2 u_n^*(-k, \downarrow) \right) \gamma_{n,-k}^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

$$\begin{aligned}
\left[c_{k,\downarrow}, \widehat{H} \right] &= \sum_n \left(H_3 u_n(k, \uparrow) + H_4 u_n(k, \downarrow) \right. \\
&\quad \left. + \Delta_3 v_n(-k, \uparrow) + \Delta_4 v_n(-k, \downarrow) \right) \gamma_{n,k} \\
&+ \sum_n \left(H_3 v_n^*(k, \uparrow) + H_4 v_n^*(k, \downarrow) \right. \\
&\quad \left. + \Delta_3 u_n^*(-k, \uparrow) + \Delta_4 u_n^*(-k, \downarrow) \right) \gamma_{n,-k}^\dagger.
\end{aligned} \tag{C.9}$$

Retomando a equação (C.4) e lembrando das relações de anti-comutação entre os operadores (veja seção 8.1.3), fica trivial calcular o comutador dos novos operadores com o hamiltoniano:

$$\left[\gamma_n, \widehat{H} \right] = \sum_{n'} E_{n'} \left[\gamma_n, \gamma_{n'}^\dagger \gamma_{n'} \right] = E_n \gamma_n, \tag{C.10}$$

$$\left[\gamma_n^\dagger, \widehat{H} \right] = \sum_{n'} E_{n'} \left[\gamma_n^\dagger, \gamma_{n'}^\dagger \gamma_{n'} \right] = -E_n \gamma_n^\dagger. \tag{C.11}$$

Com isso, facilmente calcula-se o comutador do operador original (veja equações (C.5)) com esse novo hamiltoniano diagonalizado:

$$\begin{aligned}
\left[c_{k,\uparrow}, \widehat{H} \right] &= \sum_n u_n(k, \uparrow) \left[\gamma_n, \widehat{H} \right] + v_n^*(k, \uparrow) \left[\gamma_n^\dagger, \widehat{H} \right] \\
&= \sum_n u_n(k, \uparrow) E_n \gamma_n - v_n^*(k, \uparrow) E_n \gamma_n^\dagger,
\end{aligned} \tag{C.12}$$

$$\begin{aligned}
\left[c_{k,\downarrow}, \widehat{H} \right] &= \sum_n u_n(k, \downarrow) \left[\gamma_n, \widehat{H} \right] + v_n^*(k, \downarrow) \left[\gamma_n^\dagger, \widehat{H} \right] \\
&= \sum_n u_n(k, \downarrow) E_n \gamma_n - v_n^*(k, \downarrow) E_n \gamma_n^\dagger.
\end{aligned} \tag{C.13}$$

Os coeficientes das equações de Bogoliubov-de Gennes são obtidos comparando termo a termo os coeficientes dos operadores γ_n a partir das equações (C.8) e (C.12) e também das equações (C.9) e (C.13). O sistema de equações resultante pode ter sua solução facilitada quando escrito na forma

matricial:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} H_1 & H_2 & \Delta_1 & \Delta_2 \\ H_3 & H_4 & \Delta_3 & \Delta_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n(k, \uparrow) & v_n^*(k, \uparrow) \\ u_n(k, \downarrow) & v_n^*(k, \downarrow) \\ v_n(-k, \uparrow) & u_n^*(-k, \uparrow) \\ v_n(-k, \downarrow) & u_n^*(-k, \downarrow) \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} u_n(k, \uparrow) & v_n^*(k, \uparrow) \\ u_n(k, \downarrow) & v_n^*(k, \downarrow) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_n & 0 \\ 0 & -E_n \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Analogamente, se repetir os procedimentos feitos a partir das equações (C.6) e (C.7) mas agora para os operadores $c_{-k, \uparrow}^\dagger$ e $c_{-k, \downarrow}^\dagger$, a equação acima fica escrita como:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} H_1 & H_2 & \Delta_1 & \Delta_2 \\ H_3 & H_4 & \Delta_3 & \Delta_4 \\ \Delta_{11} & \Delta_{22} & H_{11} & H_{22} \\ \Delta_{33} & \Delta_{44} & H_{33} & H_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n(k, \uparrow) & v_n^*(k, \uparrow) \\ u_n(k, \downarrow) & v_n^*(k, \downarrow) \\ v_n(-k, \uparrow) & u_n^*(-k, \uparrow) \\ v_n(-k, \downarrow) & u_n^*(-k, \downarrow) \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} u_n(k, \uparrow) & v_n^*(k, \uparrow) \\ u_n(k, \downarrow) & v_n^*(k, \downarrow) \\ v_n(-k, \uparrow) & u_n^*(-k, \uparrow) \\ v_n(-k, \downarrow) & u_n^*(-k, \downarrow) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_n & 0 \\ 0 & -E_n \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Vê-se então que, para cada momento k , diagonalizando a matrix hamiltoniano \mathbf{H}_k obtêm as energias E_n , sendo que os autovetores correspondentes serão na verdade os coeficientes da transformação de Bogoliubov $u_n(k, \sigma)$ e $v_n(-k, \sigma)$, com $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$.

Autovetor correspondente ao maior autovalor da matriz densidade

Neste apêndice, estudamos em detalhe os coeficientes do autovetor de maior contribuição. Consideramos uma sequência de estados em função do potencial químico, ε_F , para diferentes valores da magnetização M_z . Comparamos os resultados para $M_z = 0$ e $M_z = 1$ para $\varepsilon_F = -4, -2, 0, 2, 4$, tipicamente. Ao longo dos conjuntos de valores, o número de Chern muda de fases topológicas com $C = 0$ a fases com número de Chern finito. Como discutido no texto principal, mesmo embora algumas fases não tenham número de Chern, há estados de borda exceto nas fases $C = 0$ com pequena magnetização e $|\varepsilon_F| > 4$, e magnetização elevada em cerca de $\varepsilon_F = 0$, indicado na Fig. 18. Por exemplo, considerando $M_z = 1$ e mudando o potencial químico, o Chern vai ao longo de uma sequência de valores, $C = 1, C = 0, C = -2, C = 0, C = 1$, de fases não triviais a fases triviais, cruzando em sequência linhas que são singulares nos valores dos momentos $\mathbf{k} = (0, 0)$, $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ e $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$.

Na Fig. 40 apresentamos, em uma forma bastante compacta, os valores absolutos dos coeficientes dos 16 estados de base, para o autovetor com maior contribuição, em função do momento, ordenado sequencialmente no plano bidimensional. Comparamos os resultados para $M_z = 0$ e $M_z = 1$ para diferentes potenciais químicos. Diferenças claras podem ser vistas entre as fases \mathbb{Z}_2 e as fases \mathbb{Z} . Para $\varepsilon_F = -4$ e $M_z = 1$, o sistema está em uma fase com $C = 1$, mas para $M_z = 0$ o sistema está na fronteira entre uma fase completamente trivial com $C = 0$, sem estados de borda, e uma fase \mathbb{Z}_2 também com $C = 0$ mas com estados de borda. O estado dominante é o estado $|0000\rangle$ na maior parte do espaço dos momentos. Para $M_z = 0$, as

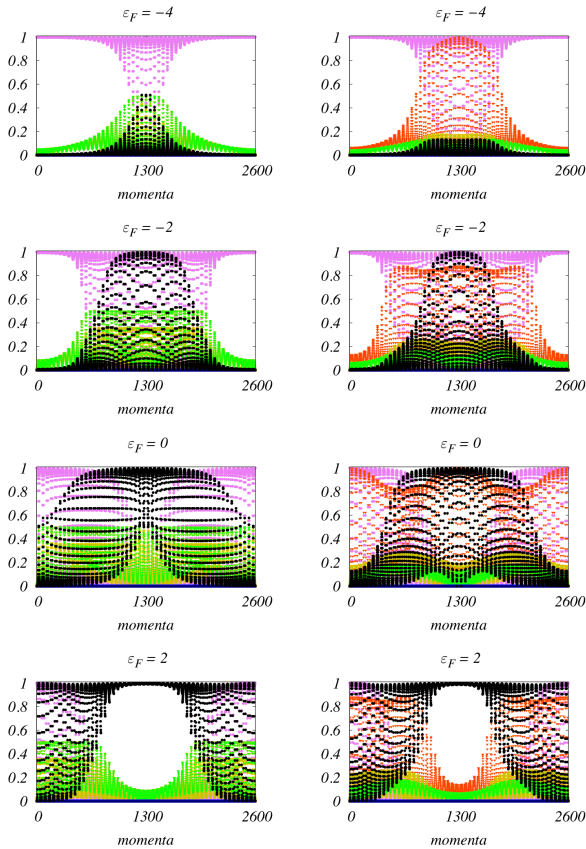


Figura 40 – Valores absolutos dos coeficientes dos estados de base do autovetor com maior contribuição, em função dos valores do momento. Nos painéis à esquerda temos $M_z = 0$ e nos painéis à direita temos $M_z = 1$. As linhas são para valores de $\varepsilon_F = -4, -2, 0, 2$, respectivamente, de cima para baixo. O código da cor dos coeficientes é o mesmo da Fig. 24.

duas orientações de spin no estado tripleto, $|1100\rangle$ e $|0011\rangle$, são degeneradas e são superpostas. O outro estado que dá uma contribuição significativa é o estado totalmente ocupado $|1111\rangle$.

Para valores do potencial químico, $|\varepsilon_F| > 4$, há um claro gap entre o estado vazio dominante e todos os outros, que é particularmente grande quando $M_z = 1$ (esses resultados não estão demonstrados). Na transição para a fase \mathbb{Z}_2 , o gap se encerra em alguns valores de momentos. O valor

absoluto das componentes tripleto satura em $1/2$. Isso deve ser contrastado com o caso quando há uma magnetização finita. Primeiro, neste caso, a degenerescência entre os dois estados tripletos é aumentada. Dentro da fase com número de Chern finito, o componente tripleto $|1100\rangle$ satura a um valor de momento singular apropriado (momento zero no caso de $\varepsilon_F = -4$). Essa saturação é característica das fases com número de Chern finito. Aumentando o potencial químico, por exemplo, para $\varepsilon_F = -2$, a contribuição do estado $|1111\rangle$ aumenta e a contribuição do estado de spin tripleto diminui. Para $M_z = 0$ há uma leve diminuição, mas uma diferença clara é percebida quando $M_z = 1$. Na fase topológica, o estado tripleto é dominante em alguns valores de momento, enquanto nas fases triviais (com $C = 0$) a contribuição de outros estados também é importante. Em $\varepsilon_F = 0$ ($C = -2$) também há uma saturação da componente tripleto, mas em valores de momento diferentes. Também é claro que, à medida que o potencial químico aumenta, a contribuição do estado totalmente ocupado aumenta, até que se torna dominante sobre a zona de Brillouin.

Para entender melhor os pesos relativos dos estados de base, mostramos nas Figs. 41 e 42 a dependência com o momento da soma dos quadrados absolutos dos i) estados vazios e duplamente ocupados, ii) estados de emparelhamento singleto e iii) estados de emparelhamento tripleto. Como mencionado anteriormente, todos esses são os estados que dão contribuições significativas. Isso permite comparar melhor os casos $M_z = 0$ e $M_z = 1$, porque as orientações de spin tornam-se degeneradas. (Também salientamos que os resultados anteriores foram apresentados para o valor absoluto dos coeficientes, enquanto aqui consideramos os valores absolutos quadrados). Na Fig. 41, consideramos $M_z = 0$ e na Fig. 42 consideramos $M_z = 1$. As várias linhas correspondem a diferentes potenciais químicos. Na coluna da esquerda, mostramos a soma dos (quadrado dos) estados vazios e duplamente ocupados, no painel médio o emparelhamento singleto e na coluna direita os estados de emparelhamento tripleto.

Os resultados mostrados nessas figuras resumem os vários aspectos encontrados previamente e clarificam novos aspectos: a) Os estados vazios e duplamente ocupados geralmente dominam sobre a zona de Brillouin, para todos os valores de parâmetros, exceto próximo à superfície de Fermi. b) Pró-

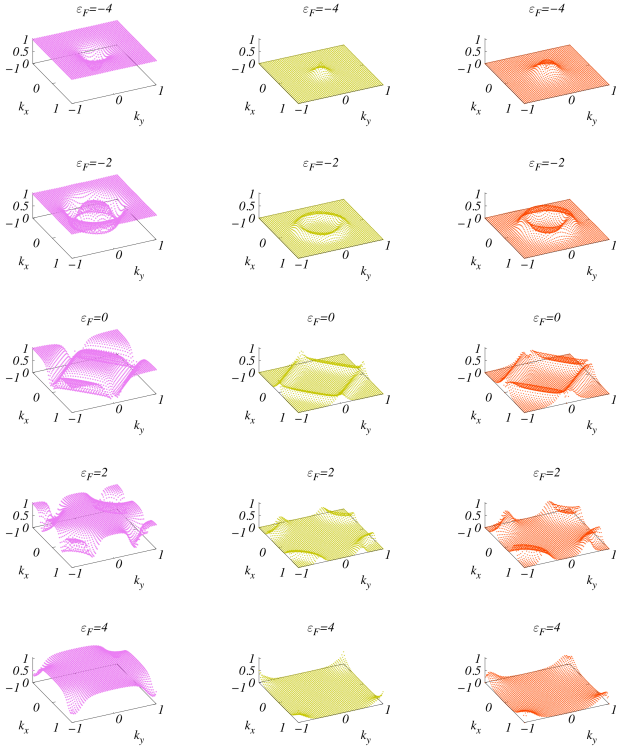


Figura 41 – Soma dos valores absolutos dos quadrados dos coeficientes para o estado vazio e para o estado duplamente ocupado (painéis esquerdo) e para os estados de spin singlete (painéis médio) e estados tripleto (painéis direito), para $M_z = 0$ e para $\varepsilon_F = -4, -2, 0, 2, 4$ de cima para baixo, em função do momento.

ximo da superfície de Fermi, as principais contribuições vêm dos estados de emparelhamento singlete e tripleto. c) Desde que escolhemos a amplitude do parâmetro gap da onda- s menor que a amplitude do tripleto, o coeficiente de emparelhamento singlete é menor que o tripleto. Para $M_z = 0$, as amplitudes dos estados singlete e tripleto são similares. Para $M_z = 1$, a contribuição dos estados singlete é consideravelmente menor que a do tripleto. d) No caso $M_z = 0$ a amplitude máxima dos estados tripleto e singlete são bastante uniforme ao longo da superfície de Fermi, com pequenos picos próximos do momento singular. e) No caso da magnetização finita, o coeficiente

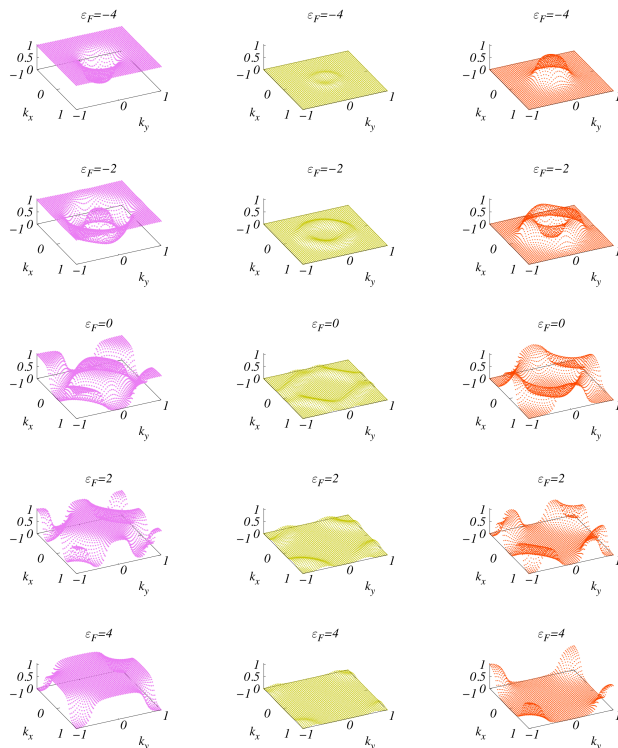


Figura 42 – Soma dos valores absolutos dos quadrados dos coeficientes para o estado vazio e para o estado duplamente ocupado (painéis esquerdo) e para os estados de spin singletos (painéis médio) e estados tripleto (painéis direito), para $M_z = 1$ e para $\varepsilon_F = -4, -2, 0, 2, 4$ de cima para baixo, em função do momento.

tripleto satura próximo aos pontos singulares. Portanto, a dependência no momento ao longo da superfície de Fermi é maior. f) Em relação a medidas de emaranhamento, o significado dos momentos singulares é bastante claro em várias fases topológicas.

Autovetor da matriz densidade reduzida no espaço dos momentos

A matriz densidade reduzida do subespaço k , ρ' , é definida em uma base de números de ocupação $|n_{k,\uparrow}, n_{k,\downarrow}\rangle$. Os estados são portanto do tipo $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$. A diagonalização dessa matriz 4×4 gera autovalores e autovetores

expressos nessa base.

Nos primeiros dois painéis da Fig. 43 apresentamos resultados para o autovetor do maior autovalor para o ponto, no espaço dos parâmetros, $M_z = 2$ e $\varepsilon_F = 0$ ($C = -2$). Mostramos a soma dos coeficientes absolutos ao longo dos estados $|00\rangle$ e $|11\rangle$, no painel superior e ao longo dos estados $|01\rangle$ e $|10\rangle$, no painel inferior. Vemos que as contribuições dos estados com ocupação vazia e duplamente ocupada, bem como os estados com ocupação única, são exclusivos; que implica em uma separação bastante clara na zona de Brillouin entre os dois conjuntos de estados. Essa separação bastante clara ocorre ao redor do diagrama de fases.

Entretanto, uma análise detalhada próxima de uma transição entre as várias fases topológicas mostra que, focando-se nos momentos especiais envolvidos em um dada transição, fornece uma assinatura clara do cruzamento. Como um exemplo, consideramos nos últimos três painéis da Fig. 43 os componentes do autovetor ao longo dos estados $|00\rangle$ e $|11\rangle$ do maior autovalor da matriz densidade reduzida para $\varepsilon_F = -3$ e $M_z = 0.9, 1.0, 1.1$, respectivamente. Essa transição está associada com o ponto sem gap no momento $k = (0, 0)$. Como a Fig. 43 mostra, há uma clara assinatura nesse valor de momento à medida que a transição ocorre. No regime quando $C = 0$, há um pico dos componentes do autovetor em $k = (0, 0)$ que anula-se na fase com $C = 1$, um comportamento típico dos momentos singulares nos pontos de transição.

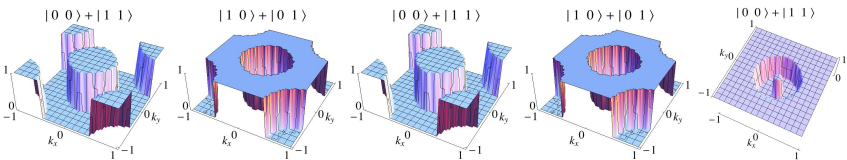


Figura 43 – Primeiros dois painéis: Componentes do autovetor do maior autovalor da matriz densidade reduzida para $M_z = 2$ e $\varepsilon_F = 0$ ($C = -2$). Painéis seguintes: componentes do autovetor ao longo dos estados $|00\rangle$ e $|11\rangle$ do maior autovalor da matriz densidade reduzida para $\varepsilon_F = -3$ e $M_z = 0.9, 1.0, 1.1$, respectivamente.