

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
INSTITUTO DE FÍSICA

DANIELLE PARENTE DA COSTA

***QUENCHES* EM SISTEMAS INTERAGENTES
UNIDIMENSIONAIS: JUNÇÃO MAJORANA-PONTO
QUÂNTICO-CADEIA METÁLICA**

BRASÍLIA

5 DE OUTUBRO DE 2024

Danielle Parente da Costa

***Quenches* em sistemas interagentes unidimensionais:
junção majorana-ponto quântico-cadeia metálica**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade de Brasília para obtenção do título de Mestra em Física.

Orientador: Helena de Souza Bragança Rocha

Universidade de Brasília – UnB

Instituto de Física

Brasília

5 de outubro de 2024

Parente da Costa, Danielle

Quenches em sistemas interagentes unidimensionais: junção majorana-ponto quântico-cadeia metálica/ Danielle Parente da Costa; Orientador:Helena de Souza Bragança Rocha. – Brasília, 5 de outubro de 2024.

63 p.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade de Brasília – UnB
Instituto de Física, 5 de outubro de 2024.

1. sistemas fortemente correlacionados. 2. quench quântico. 3. majorana. 4. ponto quântico. 5. modelo de Hubbard. I. de Souza Bragança Rocha, Helena, orient. II. Título

CDU 02:141:005.7

Danielle Parente da Costa

***Quenches* em sistemas interagentes unidimensionais:
junção majorana-ponto quântico-cadeia metálica**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade de Brasília para obtenção do título de Mestra em Física.

Trabalho aprovado. Brasília, 5 de outubro de 2024:

Helena de Souza Bragança Rocha
Orientador

Alexandre Cavalheiro Dias
Convidado 1

Krissia de Zawadzki
Convidado 2

Brasília
5 de outubro de 2024

Agradecimentos

Agradeço à Helena por prontamente aceitar me orientar mesmo que eu já estivesse na metade da duração do meu mestrado e o tema de pesquisa fosse algo novo para mim. Eu sou muito grata pela sua disponibilidade, suporte, compreensão e ajuda durante todo o trabalho. Agradeço por me apresentar a uma área da física que, até então, eu conhecia pouco, que despertou meu interesse e me fez pensar “É aqui que eu quero seguir”.

Agradeço também à Carol (do Departamento de Física da Universidade Federal de Minas Gerais), ao Moallison (do *Department of Physics, University of Maryland*) e ao Rodrigo (do *International Institute of Physics* e Departamento de Física Teórica e Experimental do Universidade Federal do Rio Grande do Norte) pela sugestão do trabalho aqui desenvolvido e por todas as discussões.

Resumo

Atualmente, sistemas topológicos têm chamado muita atenção no campo da física do estado sólido e um dos sistemas mais estudados e interessantes é aquele em que modos zero de Majorana (MZM, Majorana zero modes) emergem nas bordas de supercondutores topológicos unidimensionais (TSC, topological superconductor). Tais sistemas possuem propriedades únicas e aplicações promissoras em computação quântica. MZM são quasipartículas de energia zero, sem carga ou spin, o que torna sua detecção uma tarefa desafiadora: é difícil acoplar a quasipartícula de Majorana a uma perturbação externa. Experimentos recentes revelaram sua presença em sistemas de estado sólido, incentivando ainda mais este estudo. Uma maneira de detectar o MZM é pelo acoplamento de TSC a pontos quânticos (QD, quantum dots), em especial, é possível identificar a presença de um modo zero de Majorana acoplado a um sistema híbrido QD-cadeia e realizando medições, uma vez que este acoplamento pode modificar as propriedades do sistema. Neste trabalho, estudamos um *quench* quântico no qual um QD é acoplado abruptamente a um fio TSC unidimensional de um lado, que hospeda modos zero de Majorana nas bordas, e a uma cadeia metálica interagente do outro lado. Modelamos este último pelo Hamiltoniano de Hubbard longe do semi-preenchimento, cujo setor de baixa energia é descrito pelo modelo líquido de Luttinger (LL). Para efeito de comparação, fazemos o mesmo *quench* quântico substituindo o TSC por outra cadeia metálica interagente. Usando a técnica de grupo de renormalização de matriz de densidade dependente do tempo (t-DMRG, density matrix renormalization group), analisamos a propagação de spin e carga na cadeia após o *quench* e a evolução temporal de observáveis locais no sítio do QD. Os resultados são comparados com expressões analíticas obtidas através de uma abordagem de teoria de campos. Os resultados analíticos indicam que a magnetização local no ponto decai com uma lei de potência que depende da interação na cadeia para ambos os sistemas TSC-QD-LL e LL-QD-LL, mas com expoentes com comportamento distinto: aumenta no tempo no primeiro e diminui no segundo. Além disso, observamos que os efeitos do TSC são maiores na propagação de carga ao longo da cadeia do que no setor de spin. Nossos resultados numéricos preliminares estão de acordo com os analíticos. Observamos a presença de oscilações na magnetização local do ponto quântico para o sistema TSC-QD-LL, as quais podem ser reduzidas aumentando a interação no sítio do QD e diminuindo o parâmetro de *hopping* entre o TSC e o QD.

Palavras-chaves: sistemas fortemente interagentes, quench quântico, majorana, ponto quântico, modelo de Hubbard.

Abstract

Topological systems have drawn much attention in solid-state physics recently, one of the most studied and interesting system is the one where Majorana zero modes (MZM) emerge at the edges of one-dimensional topological superconductors (TSC). Such systems have unique properties and promising applications in quantum computing. MZM are zero energy quasiparticles, featuring no charge or spin, which makes its detection a challenging task: it is difficult to couple the Majorana quasiparticle to an external perturbation. Recent experiments revealed its presence in solid-state systems, encouraging this study even more. One way to detect the MZM is by coupling TSC to quantum dots (QD). Particularly, it is possible to identify the presence of a Majorana zero mode by coupling it to a hybrid QD-wire system and realizing measurements, since this coupling can modify the properties of the system. In this work, we study a quantum quench in which a QD is suddenly coupled to a one-dimensional TSC wire on one side, which hosts Majorana zero modes at the edges, and to an interacting metallic chain on the other side. We model the latter by the Hubbard model away from half-filling, whose low-energy sector is described by the Luttinger liquid (LL) model. For comparison, we do the same quantum quench replacing the TSC with another interacting metallic chain. Using the time-dependent density matrix renormalization group (t-DMRG) technique, we analyze the propagation of spin and charge in the chain after the quench and the time evolution of local observables at the QD site. The results are compared with analytical expressions obtained through a field theory approach. The analytical results indicate that the local magnetization in the dot decays with a power law that depends on the interaction at the chain for both TSC-QD-LL and LL-QD-LL systems, but with exponents with distinct behavior: it increases in time in the former and decreases in the latter. Furthermore, we observe that the effects of the MZM are larger on the charge propagation throughout the chain than the spin sector. Our preliminary numerical results are in good agreement with the analytical ones. We have also observed oscillations in the local magnetization at the dot in the system that includes the MZM. This amplitude can be reduced by increasing the local interaction at the dot and decreasing the MZM-QD coupling.

Key-words: Strongly correlated systems. quantum quench. majorana. quantum dot. Hubbard model.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação esquemática de um exemplo de <i>quench</i> quântico.	23
Figura 2 – Mapa de cores para o limite Lieb-Robinson	26
Figura 3 – Exemplos de cones de luz em mapas de cores espaço-temporal.	26
Figura 4 – Representação esquemática do modelo de Hubbard em uma cadeia. . .	30
Figura 5 – Dispersões de energia do modelo Kitaev 1D para férmions sem spin. . .	33
Figura 6 – Cadeia de férmions de Kitaev para $\Delta = t$	34
Figura 7 – Cadeia de férmions de Kitaev para $\Delta = t$ no limite de $\mu = 0$ e $t > 0$. .	35
Figura 8 – Esquematização do sistema híbrido TSC-QD-LL.	36
Figura 9 – Esquematização do DMRG-infinito.	41
Figura 10 – Esquematização do DMRG-finito.	42
Figura 11 – Esquematização do sistema híbrido LL-QD-LL.	46
Figura 12 – Magnetização local em função do sítio e do tempo após o <i>quench</i> . . .	48
Figura 13 – Variação da carga local em função do sítio e do tempo após o <i>quench</i> . .	49
Figura 14 – Comparação da variação de carga local após o <i>quench</i>	50
Figura 15 – Magnetização no ponto quântico após o <i>quench</i> para diferentes U	50
Figura 16 – Magnetização no ponto quântico após o <i>quench</i> para diferentes U_d . . .	51
Figura 17 – Expressões analíticas para a magnetização no ponto quântico em função do tempo para $\tau \gg 0$	52
Figura 18 – Comparação entre os sistemas da magnetização no ponto quântico após o <i>quench</i> para diferentes U	53
Figura 19 – Ajustes analíticos nos dados numéricos da magnetização no ponto quântico após o <i>quench</i>	53
Figura 20 – Ocupação no ponto quântico após o <i>quench</i> para diferentes U	54
Figura 21 – Ocupação no ponto quântico após o <i>quench</i> para diferentes U_d	54
Figura 22 – Comparação entre os sistemas da ocupação no ponto quântico após o <i>quench</i> para diferentes U	55
Figura 23 – Resultado exato da magnetização no ponto quântico após o <i>quench</i> para o sistema Majorana-QD.	57
Figura 24 – Comparação entre o resultado exato e o numérico da ocupação no ponto quântico após o <i>quench</i>	57

Lista de abreviaturas e siglas

DMRG	Grupo de Renormalização da Matriz Densidade
t-DMRG	Grupo de Renormalização da Matriz Densidade dependente do tempo
TSC	Supercondutor topológico
MZM	Modos zero de Majorana
QD	Ponto quântico
LL	Líquido de Luttinger
DFT	Teoria do funcional da densidade

Lista de símbolos

H	Hamiltoniano
Ψ	Função de onda
E	Energia
\hbar	Constante de Planck dividida por 2π
m	Massa
$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$	Função de onda de muitas partículas
r_j	Posição da partícula j
U_p	Energia potencial
V_{int}	Energia de interação
$\hat{\Psi}^\dagger/\hat{\Psi}$	Operador de campo de criação/aniquilação
$ r\rangle$	Vetor de estado quântico
\hat{n}	Operador número
$\hat{\rho}$	Operador densidade
τ	Tempo
i	Sítio
A	Operador de observável
p	Momento linear
v	Velocidade linear
t	Amplitude de <i>hopping</i>
σ	Spin eletrônico
c^\dagger/c	Operador de criação/aniquilação
U	Energia de interação
μ	Potencial químico

ϵ_d	Energia local do ponto quântico
U_d	Energia de interação local no ponto quântico
ξ_k	Função de dispersão
Δ_k	Função de pares supercondutores
γ	Operador de Majorana
V, t', t_1, t_2	Parâmetros de hibridização
$m_i(\tau)$	Magnetização local em função do tempo
S_i	Operador de spin
$\rho_i(\tau)$	Ocupação local em função do tempo
ω	Frequência de oscilação
T	Período

Sumário

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	Sistemas fortemente interagentes no equilíbrio	19
1.2	Sistemas fortemente interagentes fora do equilíbrio	22
1.3	Esse trabalho	26
2	SISTEMAS	29
2.1	Cadeias interagentes	29
2.2	Impureza Magnética e o efeito Kondo	30
2.3	Férmions de Majorana e supercondutores topológicos	31
2.3.1	Modelo de Kitaev	32
2.3.2	Cadeia de majoranas: caso $\Delta = t$	33
2.3.3	Cadeia de majoranas: caso geral	35
2.4	Junção TSC-QD-LL	36
2.4.1	Na literatura	37
3	METODOLOGIA: GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DA MATRIZ DENSIDADE	39
3.1	DMRG estático	39
3.1.1	Parte infinita	39
3.1.2	Parte finita (sweeps)	40
3.2	Precisão da truncagem	41
3.3	Medidas de valores esperados	43
3.4	DMRG dependente do tempo	43
4	RESULTADOS: DINÂMICA DE NÃO-EQUILÍBRIO EM SISTEMAS INTERAGENTES 1D	45
4.1	Modelo	45
4.2	<i>Quench</i> e método	46
4.3	Resultados	47
4.3.1	Efeitos no <i>bulk</i>	47
4.3.2	Magnetização no ponto quântico	49
4.3.2.1	Comparação com resultados analíticos	50
4.3.3	Ocupação no ponto quântico	53
4.3.3.1	Resultado exato: Majorana-QD	55
	Conclusão	59

REFERÊNCIAS **61**

1 Introdução

A presente dissertação de mestrado se enquadra na grande área da física de matéria condensada, mais especificamente na área de sistemas fortemente interagentes. Estudamos a resposta de sistemas fechados de muitos corpos a uma perturbação, conhecida como “*quench*” quântico. Nesta introdução, apresentaremos importantes conceitos da área e veremos quais são as questões de interesse envolvendo sistemas fortemente interagentes dentro e fora do equilíbrio.

1.1 Sistemas fortemente interagentes no equilíbrio

Na física da matéria condensada, os sistemas considerados contêm um número muito grande de átomos (da ordem de 10^{23}). A princípio, um tratamento microscópico poderia ser feito pela equação de Schrödinger independente do tempo (Equação 1.1¹) e a física seria totalmente determinada pela função de onda de muitas partículas, mas é necessário fazer aproximações para resolver a equação, mesmo em sistemas com poucas partículas, pois o tamanho do sistema aumenta rapidamente devido aos muitos graus de liberdade. Em muitos casos é possível fazer aproximações considerando as partículas como sendo independentes e, nesses casos, a interação gera apenas uma renormalização de certas propriedades, mas o problema pode ser mapeado em um sistema solúvel de muitas partículas independentes. (COLEMAN, 2015)

$$\begin{aligned}
 H\Psi &= E\Psi \\
 H &= \sum_j \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + U_p(r_j) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i<j} V_{int}(r_i - r_j) \\
 \Psi &= \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

No entanto, existem sistemas que são fortemente correlacionados. Nesses casos, os vários graus de liberdade combinados com a alta correlação entre as partículas contribuem para a emergência de propriedades e fenômenos interessantes que não podem ser explicados a partir da extrapolação de propriedades de poucas partículas. É como se, a nível macroscópico, o sistema não fosse simplesmente descrito pelo comportamento individual das partículas que o compõem, mas novos níveis de organização e complexidade são alcançados e é necessário obter novos princípios e leis que governam os sistemas com muitas partículas. (COLEMAN, 2015)(ANDERSON, 1972) (DAGOTTO; TOKURA, 2008)

¹ H é o Hamiltoniano do sistema, $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ é a função de onda de muitas partículas, E é a energia, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , m é a massa, U_p é a energia potencial da partícula, V_{int} é a energia de interação entre duas partículas e r_j é a posição da partícula j .

Os materiais fortemente correlacionados são, em geral, formados por átomos que possuem as camadas d e f semi-preenchidas, nas quais os elétrons ocupam orbitais localizados e, quando no mesmo átomo, experienciam uma forte repulsão Coulombiana. Um exemplo são os supercondutores de cupratos; neles as interações entre os elétrons localizados na camada $3d$ formam uma fase antiferromagnética conhecida como isolante de Mott (isolante obtido da transição metal-isolante induzida pela correlação entre os elétrons). Quando dopados, os cupratos apresentam supercondutividade de altas temperaturas críticas, essa ainda não completamente entendida.(KOTLIAR; VOLLHARDT, 2004)

Materiais fortemente correlacionados possuem grande potencial para aplicações tecnológicas, então o entendimento de como as propriedades e fenômenos emergem a partir de correlações dos constituintes é um importante desafio na física da matéria condensada e na ciência dos materiais. Todavia, a equação de Schrödinger torna-se bastante complexa e obter uma solução é quase impossível mesmo com o uso de ferramentas computacionais. Ademais, a forte correlação entre os elétrons não é muito bem incorporada pelos métodos padrões como cálculos de teoria de bandas via DFT (Density Functional Theory), por exemplo, que, frequentemente, predizem um estado metálico quando, na realidade, o estado é um isolante de Mott. É necessária a formulação de uma abordagem mais sofisticada.(DAGOTTO; TOKURA, 2008)(KOTLIAR; VOLLHARDT, 2004)

A dimensionalidade do sistema é um fator importante na forma em que as interações ocorrem. Por exemplo, em muitos casos, a descrição qualitativa de propriedades de elétrons de condução a baixas temperaturas, em sistemas de duas ou três dimensões, pode ser feita pela teoria de líquido de Fermi. Apesar do sistema ser interagente, as excitações de baixas energias podem ser representadas por excitações individuais. Agora, reduzindo o grau de liberdade do sistema para uma dimensão, o efeito das interações entre as partículas torna-se mais significativo, então a teoria de líquido de Fermi é substituída pela teoria de líquido de Luttinger (LL), onde as excitações de baixas energias são representadas por excitações coletivas.

Na descrição de sistemas interagentes, pode-se adotar uma abordagem baseada em Hamiltonianos modelos mais simples que retêm os ingredientes fundamentais para a descrição dos fenômenos de interesse. Mesmo sendo Hamiltonianos simplificados, não são fáceis de resolver por técnicas analíticas, apesar disso, houve grande progresso nos estudos desses modelos por métodos computacionais.(DAGOTTO; TOKURA, 2008)(KOTLIAR; VOLLHARDT, 2004)

Em geral, modelos de sistemas de muitos corpos são descritos na notação de segunda quantização, introduzida abaixo. Exemplos importantes serão apresentados no [Capítulo 2](#); para escrevê-los, é importante apresentar os operadores de criação e aniquilação. Na segunda quantização, a função de onda de uma partícula é transformada em operador

de campo, $\Psi \rightarrow \hat{\Psi}$, satisfazendo as seguintes relações

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}_n, \hat{\Psi}_m]_{\mp} &= [\hat{\Psi}_n^{\dagger}, \hat{\Psi}_m^{\dagger}]_{\mp} = 0 \\ [\hat{\Psi}_n, \hat{\Psi}_m^{\dagger}]_{\mp} &= \delta_{nm}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

onde os subscritos - e + indicam uma relação de comutação e anti-comutação, respectivamente, sendo o primeiro para *bósons* e o último para *férmions*.

O operador de campo como operadores de criação e aniquilação na base das posições são, respectivamente, $\hat{\Psi}^{\dagger}(r)$ e $\hat{\Psi}(r)$. Aplicando o operador de criação no estado de vácuo $|0\rangle$, o estado de uma partícula é criado adicionando uma partícula na posição r :

$$\hat{\Psi}^{\dagger}(r)|0\rangle = |r\rangle. \quad (1.3)$$

Agora, aplicando o operador de aniquilação nesse estado, volta-se ao estado de vácuo, destruindo a partícula na posição r :

$$\hat{\Psi}(r)|r\rangle = |0\rangle. \quad (1.4)$$

Observe que $\hat{n}(r) = \hat{\Psi}^{\dagger}(r)\hat{\Psi}(r)$ é o operador que conta o número de partículas no estado de uma partícula na posição r .

Assim, o estado de muitas partículas é construído com a aplicação sucessiva desses operadores

$$|r_1, r_2, \dots, r_N\rangle = \hat{\Psi}^{\dagger}(r_N) \cdots \hat{\Psi}^{\dagger}(r_2) \hat{\Psi}^{\dagger}(r_1)|0\rangle, \quad (1.5)$$

e a função de onda do estado com N partículas será dada por

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N, \tau) = \langle r_1, r_2, \dots, r_N | \Psi(\tau) \rangle = \langle 0 | \hat{\Psi}(r_1) \hat{\Psi}(r_2) \cdots \hat{\Psi}(r_N) | \Psi(\tau) \rangle. \quad (1.6)$$

Além disso, propriedades físicas de uma partícula, como energia cinética, energia potencial e densidade, também são representadas por operadores e o hamiltoniano na segunda quantização assume a seguinte forma

$$H = \int d^3r \hat{\Psi}^{\dagger}(r) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_p(r) \right] \hat{\Psi}(r) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' V_{int}(r - r') : \hat{\rho}(r) \hat{\rho}(r') :, \quad (1.7)$$

onde $\hat{\rho}(r) = \hat{\Psi}^{\dagger}(r)\hat{\Psi}(r)$ é a densidade de uma partícula, m a massa, V a interação entre as partículas e “: ... :” é o símbolo de ordenamento normal: todos os operadores de criação ficam à esquerda de todos os operadores de aniquilação, o que é muito importante para os férmions visto que esses obedecem uma relação de anti-comutação e a ordem em que os operadores são escritos importa. Assim, os sistemas macroscópicos são melhores estudados usando essa notação e podem ser resolvidos através de métodos numéricos, como o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG, *Density Matrix Renormalization Group*).

Considerado o “estado da arte” para a descrição de sistemas interagentes unidimensionais, o DMRG, desenvolvido por Steve White, surge como um algoritmo numérico poderoso para a simulação de sistemas quânticos unidimensionais, permitindo o estudo de propriedades estáticas e dinâmicas de estados de baixas energias. Esse método (que será descrito em mais detalhes no [Capítulo 3](#)) consiste em adicionar graus de liberdade ao sistema de forma iterativa e integrar fora os estados menos importantes para o estado de interesse. Sendo o objetivo final obter o estado fundamental (ou algum outro estado) e a energia de um dado Hamiltoniano. ([SCHOLLWÖCK, 2011](#))

No campo dos estudos experimentais, as simulações quânticas aparecem como uma alternativa vantajosa para o estudo de sistemas quânticos de muitos corpos, pois são capazes de emular hamiltonianos ideais desses sistemas, como os de Bose- e Fermi-Hubbard e cadeias de spin. Esses sistemas artificiais são muito mais isolados do ambiente do que os sistemas do estado sólido, o que permite uma exploração experimental da evolução coerente de sistemas fechados que não se consegue obter em matéria condensada. Nesse cenário, os gases de átomos frios em redes ópticas são uma realização experimental bem-sucedida, a rede óptica emula o potencial periódico dos átomos em estado sólido, enquanto os átomos desempenham o papel de férmions ou bósons na rede. Além da fraca interação com o ambiente, os parâmetros desses sistemas são altamente controlados e possuem ajustes finos. Assim, o estudo da dinâmica de não equilíbrio é estimulado pela possibilidade de realização de *quenches* quânticos nessas simulações. ([SCHÄFER et al., 2020](#))([EISERT; FRIESDORF; GOGOLIN, 2015](#)) ([CHENEAU et al., 2012](#))

1.2 Sistemas fortemente interagentes fora do equilíbrio

Para estudar um sistema de muitos corpos fora do equilíbrio, pode-se realizar um protocolo chamado “*quench* quântico”. Embora a evolução temporal de sistemas quânticos fechados já fosse explorada de diferentes maneiras anteriormente, esse termo foi introduzido inicialmente no trabalho de Pasquale Calabrese e John Cardy, em 2006 ([CALABRESE; CARDY, 2006](#)). Inspirados por experimentos realizados com átomos frios em redes ópticas (como em ([GREINER et al., 2002](#))), eles usaram teoria conforme de campos para investigar a evolução de um sistema fechado após a alteração abrupta de alguns de seus parâmetros. Embora “*quench*” possa ser traduzido como “resfriamento” ou “extinção rápida”, utilizamos o termo para descrever diferentes maneiras de se perturbar um sistema fechado e estudar sua posterior evolução. Mais especificamente, preparamos um certo estado inicial - que pode ser, por exemplo, um estado produto de subpartes do sistema, ou o estado fundamental de um Hamiltoniano inicial H_0 - e em seguida o tiramos do equilíbrio por meio da mudança de algum parâmetro do sistema, $H_0 \rightarrow H_f$, deixando-o evoluir no tempo de forma unitária sem dissipação, ou seja, isolado do ambiente. Em geral, o estado inicial $|\psi_0\rangle$ não é auto-estado de H_f e a dinâmica do sistema ocorre por esse

Hamiltoniano final que é diferente daquele em que o sistema foi preparado inicialmente: $|\psi(\tau)\rangle = e^{-iH_f\tau}|\psi_0\rangle$.

Exemplificando, a [Figura 1](#) traz a esquematização de um *quench* quântico. No tempo $\tau = 0$, o sistema é preparado em um estado inicial em que a impureza magnética (círculo azul) está desacoplada das cadeias de spin (retângulos amarelos) e, no tempo $\tau > 0$, acopla-se a impureza às cadeias por meio dos parâmetros de *hopping* t'_1 e t'_2 . Então, a dinâmica de não equilíbrio que sucede o *quench* é estudada. ([BRAGANÇA et al., 2021](#))

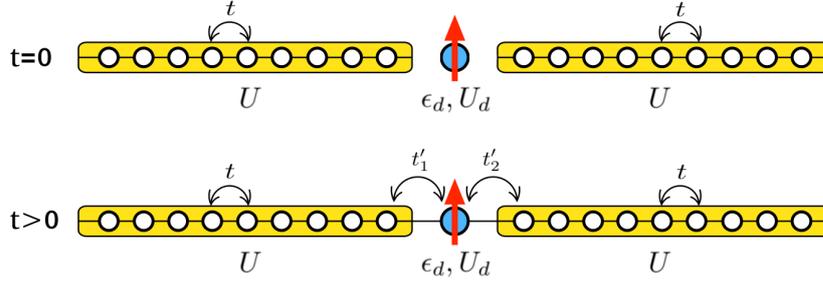


Figura 1 – Representação esquemática do *quench* quântico realizado via acoplamento de uma impureza magnética em cadeias de spins interagentes. Inicialmente, a impureza com energia ϵ_d e interação U_d é acoplada às cadeias Hubbard, que possuem interação de sítio U e parâmetro de *hopping* t , por meio dos parâmetros de *hopping* t'_1 e t'_2 . Figura adaptada de ([BRAGANÇA et al., 2021](#))

O *quench* pode ser abrupto ou lento e, nesse último, o *quench* é realizado de forma lenta por um período de tempo, durante o qual, deixa-se o sistema evoluir por um hamiltoniano que possui dependência temporal, em contraste com o primeiro em que toda a dinâmica ocorre por um mesmo hamiltoniano independente do tempo. *Quenches* também podem ser classificados como globais, onde modifica-se o sistema todo, como com a introdução de um campo magnético em toda a cadeia, ou local, onde a modificação engloba apenas alguns sítios, como a mudança de interação entre sítios em uma pequena parte do sistema. ([EISERT; FRIESDORF; GOGOLIN, 2015](#))

Em geral, a dinâmica de não equilíbrio de sistemas quânticos reais acontece de forma unitária somente por um curto período de tempo, pois o sistema acopla-se ao ambiente e perde coerência, dificultando o estudo do problema. Entretanto, esse tempo de decoerência é bem maior nos sistemas artificiais de átomos frios já mencionados. ([CALABRESE; CARDY, 2006](#)) A simulação computacional também encontra barreiras devido à dimensão alcançada por sistemas desse tipo que rapidamente escalam em tamanho devido aos muitos graus de liberdade que possuem. Assim como no estudo analítico, as soluções são desafiadoras.

Uma das questões mais fundamentais que surgem, após a realização de um *quench*,

é se o sistema atinge um estado de equilíbrio e, se sim, quais os mecanismos envolvidos e qual é a escala de tempo em que isso ocorre.(MITRA, 2018) Sabe-se que, em tempos suficientemente longos, observáveis locais de um sistema quântico fechado podem assumir valores estacionários, isto é, o sistema equilibra. Dado ρ_0 , a matriz densidade inicial do sistema, a matriz densidade do estado de equilíbrio deve ser igual à média temporal de $\rho(\tau)$, para $\tau \rightarrow \infty$:

$$\bar{\rho} = \lim_{\Gamma \rightarrow \infty} \frac{1}{\Gamma} \int_0^\Gamma e^{-iH\tau} \rho_0 e^{iH\tau} d\tau. \quad (1.8)$$

Apesar do sistema seguir uma dinâmica unitária, na maior parte do tempo, ele parece equilibrado no estado de máxima entropia $\bar{\rho}$. E nos casos onde os valores esperados de observáveis locais assumem valores iguais àqueles obtidos no equilíbrio térmico, isto é, por meio do ensemble canônico, diz-se que o sistema atingiu a termalização. Em geral, sistemas de muitos corpos possuem grande tempo de termalização e, sendo sistemas fechados, eles não termalizam exatamente, embora, em certas condições, se comportem na média como um contato térmico.(EISERT; FRIESDORF; GOGOLIN, 2015)

No contexto da matéria condensada, outra questão que surge é de como uma ordem coletiva, presente no Hamiltoniano inicial ou final (ou ambos), responde e evolui sob ação de um *quench* (MITRA, 2018). Em um estudo realizado (PAULA et al., 2017), foi feita a análise da dinâmica de não equilíbrio após duas cadeias de spins preparadas no estado fundamental de um hamiltoniano em fases diferentes serem conectadas. Sendo uma na fase ferromagnética e a outra na fase crítica, observou-se indução de magnetização não nula na vizinhança do acoplamento da cadeia crítica.

O estudo de quantidades físicas como operadores de observáveis locais, funções de correlação e o emaranhamento são usados para tentar entender os mecanismos presentes na dinâmica de não-equilíbrio (CALABRESE; CARDY, 2006). Em sistemas quânticos fechados, a matriz densidade reduzida é bastante útil, obtida da matriz densidade completa traçando fora algum subespaço do espaço completo, mesmo que a matriz densidade completa não mostre termalização sob evolução unitária, a matriz densidade reduzida pode parecer térmica com o sistema traçado fora agindo como um reservatório para a subparte restante. (MITRA, 2018)

Após o *quench*, calcula-se o valor esperado de alguma observável local da seguinte forma:

$$\langle A(i, \tau) \rangle = \langle \Psi(\tau) | A_i | \Psi(\tau) \rangle, \quad (1.9)$$

onde i é o sítio e τ , o tempo transcorrido após o *quench*. Exemplos de observáveis de interesse são a magnetização e a densidade de carga locais. Um trabalho que estudou a dinâmica que se sucede ao acoplamento de uma impureza magnética em cadeias Hubbard (Figura 1), mostrou que a magnetização e a densidade de carga da impureza decai no tempo após o *quench*. A partir da análise dessas quantidades, pôde-se observar a relaxação do sistema em direção ao estado de equilíbrio.(BRAGANÇA et al., 2021)

Equilíbrio e termalização dependem do tipo de *quench* realizado, sendo o emaranhamento no sistema a principal causa dessa dependência. Assim, obtida a matriz densidade reduzida, pode-se obter a entropia de emaranhamento: sendo A um subespaço do sistema completo e B o espaço restante, a matriz densidade reduzida de A é $\rho_A = \text{Tr}_B \rho$, onde $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ é a matriz densidade completa. Logo, a entropia de emaranhamento associada com a matriz densidade reduzida é definida pela entropia de von Neumann $S_A = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A)$. Calabrese e Cardy estudaram a evolução temporal unitária da entropia de emaranhamento após a realização de um *quench* em um sistema unidimensional isolado e, a partir de suas análises, mostraram que a entropia de emaranhamento cresce linearmente com o tempo e satura assintoticamente em um valor constante. (CALABRESE; CARDY, 2005)

No caso de um *quench* abrupto e localizado, pode-se estudar a velocidade com que a informação da perturbação se propaga pelo sistema. Para sistemas de muitos corpos com interações de curto alcance, apesar de serem não relativísticos, essa velocidade possui um limite conhecido como limite Lieb-Robinson (LIEB; ROBINSON, 1972). Assim, após um *quench* local, o sistema exibe um efeito de cone de luz efetivo limitando a velocidade de propagação de correlações. (CHENEAU et al., 2012)

Cheneau e colaboradores estudaram, a partir de um modelo analítico e a realização de um experimento, a propagação de correlações em um sistema descrito pelo modelo de Bose-Hubbard unidimensional após a realização de um *quench* global na interação. Observaram que a evolução temporal da propagação de correlação pelo sistema possui uma velocidade bem definida, como pode ser visto na Figura 2, onde d é a distância entre dois sítios, t é o tempo após o *quench* e a correlação é dada por:

$$C_d(t) = \langle s_i(t) s_{i+d}(t) \rangle - \langle s_i(t) \rangle \langle s_{i+d}(t) \rangle, \quad (1.10)$$

sendo i , o sítio da rede e $s_i(t) = \pm 1$, o operador que mede a paridade de ocupação do sítio (+1 desocupado, -1 ocupado).

Numa representação simples de visão semiclássica, o *quench* cria excitações que se propagam balisticamente pelo sistema, resultando num cone de luz, isto é, excitações de quasipartículas emaranhadas quanticamente, após serem emitidas, apresentam um comportamento semiclássico (CALABRESE; CARDY, 2006). Esse efeito foi mostrado também em um estudo numérico (PAULA et al., 2017), onde cones de luz eram delimitados pelas velocidades das quasipartículas mais rápidas. Sendo $E = E(p)$, a dispersão de energia da quasipartícula, a velocidade clássica com a qual ela viaja pelo sistema é dada por $v(p) = \frac{dE}{dp}$.

Do mesmo trabalho já mencionado (BRAGANÇA et al., 2021), onde o *quench* realizado está esquematizado na Figura 1, foram obtidos diversos cones de luz e dois deles, além da entropia de emaranhamento, podem ser vistos na Figura 3. O cone de luz obtido

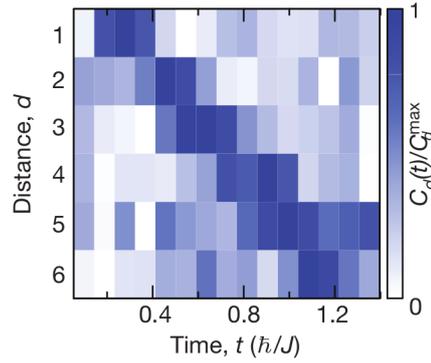


Figura 2 – Mapa de cores mostrando que a propagação de correlação viaja pelo sistema com uma velocidade bem definida: $v = dt$. Figura retirada de (CHENEAU et al., 2012)

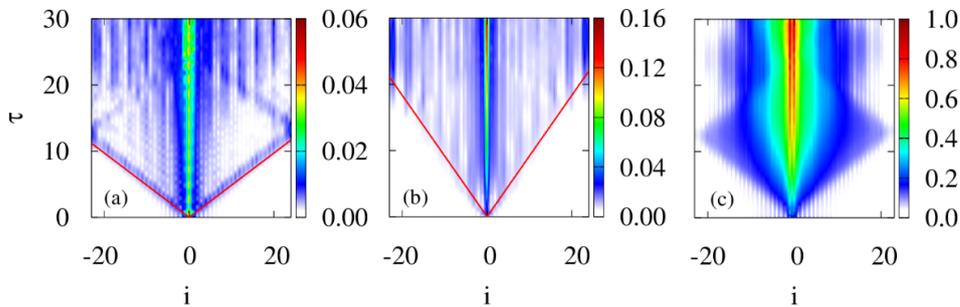


Figura 3 – Dependência espaço-temporal de observáveis locais e entropia de emaranhamento após o *quench*, onde τ é o tempo transcorrido e i é o sítio. Em (a) variação da densidade local, (b) variação da magnetização local e (c) variação da entropia de emaranhamento. As linhas vermelhas delimitam os cones de luz. Figura adaptada de (BRAGANÇA et al., 2021).

para a variação de densidade local, no painel (a), é delimitado pela velocidade de holon máxima e o da variação de magnetização local, painel (b), é delimitado pela velocidade de spinon máxima. E observou-se que a variação de entropia de emaranhamento do painel (c) cresce linearmente com o tempo e é também delimitada pela velocidade de holon máxima. Assim, a propagação de informação pelo sistema é limitada por cones de luz com velocidades que podem ser relacionadas às excitações elementares.

1.3 Esse trabalho

É nesse contexto que se enquadra esse trabalho. Motivados pelo crescente interesse na evolução temporal de sistemas fechados unidimensionais com interação eletrônica, estudamos a dinâmica de não equilíbrio resultante de um *quench* abrupto em um sistema híbrido composto por uma impureza magnética (QD, ponto quântico, do inglês *quantum dot*) acoplada a cadeias metálicas interagentes (Líquidos de Luttinger descritos pelo modelo de Hubbard) e a nanofitas de supercondutores topológicos (TSC, *topological su-*

perconductor) com modos zero de Majorana (MZM, *Majorana zero modes*) nas bordas. Os MZM são quase-partículas de energia zero localizadas nas bordas de supercondutores topológicos, eles têm atraído grande atenção da comunidade científica devido ao seu potencial de aplicação em computação quântica; MZM são excelentes candidatos como *qubits* em computação topológica tolerante a falhas (a topologia torna as quase-partículas resistentes a perturbações locais).

Os MZM não têm grau de liberdade de carga e spin, o que dificulta muito sua detecção. A detecção inequívoca dessas quase-partículas é portanto uma questão de grande interesse teórico e experimental, sendo a realização de um *quench* a partir do acoplamento de um TSC à um sistema híbrido QD-cadeia uma possibilidade de detecção da presença de MZM.

Sendo assim, procuramos colaborar para o entendimento da identificação da assinatura de MZM através dos efeitos que essas quase-partículas geram sobre a evolução temporal da magnetização do ponto quântico após o acoplamento às cadeias, bem como sobre os pulsos de magnetização e carga gerados sobre o sistema após o *quench* de hibridização.

Organização do trabalho:

O sistema de interesse e o *quench* considerado serão apresentados no [Capítulo 2](#). Nele, os férmions de Majorana são descritos em mais detalhes como excitações em sistemas de matéria condensada.

No [Capítulo 3](#), os métodos numéricos utilizados no trabalho são descritos, sendo eles o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade e sua extensão dependente do tempo.

Finalmente, os resultados são apresentados e discutidos no [Capítulo 4](#) e, em seguida, o trabalho é fechado com a conclusão.

2 Sistemas

O sistema estudado nesse trabalho é a junção de um supercondutor topológico, um ponto quântico e uma cadeia metálica. Nesse capítulo, esse sistema é apresentado por partes para, na última sessão, o sistema ser construído por completo.

2.1 Cadeias interagentes

Para o estudo das cadeias metálicas interagentes, utilizamos o modelo de Hubbard considerando o caso fermiônico. Proposto por John Hubbard em 1963, o modelo foi formulado, inicialmente, para estudar materiais que possuem a transição entre metal e isolante de Mott, esta não é descrita por teoria de bandas convencional. (HUBBARD, 1963) O modelo segue sendo relevante até hoje que, apesar de sua simplicidade, apresenta fases e regimes que são observados em materiais quânticos. Em sua versão 2D, por exemplo, o modelo é usado para a investigação de cupratos. (AROVAS et al., 2022) (MACRIDIN et al., 2005)

O Hamiltoniano de Hubbard descreve o movimento de elétrons interagentes em um sólido, sendo um modelo mínimo capaz de capturar alguns fenômenos emergentes das interações. Nesse modelo, os núcleos estão fixos e fazem a vez de sítios que formam uma rede pela qual os elétrons se movem. Considera-se que os elétrons interagem somente quando estão no mesmo sítio, com spins opostos, devido ao princípio de exclusão de Pauli. E a energia cinética é capturada por um termo que permite que o elétron “salte” de um sítio para o outro, o chamado “hopping”, considerando apenas saltos entre primeiros vizinhos.

Usando as aproximações do modelo e a notação de segunda quantização apresentada no [Capítulo 1](#), o Hamiltoniano de Hubbard é dado por

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}), \quad (2.1)$$

sendo $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$ os operadores de campo definidos no capítulo anterior para um sistema fermiônico discreto: o operador $c_{i\sigma}^\dagger$ cria um férmion no sítio i com spin eletrônico σ e $c_{i\sigma}$ aniquila. O operador $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ é o operador número que conta os férmions com spin σ no sítio i . O primeiro termo na [Equação 2.1](#) corresponde ao termo de “hopping” do sítio i para o sítio j (e vice-versa) com amplitude t , onde $\langle i,j \rangle$ indica que a soma é feita apenas entre primeiros vizinhos. O segundo termo corresponde à repulsão Coulombiana no sítio i quando este é duplamente ocupado com energia de interação U e o último controla a ocupação da rede, sendo μ o potencial químico do sistema. É apresentada uma esquematização do modelo na [Figura 4](#) para um sistema unidimensional.

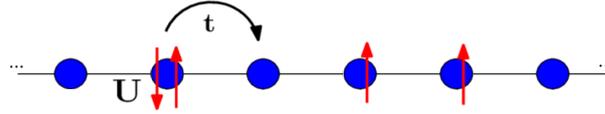


Figura 4 – Representação esquemática do modelo de Hubbard em uma cadeia. U representa a interação Coulombiana local e, t , o *hopping* entre primeiros vizinhos. Fonte: própria.

Apesar da aparência simples do Hamiltoniano, a sua resolução não é tarefa fácil. O estudo por métodos analíticos é feito por aproximação, com exceção do caso de uma dimensão, que possui solução exata via ansatz de Bethe. (ESSLER et al., 2005) O modelo pode ser estudado também usando métodos numéricos. O regime mais estudado do modelo de Hubbard é no semi-preenchimento (número de elétrons igual ao número de sítios), ou seja, um férmion por sítio, o qual apresenta a transição metal-isolante de Mott à medida em que se aumenta U/t . Em semi-preenchimento e uma dimensão, o sistema é isolante para todo U finito. Variando-se o potencial químico, no entanto, tem-se uma fase metálica interagente. (ESSLER et al., 2005)

Importante ressaltar que a dimensão do sistema influencia na forma em que as interações entre os constituintes ocorrem, sendo potencializadas em baixas dimensionalidades. Em uma dimensão, como mencionado no Capítulo 1, a teoria de líquido de Fermi é substituída pela teoria de líquido de Luttinger, onde as excitações de baixas energias são, necessariamente, coletivas.

2.2 Impureza Magnética e o efeito Kondo

Um problema importante de muitos corpos é o de impurezas magnéticas em metais não magnéticos. A partir da interação do spin da impureza com os elétrons de condução do metal, um fenômeno curioso acontece, a resistência apresenta um mínimo a baixas temperaturas, ou seja, a resistência não diminui monotonicamente com a temperatura, como seria o esperado para metais tradicionais. Essa mudança na propriedade do metal é conhecida como Efeito Kondo.

Considerando os sistemas em que há baixas concentrações de átomos magnéticos, um modelo que os descreve bem é o do acoplamento de uma impureza magnética a um banho de elétrons de condução não interagentes (líquido de Fermi), que foi proposto por Anderson. (ANDERSON, 1961) O seu Hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d,\sigma} + U_d n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} (V_{\mathbf{k}} d_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + V_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}), \quad (2.2)$$

onde os operadores d e c correspondem à impureza e aos elétrons de condução, respectivamente, V é o potencial de interação entre a impureza e os elétrons de condução, U_d é a

interação local no sítio da impureza e, ϵ_d e $\epsilon_{\mathbf{k}}$, representam a energia local na impureza e a dispersão dos elétrons de condução, respectivamente.

Nesse modelo, para ocorrer a formação de um momento magnético local, a impureza deve estar ocupada com um único elétron de spin σ e energia ϵ_d . Então, em baixas temperaturas, o que ocorre é que os elétrons de condução interagem com o spin localizado de forma a blindar a magnetização da impureza. (ANDERSON, 1961) No limite atômico do modelo de Anderson, isto é, considerando apenas a impureza magnética, a Equação 2.2 assume a seguinte forma

$$H = \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d,\sigma} + U_d n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow}. \quad (2.3)$$

Utilizando a transformação de Schrieffer-Wolff, pode-se obter o modelo efetivo de Kondo a partir do regime de acoplamento forte do modelo de Anderson. (SCHRIEFFER; WOLFF, 1966) Como exposto na Equação 2.2, o modelo incorpora interações locais na impureza, mas não no banho de elétrons de condução, isto é, faz uso da teoria de líquido de Fermi que é justificada em sistemas com duas ou mais dimensões. Como já discutido, em sistemas de uma dimensão, a teoria de líquido de Fermi é substituída pela teoria do líquido de Luttinger. Assim, como o interesse nesse trabalho é em sistemas unidimensionais, um termo de interação local (Hubbard) entre os elétrons de condução foi incluído considerando o acoplamento entre um momento magnético local e um metal interagente.

2.3 Férmons de Majorana e supercondutores topológicos

A equação de Dirac descreve partículas com spin 1/2 e previu a existência de uma partícula com mesma massa e spin do elétron, mas com carga oposta, sendo ela a sua anti-partícula, o pósitron. Em 1937, a partir de uma modificação da equação de Dirac, Majorana descreveu uma partícula que é sua própria anti-partícula, a qual ficou conhecida algum tempo depois como férmion de Majorana. (MAJORANA, 1937)

A existência de Majoranas como partículas elementares é ainda tema de debate na física de partículas. No entanto, observa-se hoje que eles emergem como excitações coletivas de elétrons em sistemas da matéria condensada, dado que essas excitações satisfaçam duas condições: obedecer a equação de Dirac e ser a sua própria anti-partícula. Em supercondutores topológicos, a primeira condição é respeitada através de uma reescala apropriada de parâmetros e a segunda é alcançada com a simetria partícula-buraco. (SATO; ANDO, 2017)

O modelo de Kitaev é o modelo mais simples para a descrição de TSC em uma dimensão, fornecendo *insights* profundos para a compreensão da supercondutividade topológica e dos modos zero de Majorana (MZM). Ele representa uma cadeia unidimensional de férmions sem spin com *hopping* e formação de pares supercondutores próximos com

simetria de onda p , sua descrição é feita a seguir.

2.3.1 Modelo de Kitaev

Considerando uma cadeia com N sítios ocupados por férmions sem spin que podem pular para o primeiro sítio vizinho com probabilidade t e podem formar um par supercondutor, também com um primeiro vizinho, com acoplamento Δ , o Hamiltoniano desse sistema é dado por

$$H = \sum_{n=1}^N \left[-\mu c_n^\dagger c_n - \frac{1}{2} \left(t c_n^\dagger c_{n+1} - \Delta c_n^\dagger c_{n+1}^\dagger + h.c. \right) \right], \quad (2.4)$$

sendo μ o potencial químico, t a amplitude de *hopping* e n é o índice que percorre os sítios da cadeia. (KITAEV, 2001)

Por conveniência, reescrevendo o Hamiltoniano no espaço de momento usando a Transformada de Fourier, $c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikn} c_n$, tem-se que (LIN; WANG, 2016)

$$H = \sum_{k \in ZB} \left[\xi_k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2} \left(\Delta_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + h.c. \right) \right], \quad (2.5)$$

com ξ_k , a função de dispersão e Δ_k , a função de pares supercondutores dados por

$$\begin{aligned} \xi_k &= -\mu - t \cos k \\ \Delta_k &= -i\Delta \sin k. \end{aligned} \quad (2.6)$$

A partir de uma transformação do Hamiltoniano e sua diagonalização, as energias de excitação são dadas por (LIN; WANG, 2016)

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}. \quad (2.7)$$

Assim, para o *gap* do sistema ser fechado, além de $\xi_k = 0$, Δ_k também tem que ser nula.

A Figura 5, pode ser usada como guia para análise das Equação 2.6 e Equação 2.7, permitindo a identificação de pontos nos quais ξ_k e Δ_k se anulam. A curva azul corresponde à $-t \cos k$, enquanto as linhas pontilhadas em vermelho indicam $\mu = \pm t$. Quando $|\mu| > |t \cos k|$, a função de dispersão é $\xi_k \neq 0$, ou seja, o sistema possui *gap* trivial. Quando $\mu = \pm t$, o espectro de energia E_k se anula (o sistema não tem *gap*) para alguns pontos de k : em $k = \pm\pi$, no caso de $\mu = +t$ e em $k = 0$, no caso $\mu = -t$, sendo estes pontos a transição de banda topológica. Nos limites extremos de $\mu \rightarrow \pm\infty$, o sistema é um isolante trivial. Finalmente, no intervalo $-t < \mu < t$, encontra-se a região topológica, onde o sistema possui *gap* não trivial com $\xi_k = 0$ e $\Delta_k \neq 0$.

O Hamiltoniano de Kitaev (Equação 2.4) pode ser representado em termos de majoranas, ao invés dos férmions tradicionais. A princípio, essa transformação pode ser feita

em qualquer sistema, sendo apenas uma mudança de base. No caso do modelo de Kitaev, essa mudança implica em uma física muito relevante, que em breve será apresentada, que são os modos zero de Majorana nas bordas. Antes de prosseguir, o operador de Majorana é introduzido.

Representação de Majorana

O operador fermiônico pode ser representado como uma superposição de dois operadores de majorana A e B :

$$c_n = \frac{1}{2}(\gamma_{B,n} + i\gamma_{A,n}), \quad (2.8)$$

ambos localizados no mesmo sítio n . O majorana possui a propriedade em que a sua anti-partícula é a própria partícula, $\gamma^\dagger = \gamma$ e obedece à relação de anti-comutação $\{\gamma_i, \gamma_j\} = 2\delta_{ij}$. Sendo essas propriedades suficientes para preservar as relações de anti-comutação do férmion. Os operadores de Majorana, então, ficam

$$\begin{aligned} \gamma_{B,n} &= c_n^\dagger + c_n \\ \gamma_{A,n} &= i(c_n^\dagger - c_n) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dada essa definição, continua-se o estudo do sistema para casos particulares para melhor entendimento da física do sistema de forma mais “intuitiva”. Apenas alguns casos são abordados, mas os resultados relevantes se mantêm para outros regimes de parâmetros.

2.3.2 Cadeia de majoranas: caso $\Delta = t$

Reescrevendo o Hamiltoniano da [Equação 2.4](#) para $\Delta = t$, tem-se

$$H = \sum_{n=1}^N \left[-\mu c_n^\dagger c_n - \frac{1}{2}t(c_n^\dagger + c_n)(c_{n+1} - c_{n+1}^\dagger) \right], \quad (2.10)$$

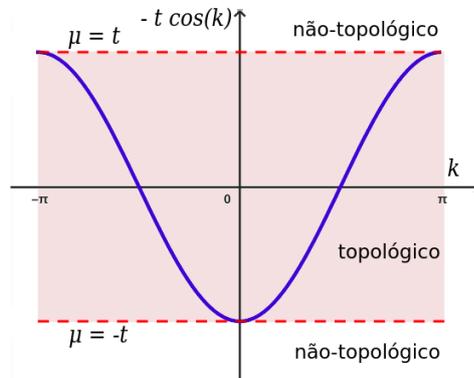


Figura 5 – Dispersão da rede (curva em azul) e do potencial químico (tracejado em vermelho) do modelo de Kitaev 1D para férmions sem spin. O sistema possui *gap* exceto quando $\mu = \pm t$, sendo $|\mu| < t$, o *gap* topológico e $|\mu| > t$, o *gap* trivial. Fonte: própria.

Usando as relações descritas anteriormente, o Hamiltoniano é reescrito em termos do operador de Majorana como

$$H = -\frac{i}{2} \sum_{n=1}^N (-\mu \gamma_{B,n} \gamma_{A,n} + t \gamma_{B,n} \gamma_{A,n+1}). \quad (2.11)$$

Dessa forma, a cadeia de férmions de Kitaev fica representada como uma cadeia de Majoranas. A representação esquemática da cadeia pode ser vista na [Figura 6](#). Os círculos em cinza representam os sítios físicos, cada um possui um par de férmions de majorana representados por círculos azuis. Aqui, μ é o acoplamento entre majoranas dentro do mesmo sítio n , $\gamma_{B,n}$ acopla com $\gamma_{A,n}$, enquanto t é o acoplamento entre majoranas em sítios vizinhos, $\gamma_{B,n}$ acopla com $\gamma_{A,n+1}$.

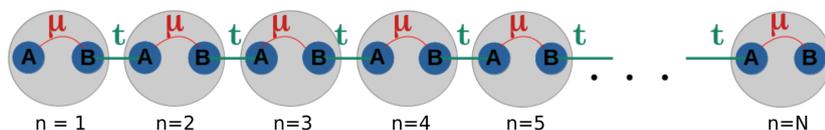


Figura 6 – Cadeia de férmions de Kitaev para $\Delta = t$. Os sítios físicos n (círculos cinzas) possuem um par de férmions de majoranas (círculos azuis) cada: $\gamma_{A,n}$ e $\gamma_{B,n}$. O parâmetro μ acopla majoranas no mesmo sítio n , t acopla majoranas de sítios vizinhos n e $n + 1$. Fonte: própria.

No limite de $\mu/t \rightarrow -\infty$, entra-se arbitrariamente na fase trivial, visto que, para $t = 0$ e μ grande, não há acoplamento entre os diferentes sítios da cadeia física e os majoranas de mesmo sítio acoplam-se entre si. Seu estado fundamental é o vácuo de férmions.

No limite $\mu = 0, t \neq 0$, encontra-se a fase topológica do sistema e, para melhor análise desse caso, o Hamiltoniano nesse limite fica

$$H = -\frac{t}{2} \sum_{n=1}^{N-1} \gamma_{B,n} \gamma_{A,n+1}. \quad (2.12)$$

Ao contrário do limite anterior, nesse caso, a cadeia possui apenas acoplamento entre diferentes sítios físicos e, definindo esses pares de majoranas acoplados como novos férmions da forma

$$f_n = \frac{1}{2} (\gamma_{A,n+1} + i \gamma_{B,n}), \quad (2.13)$$

o Hamiltoniano fica

$$H = t \sum_{n=1}^{N-1} f_n^\dagger f_n. \quad (2.14)$$

Na [Figura 7](#), há uma esquematização desse sistema e nota-se que férmions de majoranas das extremidades representados por círculos vermelhos, $\gamma_{A,1}$ e $\gamma_{B,N}$, não acoplam com outros graus de liberdade da cadeia, sequer estão no Hamiltoniano. Assim, a energia

independe da ocupação ou não desses estados de borda, o que gera uma degenerescência. Esses estados das extremidades correspondem aos modos zero de Majorana e serão tratados agora como γ_1 e γ_2 .

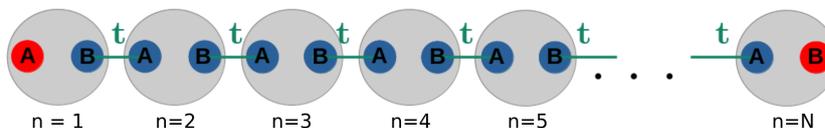


Figura 7 – Cadeia de férmions de Kitaev para $\Delta = t$ no limite de $\mu = 0$ e $t > 0$. Novamente, os sítios físicos n (círculos cinzas) possuem um par de férmions de majoranas (círculos azuis) cada: $\gamma_{A,n}$ e $\gamma_{B,n}$. Não há acoplamento entre majoranas no mesmo sítio n , somente acoplamento entre majoranas de sítios vizinhos n e $n + 1$. O sistema é representado por uma cadeia de férmions de majoranas com um par de férmions de majoranas desacoplados nas extremidades: $\gamma_{A,1}$ e $\gamma_{B,N}$. Fonte: própria.

Definindo um novo operador fermiônico para um férmion composto por esses modos zero da forma

$$d = \frac{1}{2}(\gamma_1 + i\gamma_2), \quad (2.15)$$

o Hamiltoniano pode ser reescrito “incluindo” esse férmion como

$$H = t \sum_{n=1}^{N-1} f_n^\dagger f_n + 0d^\dagger d. \quad (2.16)$$

Assim, o estado fundamental do sistema é duplamente degenerado: além do vácuo de férmions do tipo f , como no caso trivial, pode-se adicionar ou retirar um férmion d com custo zero de energia. Esse férmion do tipo d corresponde a um férmion altamente delocalizado e protegido topologicamente, o que o torna imune a perturbações locais.

2.3.3 Cadeia de majoranas: caso geral

Ainda dentro da fase topológica, mas agora com $t \neq \Delta$ e $\mu \neq 0$, no intervalo $-1 < \mu/t < 1$, os modos zero de Majorana ainda existem no sistema, porém os modos γ_1 e γ_2 não estão exatamente localizados nas extremidades, suas funções de onda decaem rapidamente ao longo da cadeia seguindo uma regra exponencial. Se o sistema for suficientemente longo, o *overlap* das funções de onda é pequeno e o sistema é quase degenerado, porém, em sistemas finitos, há um pequeno *overlap* entre os modos e os estados fundamentais não são exatamente degenerados.

Um ponto crucial para o estudo de modos zero de majorana é a sua detecção, a topologia que protege esses modos, também evita que sejam “vistos”. Assim, há uma lacuna em se tratando de evidências de sua existência. O ponto quântico é um sistema simples que pode ser usado para uma detecção indireta a partir do seu acoplamento a modos zero de Majorana dada sua alta tunabilidade. (CHENG et al., 2014)

2.4 Junção TSC-QD-LL

O sistema de interesse nesse trabalho é construído a partir do acoplamento de uma impureza magnética (que pode ser realizada experimentalmente por um ponto quântico, QD) à um modo zero de Majorana de um supercondutor topológico à esquerda e à uma cadeia metálica interagente (LL) à direita. Como primeira aproximação, os graus de liberdade do “*bulk*” da cadeia Kitaev foram integrados e o QD interage apenas com um modo de majorana, isto é, consideramos uma cadeia grande o suficiente para que não haja acoplamento com o modo da outra extremidade da borda. Na Figura 8, uma esquematização da configuração do sistema é mostrada.

O Hamiltoniano efetivo de baixas energias para a junção TSC-QD-LL é dado por

$$H = H^{LL} + H^{dot} + H^{acop}, \quad (2.17)$$

sendo H^{LL} , o Hamiltoniano da cadeia metálica, H^{dot} , o Hamiltoniano do ponto quântico e o H^{acop} representa o Hamiltoniano do acoplamento entre o ponto quântico e a cadeia e o TSC.

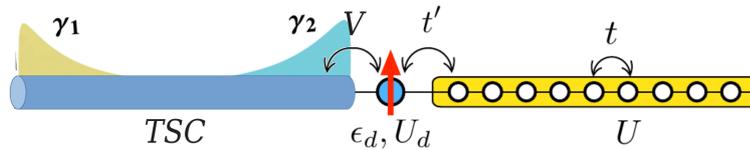


Figura 8 – Esquematização do sistema híbrido TSC-QD-LL. O ponto quântico é acoplado pela esquerda a um modo zero de Majorana pelo parâmetro V e acoplado a uma cadeia metálica interagente por t' pela direita. Fonte: própria.

A cadeia metálica, H^{LL} , é descrita pelo modelo de Hubbard (Equação 2.1). Ao longo de todo o trabalho, o *hopping* nas cadeias de Hubbard foi mantido fixo em $t = 1$, o que define a unidade de energia do sistema.

Em semi-preenchimento, o estado fundamental do modelo de Hubbard unidimensional é um isolante para qualquer valor de U finito, então o preenchimento da cadeia foi alterado por meio do potencial químico afim de obter uma cadeia metálica. Nesse estudo, usamos o preenchimento $1/4$ e, visto que cadeias interagentes unidimensionais não podem ser descritas pela teoria de líquido de Fermi, o sistema obtido corresponde a um líquido de Luttinger.

O ponto quântico da junção foi descrito pelo modelo de Anderson de uma impureza já discutido. Seu Hamiltoniano é dado por

$$H^{dot} = \epsilon_d n_0 + U_d n_{0\uparrow} n_{0\downarrow}, \quad (2.18)$$

sendo $n_0 = n_{0\uparrow} + n_{0\downarrow}$ o operador da ocupação no sítio do ponto quântico e U_d é a interação local no ponto. Ao longo do trabalho usamos $\epsilon_d = -U_d/2$, de forma que o sítio do ponto

quântico é deslocado em relação ao nível de Fermi da cadeia metálica em preenchimento $1/4$, garantindo que, no estado fundamental, o sítio da impureza tenha ocupação simples.

O acoplamento entre o ponto quântico, o supercondutor topológico e o líquido de Luttinger é dado pelo Hamiltoniano

$$H^{acop} = -t' \sum_{\sigma} (c_{1\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + h.c.) + iV \gamma_{\uparrow} (c_{0\uparrow}^{\dagger} + c_{0\uparrow}), \quad (2.19)$$

sendo t' o parâmetro de hibridização entre o QD e a cadeia e V , o acoplamento entre o QD e o modo zero de Majorana de uma das extremidades. O MZM corresponde ao operador $\gamma_{\uparrow} = c_{\uparrow}^{\dagger} + c_{\uparrow}$, o qual é acoplado ao ponto quântico representado pelo operador $c_{0\uparrow}^{\dagger} + c_{0\uparrow}$. O TSC foi considerado como um fio muito longo de forma que o QD acopla-se somente a um MZM.

No [Capítulo 4](#), descreveremos resultados para o equilíbrio e para a dinâmica resultante de um *quench* quântico realizado no sistema apresentado aqui. Os detalhes do *quench* serão expostos no [Capítulo 4, seção 4.2](#).

2.4.1 Na literatura

Atualmente, existem poucas formas de realizar TSC experimentalmente, seja através de materiais naturais ou artificiais. No primeiro tipo, o TSC ocorre de forma espontânea e, no segundo tipo, heteroestruturas de duas dimensões ou fios híbridos, constituídos por diferentes materiais, são necessários. Exemplos de supercondutores topológicos intrínsecos são supercondutores com onda do tipo p e supercondutores com forte acoplamento spin-órbita. Exemplos de realizações artificiais são os híbridos de supercondutor com onda do tipo s ou com isolante topológico, ou com semicondutor de duas dimensões, ou com fio semicondutor. A supercondutividade é induzida no semicondutor por proximidade e pode ser realizada ou pela forte interação spin-órbita intrínseca, ou pelo acoplamento de um isolante magnético, ou pela aplicação de um campo magnético externo. ([LEIJNSE; FLENSBERG, 2012](#)) ([MANDAL et al., 2023](#))

Há um intenso debate sobre a detecção de majorana, uma das propostas estudadas para a criação e manipulação de MZM corresponde à junção de um isolante topológico com supercondutores com onda do tipo s, resultando em estados de um supercondutor sem spin com onda do tipo p que suportam MZM em vórtices. ([FU; KANE, 2008](#)) Uma outra proposta que apresenta MZM corresponde à heteroestrutura de um filme semicondutor entre um supercondutor com onda do tipo s e um isolante magnético que terá o papel de induzir, por proximidade, supercondutividade no semicondutor. ([SAU et al., 2010](#))

A ausência de graus de liberdade de carga e spin em MZM dificulta sua detecção inequívoca. Uma alternativa é a detecção indireta, pelo efeito que essas partículas geram em outros sistemas que podem ser medidos com mais facilidade. Como exemplo, Cheng

et al. estudaram o acoplamento de um QD a um TSC e a uma cadeia não interagente. No regime de baixas energias, eles mostraram que a competição entre os acoplamentos Kondo e Majorana levam o sistema para diferentes estados fundamentais devido a correlações não triviais entre o QD e o MZM. (CHENG *et al.*, 2014) Outro estudo, realizado por Kacper Wrześniewski e Ireneusz Weymann, focou na dinâmica de quench da magnetização do QD no sistema híbrido TSC-QD acoplado a duas cadeias externas. Eles observaram que a dinâmica de magnetização local foi aumentada com o acoplamento com MZM. (WRZEŚNIEWSKI; WEYMANN, 2021)

Conforme descrito na seção anterior, no presente trabalho, consideramos um sistema semelhante, no qual um ponto quântico é acoplado a um modo zero de Majorana e a uma cadeia metálica. Incluímos, no entanto, interação nesta última, a fim de observar eventuais efeitos de muitos corpos no acoplamento com o MZM. No próximo capítulo, descreveremos a metodologia utilizada. Os resultados serão apresentados no [Capítulo 4](#).

3 Metodologia: Grupo de Renormalização da Matriz Densidade

Sistemas com muitos corpos são difíceis de estudar, seja analiticamente ou numericamente. Como discutido no [Capítulo 1](#), o espaço de Hilbert cresce exponencialmente com o número de constituintes do sistema, o que dificulta os cálculos. É nesse contexto que o DMRG ([WHITE, 1992](#)) entra em ação, tornando possível o estudo de cadeias grandes no limite termodinâmico usando a parte infinita do método ou cadeias com tamanho finito usando a parte infinita seguida pela parte finita do DMRG. A evolução temporal do sistema também pode ser realizada usando o DMRG dependente do tempo (t-DMRG). Todas essas partes são descritas a seguir. ([SCHOLLWÖCK, 2011](#)) ([CHIARA et al., 2008](#))

3.1 DMRG estático

O DMRG estático corresponde ao estudo do sistema no equilíbrio e possui duas partes: a parte infinita, na qual o sistema é construído sítio a sítio e a parte finita, onde, por meio da realização de *sweeps*, a convergência do estado fundamental é garantida.

3.1.1 Parte infinita

No algoritmo do DMRG-infinito, a cadeia é crescida de forma iterativa e o espaço de Hilbert é truncado pela exclusão de estados menos “relevantes” até o estado fundamental convergir. Primeiro, uma cadeia é construída com l sítios, que pode ser simbolizada por um bloco: $B(l, m)$, onde $m = d^l$ corresponde à dimensão do espaço de Hilbert do bloco, sendo d a dimensão do espaço de cada sítio. Inserindo um sítio com dimensão d à direita do bloco, forma-se o bloco aumentado $B_A(l + 1, md)$, o qual possui o Hamiltoniano dado por:

$$H_{BA} = H_B + H_S + H_{BS}, \quad (3.1)$$

sendo H_B o Hamiltoniano do bloco, H_S o Hamiltoniano do sítio livre e H_{BS} o Hamiltoniano de interação entre o bloco e o sítio.

Acoplando um bloco aumentado similar à direita do bloco anterior, forma-se um super bloco $B_{sup}(2(l + 1), m^2 d^2)$ e o Hamiltoniano total fica:

$$H_{supB} = H_{BA}^E + H_{BA}^D + H_{SESD}, \quad (3.2)$$

onde os superíndices E e D identificam os blocos aumentados à esquerda e à direita, respectivamente, e o Hamiltoniano H_{SESD} corresponde à interação entre os sítios livres.

Então, diagonaliza-se o Hamiltoniano do super-bloco, que corresponde ao sistema composto por duas cadeias com dois sítios livres no meio, e o estado fundamental $|\Psi_0\rangle$ é obtido:

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{\substack{a,b=1 \\ \alpha,\beta}}^{m,d} \Psi_{a\alpha\beta b} |a\alpha\beta b\rangle, \quad (3.3)$$

com os índices latinos identificando os blocos e, os gregos, os sítios livres.

Agora, para fazer a truncagem do espaço de Hilbert do bloco aumentado da esquerda/direita, usando $|\Psi_0\rangle$, primeiro, calcula-se a matriz de densidade reduzida do bloco aumentado da esquerda/direita $\rho_{E/D}$ traçando fora o bloco aumentado da direita/esquerda:

$$\rho_{E/D} = \text{Tr}_{D/E} |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0| = \Psi_{a\alpha\beta b} \Psi_{a'\alpha'\beta b}^* |a\alpha\rangle\langle a'\alpha'|, \quad (3.4)$$

e, então, diagonaliza-se $\rho_{E/D}$ de forma exata. Sendo m o valor determinado para a dimensão na qual o espaço de Hilbert será truncado, a base reduzida é formada pelos auto-estados dos m primeiros maiores autovalores de $\rho_{E/D}$. A representação nessa nova base pode ser obtida através de uma matriz $O_{m \times md}$, onde as linhas correspondem aos auto-estados selecionados. Nessa etapa, o Hamiltoniano do bloco aumentado da esquerda/direita e os operadores de interesse são transformados:

$$\tilde{H}_{BA;m \times m} = O_{m \times md} H_{BA;md \times md} O_{md \times m}^\dagger. \quad (3.5)$$

Quando o sistema não é simétrico, a matriz de truncagem $O_{m \times md}$ é uma para os operadores do bloco aumentado da esquerda e outra para os operadores da direita.

Após a mudança de base, dois blocos aumentados truncados são obtidos: $B^{E/D}(l+1, m)$. Dessa forma, os blocos aumentados têm $l+1$ sítios, mas dimensão efetiva m , ao invés de d^{l+1} . Esses dois blocos aumentados tornam-se os novos blocos que serão usados no início dos passos descritos, de forma que o sistema é crescido incluindo mais dois sítios livres no centro da cadeia, isto é, o tamanho do sistema aumenta sem que o número de estados que o descreve aumente. O sistema pode ser crescido 2 sítios a cada etapa do DMRG-infinito até um tamanho desejado L . Uma esquematização de toda a parte infinita pode ser vista na [Figura 9](#).

3.1.2 Parte finita (sweeps)

Crescido o sistema até o tamanho desejado, realiza-se o DMRG-finito, etapa que irá melhorar a convergência da energia do estado fundamental. Nesse ponto, o sistema é composto por dois blocos $B(L/2 - 1, m)$ e dois sítios. Mantendo o tamanho do sistema fixo, o bloco da direita é crescido por um sítio e, como no procedimento da parte infinita, encontra-se o estado fundamental deste super-bloco, calcula-se a matriz de densidade reduzida e determina-se a base com os m maiores valores realizando, em seguida,

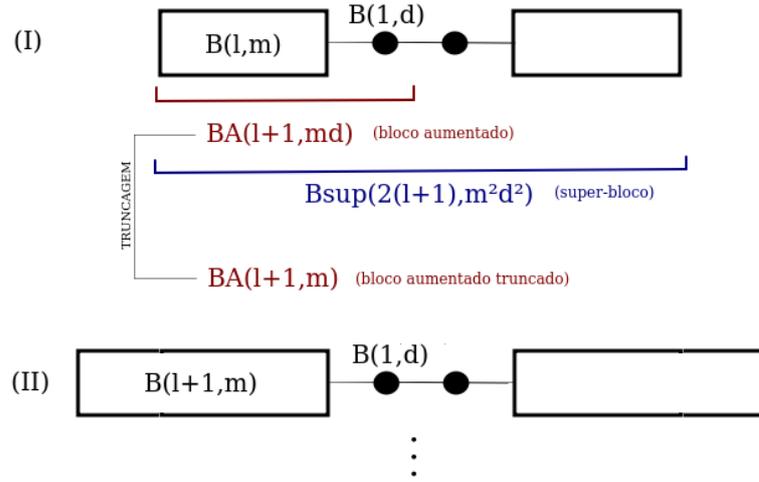


Figura 9 – Esquematização do DMRG-infinito. (I) O super-bloco B_{sup} é construído e, a partir de sua diagonalização, a base do bloco aumentado $B_A(l+1, md)$ é truncada $B_A(l+1, m)$. (II) Usando o bloco aumentado truncado obtido do passo anterior, um novo super-bloco é construído e repetem-se os passos até atingir o tamanho desejado para o sistema. Fonte: adaptado de (SCHOLLWÖCK, 2011).

a renormalização do super-bloco. Enquanto isso, o bloco da esquerda é decrescido por um sítio e nada é feito nele, este bloco é recuperado da memória de passos anteriores. Esse procedimento é repetido até que o bloco reduzido seja constituído por apenas um sítio e, então, inverte: o bloco da direita é decrescido enquanto o bloco da esquerda é crescido e tem sua base truncada. Além do Hamiltoniano do super-bloco, todos os operadores de observáveis de interesse são projetados na base truncada em cada passo. A convergência da energia pode ser atingida com poucos *sweeps*. Uma esquematização desse procedimento é mostrada na Figura 10.

3.2 Precisão da truncagem

O erro acumulado a cada truncagem do sistema realizada é dado por

$$\epsilon_{tr} = \sum_{i>m} \lambda_i, \quad (3.6)$$

onde λ_i corresponde aos autovalores da matriz densidade reduzida ρ_E que foram excluídos na truncagem. O ideal é que esse erro seja muito pequeno $\epsilon_{tr} \ll 1$.

Um fator muito importante que tem efeito direto na precisão da truncagem é a quantidade de emaranhamento entre os blocos aumentados do sistema. Um sistema descrito por um estado puro de muitos corpos composto de duas subpartes, E e D , pode ser decomposto por meio da decomposição de Schmidt como

$$|\Psi\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i} |\phi_{E,i}\rangle \otimes |\phi_{D,i}\rangle, \quad (3.7)$$

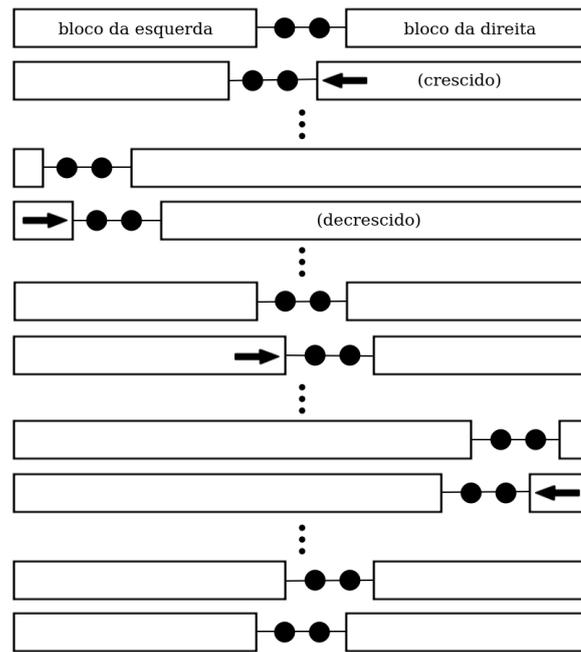


Figura 10 – Esquemática do DMRG-finito. O sistema é iniciado com dois blocos e dois sítios obtidos na parte infinita. Mantendo fixo o tamanho do sistema, o bloco da direita é crescido de um sítio de cada vez, enquanto o bloco da esquerda é descrito de um sítio, até que o bloco da esquerda seja composto por apenas um sítio. Então, inverte até atingir a extremidade da direita e, novamente, inverte crescendo o bloco da direita até o sistema voltar à configuração inicial. Fonte: adaptado de (SCHOLLWÖCK, 2011).

sendo $|\phi_{E,i}\rangle$ e $|\phi_{D,i}\rangle$ elementos das bases ortonormais das partes E e D , respectivamente. Aqui, o λ_i representa todos os auto-valores da matriz de densidade reduzida

$$\rho_{E/D} = \text{Tr}_{E/D} |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_i \lambda_i |\phi_{E/D,i}\rangle\langle\phi_{E/D,i}| \quad (3.8)$$

e obedece a relação $\sum_i \lambda_i = 1$.

Para um estado representado pelo produto dos estados de cada subparte, tem-se que $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_i = 0$, $\forall i \neq 1$ e não há emaranhamento entre as subpartes. No entanto, quanto maior o emaranhamento entre as subpartes, mais termos são usados para a representação do estado do sistema via decomposição de Schmidt, ou seja, é necessário que se use mais autovalores da matriz densidade, pois, se excluídos, o erro acumulado aumenta. Assim, para que se obtenha uma boa precisão retendo poucos estados no cálculo DMRG é preciso que o emaranhamento entre as subpartes seja pequeno. Felizmente, para Hamiltonianos com interações de curto alcance, o emaranhamento entre as subpartes é baixo e uma grande precisão é alcançada, fato garantido pela lei de área que limita o emaranhamento de Hamiltonianos “locais”. (EISERT; CRAMER; PLENIO, 2010)

3.3 Medidas de valores esperados

Após a convergência do sistema com a parte infinita e os *sweeps*, pode-se realizar medidas de valores esperados de observáveis locais usando o estado fundamental do superbloco da seguinte forma:

$$\langle A(i) \rangle = \langle \psi_0 | A(i) | \psi_0 \rangle, \quad (3.9)$$

dado que $A(i)$ foi escrito na mesma base do H_{supB} em cada sítio do sistema a cada passo.

3.4 DMRG dependente do tempo

Para o estudo da evolução temporal, utilizamos o algoritmo desenvolvido por White e Feiguin, válido para sistemas unidimensionais com interações de primeiros vizinhos. (WHITE; FEIGUIN, 2004) Obtendo o estado fundamental do sistema a partir do DMRG finito, o algoritmo é capaz de simular a evolução temporal desse estado seguindo uma dinâmica regida por um Hamiltoniano diferente daquele do estado fundamental. Para isso, o operador de evolução temporal $U = e^{-iHt}$ é reescrito de forma aproximada pela decomposição Suzuki-Trotter para um intervalo de tempo pequeno τ e a base do bloco é modificada a cada passo temporal usando o estado instantâneo no cálculo da matriz densidade reduzida. (CHIARA et al., 2008)

Considerando um Hamiltoniano escrito na forma $H = H_1 + H_2 + \dots + H_{L-1}$, onde H_l inclui termos de interação entre os sítios l e $l + 1$, tem-se que

$$e^{-iH\tau} = e^{-i(H_1+H_2+\dots+H_{L-1})\tau} \neq e^{-iH_1\tau} e^{-iH_2\tau} \dots e^{-iH_{L-1}\tau}, \quad (3.10)$$

onde a desigualdade corresponde à aproximação de primeira ordem da decomposição de Trotter e, se usada na evolução temporal, implicará um erro vindo da não comutação dos Hamiltonianos de interação. Porém, reescrevendo o Hamiltoniano em interações pares e ímpares, $H = H_{\text{ímpar}} + H_{\text{par}}$, onde $H_{\text{ímpar}} = H_1 + H_3 + \dots$ e $H_{\text{par}} = H_2 + H_4 + \dots$ e usando o fato de que os termos de $H_{\text{ímpar}}$ comutam entre si e os termos de H_{par} também, a aproximação de segunda ordem da decomposição de Trotter fica:

$$e^{-iH\tau} \approx e^{-i\frac{H_{\text{ímpar}}}{2}\tau} e^{-iH_{\text{par}}\tau} e^{-i\frac{H_{\text{ímpar}}}{2}\tau}, \quad (3.11)$$

e o erro acumulado é reduzido. (SCHOLLWÖCK, 2011)

Em um procedimento semelhante ao DMRG finito descrito anteriormente, realizam-se *sweeps* no sistema onde a cada passo, o operador de evolução temporal $e^{-iH_l\tau}$ é aplicado ao estado do sistema no momento em que os sítios l e $l + 1$ correspondem aos sítios livres. Após isso, o espaço de Hilbert do sistema é renormalizado de acordo com o DMRG-finito e o estado é, então, modificado usando o método de predição de estado de White. (WHITE, 1996) A precisão do t-DMRG decai com o tempo, pois há um erro acumulado na decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem, da ordem de τ^3 .

4 Resultados: Dinâmica de não-equilíbrio em sistemas interagentes 1D

Este capítulo é dedicado aos resultados dos estudos da dinâmica que se segue após a realização de um *quench* local que acopla uma impureza magnética à uma cadeia metálica interagente e a um modo zero de Majorana.

4.1 Modelo

A fim de estudar o modo zero de Majorana, um ponto quântico é acoplado à um supercondutor topológico e à uma cadeia metálica interagente. Esse sistema corresponde à junção supercondutor topológico-ponto quântico-cadeia metálica (TSC-QD-LL) que foi descrito na [seção 2.4](#). O estudo foi realizado para o sistema com $L = 48$ sítios no total, sendo o modo zero de Majorana o primeiro sítio, a impureza o segundo sítio e os $L_D = 46$ sítios formando a cadeia metálica à direita do ponto quântico.

E, para comparação, estudamos o acoplamento de um ponto quântico à duas cadeias metálicas interagentes. Esse sistema foi estudado em detalhes anteriormente ([BRAGANÇA et al., 2021](#)), mas obtemos novamente os resultados aqui. Esse sistema corresponde à junção cadeia metálica interagente-ponto quântico-cadeia metálica interagente (LL-QD-LL) dado pelo seguinte Hamiltoniano

$$H = H_E^{LL} + H^{dot} + H_D^{LL} + H^{acop}, \quad (4.1)$$

onde as cadeias são descritas pelos Hamiltonianos $H_{E/D}^{LL}$ dados pela [Equação 2.1](#) ($H_{E/D}^{LL}$ para a cadeia da esquerda/direita) com preenchimento $1/4$ e $t = 1$, o ponto quântico é descrito pelo H^{dot} dado pela [Equação 2.18](#) com $\epsilon_d = -U_d/2$ e o acoplamento é dado por H^{acop} que corresponde ao primeiro termo do Hamiltoniano da [Equação 2.19](#), ficando

$$H^{acop} = -t'_1 \sum_{\sigma} (c_{-1\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + h.c) - t'_2 \sum_{\sigma} (c_{+1\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + h.c), \quad (4.2)$$

sendo t'_1 (t'_2) o *hopping* entre a cadeia da esquerda (direita) e o ponto quântico, o índice 0 no operador c indica o sítio do ponto quântico, o índice -1 no operador c^{\dagger} indica o primeiro sítio da cadeia da esquerda e o índice $+1$ no operador c^{\dagger} indica o primeiro sítio da cadeia da direita. Na [Figura 11](#), o sistema é representado esquematicamente.

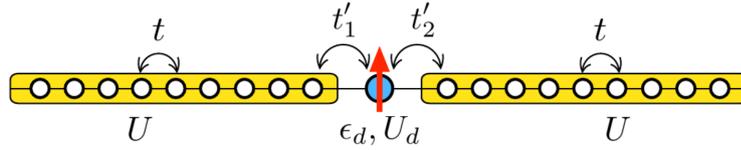


Figura 11 – Esquemática do sistema híbrido LL-QD-LL. O ponto quântico é acoplado pela esquerda a uma cadeia metálica interagente pelo parâmetro t'_1 e, pela direita, acoplado a outra cadeia por t'_2 . Fonte: própria.

4.2 Quench e método

Primeiramente, preparamos o estado inicial da forma

$$|\Psi_0\rangle = |\gamma_0\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes |GS_{LL}\rangle, \quad (4.3)$$

onde $|\gamma_0\rangle$ é o modo zero de Majorana, $|\uparrow\rangle$ é o estado do ponto quântico preparado segundo o Hamiltoniano H^{dot} com um único elétron com spin no sentido $+z$ e $|GS_{LL}\rangle$ é o estado fundamental do Hamiltoniano H^{LL} . Em seguida, deixamos o estado evoluir segundo o Hamiltoniano da Equação 2.17, o que corresponde a ligar os acoplamentos t' e V no tempo $\tau = 0$. Assim, podemos investigar os efeitos do modo zero de Majorana e das interações nas cadeias metálicas sobre o ponto quântico.

De forma equivalente, para o estudo do sistema LL-QD-LL, prepara-se o estado inicial da forma

$$|\Psi_0\rangle = |GS_{E/D}\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes |GS_D\rangle, \quad (4.4)$$

onde $|GS_{E/D}\rangle$ é o estado fundamental do Hamiltoniano $H_{E/D}^{LL}$ para a cadeia metálica da esquerda/direita e $|\uparrow\rangle$ é o estado do ponto quântico preparado segundo o Hamiltoniano H^{dot} como no sistema TSC-QD-LL. E, em seguida, o estado do sistema evolui segundo o Hamiltoniano da Equação 4.1, o que corresponde a ligar os acoplamentos t'_1 e t'_2 no tempo $\tau = 0$. Então, investigamos os efeitos das interações nas cadeias metálicas sobre o ponto quântico.

O estado inicial é preparado via DMRG estático e a dinâmica pós-*quench* é obtida por DMRG dependente do tempo. Ambas metodologias foram previamente descritas no Capítulo 3. Os resultados numéricos foram obtidos usando a decomposição Suzuki-Trotter de segunda ordem com passo de tempo $d\tau = 0.05$, o que manteve o erro da evolução temporal da ordem de até 10^{-5} . O número de *sweeps* usado no cálculo do estado inicial foi de 3 a 10 *sweeps* para o sistema TSC-QD-LL e 15 *sweeps* para o sistema LL-QD-LL. O erro na preparação do estado inicial foi da ordem de até 10^{-3} . A dimensão máxima do sistema DMRG foi $m = 64$.

4.3 Resultados

O estudo foi realizado para diferentes valores de interação U nas cadeias, diferentes valores de interação no ponto quântico, U_d , e diferentes valores de acoplamentos, $t' = t'_1 = t'_2$ e V .

4.3.1 Efeitos no *bulk*

Nessa seção, queremos investigar a existência de algum efeito do Majorana sobre o *bulk* (cadeias interagentes). Assim, construímos gráficos de observáveis locais ao longo da cadeia para cada tempo.

Na [Figura 12](#), os resultados de t-DMRG são mostrados para a magnetização local, $m_i(\tau) = \langle \Psi_i(\tau) | S_i^z | \Psi_i(\tau) \rangle$, em função do sítio, i , e do tempo, τ , após o *quench* onde o ponto quântico é acoplado ao modo zero de Majorana e à cadeia, no caso do sistema TSC-QD-LL, e acoplado às duas cadeias no caso do sistema LL-QD-LL. A unidade do tempo τ é sempre dada em unidades de $1/t$, sendo t o parâmetro de *hopping* ao longo da cadeia metálica. Nesses gráficos, os parâmetros usados foram: $t' = 0.5$, $V = 0.5$, $t'_1 = t'_2 = 0.5$, $t = 1$, $U = 2, 4, 6$ e 8 , $\epsilon_d = -3.5$ e $U_d = 7$.

Após a realização do *quench* local, $\tau > 0$, a propagação da perturbação pela cadeia é limitada por um cone de luz como discutido no [Capítulo 1](#). Diante desses gráficos, fica claro que o *quench* gera perturbações que produzem variações na magnetização que se propagam ao longo das cadeias desde o sítio do ponto quântico gerando cones de luz efetivos para ambos os sistemas estudados. A partir da inclinação de suas bordas calculamos a velocidade de propagação do observável. As velocidades estimadas para a propagação da magnetização local pelas cadeias podem ser vistas na [Figura 12](#). As velocidades não parecem depender do sistema. Além disso, essa velocidade depende do valor de interação nas cadeias, ela aumenta à medida que o valor de U diminui.

A [Figura 13](#) também mostra cones de luz para o *bulk*, mas dessa vez para a variação de carga local $\Delta\rho_i(\tau) = \langle \Psi_i(\tau) | n_i | \Psi_i(\tau) \rangle - \langle \Psi_i(0) | n_i | \Psi_i(0) \rangle$. Nesse caso, as velocidades de propagação da perturbação não dependem do valor de U e são as mesmas para ambos os sistemas sendo $v \sim 2$.

A comparação entre os resultados da [Figura 12](#) e da [Figura 13](#) revela o efeito da separação spin-carga, um resultado esperado para o modelo de Hubbard ([KOREPIN; RODITI, 2000](#)): a velocidade de propagação da carga depende da interação na cadeia, enquanto que a velocidade da magnetização não depende. Apesar de ser um efeito conhecido, não é facilmente visto na dinâmica e os cones de luz entregam um resultado bonito com clara visualização desse efeito. Além disso, a observação desse efeito em nossos resultados reforça a validade e precisão dos nossos cálculos.

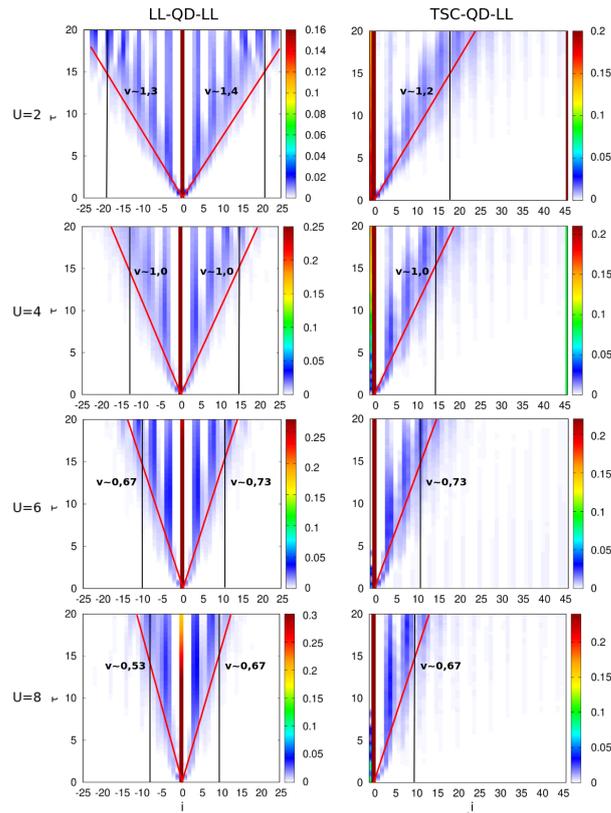


Figura 12 – Magnetização local em função do sítio, i , e do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento. Na primeira coluna, o sistema LL-QD-LL e, na segunda, TSC-QD-LL. Os parâmetros fixos foram: $U_d = 7$, o *hopping* nas cadeias 1 e valores de hibridização 0.5. Nas linhas, as interações nas cadeias interagentes são, de cima para baixo, $U = 2, 4, 6$ e 8 . A linha em vermelho é a inclinação dos cones de luz e, a linha preta, o valor em i onde a inclinação corta o tempo $\tau = 15$. A velocidade da propagação da perturbação é inscrita ao lado de cada inclinação dos cones.

Apesar da velocidade de propagação de carga e spin depender apenas dos parâmetros de Hubbard, parece haver algum efeito do acoplamento com o MZM sobre a forma das propagações. Como exemplo, apresentamos, na [Figura 14](#), um corte no cone de luz de carga, a tempo fixo $\tau = 8$, ou seja, observamos variação de carga em função dos sítios na cadeia metálica da direita. No sistema LL-QD-LL, observamos um pulso bem definido em torno do sítio $i = 16$, enquanto os demais sítios da cadeia têm uma variação de carga próxima de zero. Já no caso TSC-QD-LL, além do pulso que define o cone de luz, há outros pulsos de carga mais próximos do QD. Este resultado numérico ainda precisa ser mais analisado e comparado a expressões analíticas, mas procuramos identificar efeitos do MZM sobre a função de onda de muitos corpos que descreve todo o sistema interagente. Nas próximas seções, mostraremos que o MZM gera importantes efeitos em observáveis locais no QD.

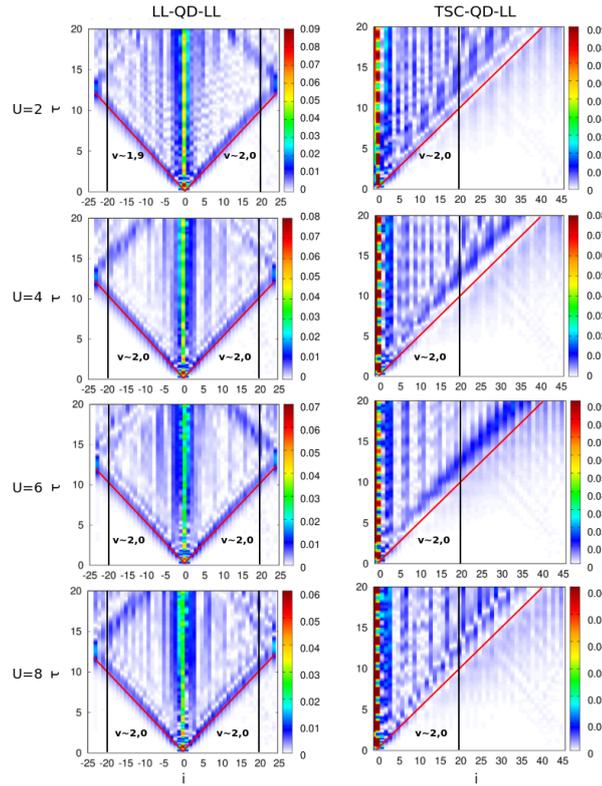


Figura 13 – Variação da carga local em função do sítio, i , e do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento. Na primeira coluna, o sistema LL-QD-LL e, na segunda, TSC-QD-LL. Os parâmetros fixos foram: $U_d = 7$, o *hopping* nas cadeias 1 e valores de hibridização 0.5. Nas linhas, as interações nas cadeias interagentes são, de cima para baixo, $U = 2, 4, 6$ e 8. A linha em vermelho é a inclinação dos cones de luz e a linha preta corta o sítio $i = 20$. A velocidade da propagação da perturbação é inscrita ao lado de cada inclinação dos cones.

4.3.2 Magnetização no ponto quântico

Nessa seção, os resultados de t-DMRG para a evolução temporal de observáveis locais no sítio do ponto quântico são mostrados. A Figura 15 mostra a magnetização $m_0(\tau) = \langle \Psi_i(\tau) | S_i^z | \Psi_i(\tau) \rangle$ após o *quench* para vários valores de U com os seguintes parâmetros fixos: $U_d = 7$, $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$ (os resultados são semelhantes para outros valores de U_d, V e t'). Analisando os resultados do sistema sem Majorana, LL-QD-LL, vemos que o decaimento da magnetização no ponto quântico fica mais rápido à medida que aumentamos U . Essa dependência já foi vista em um trabalho anterior. (BRAGANÇA et al., 2021) Agora, quando incluímos o Majorana (sistema TSC-QD-LL), o decaimento parece depender menos de U . Esse resultado será explorado em mais detalhes na próxima subseção 4.3.2.1.

Da Figura 16, onde a magnetização no ponto quântico foi plotada no tempo para dois valores diferentes U_d e demais parâmetros fixos, vemos que para um dado valor de U , a magnetização decai mais rapidamente para maiores valores de U_d em ambos os sistemas.

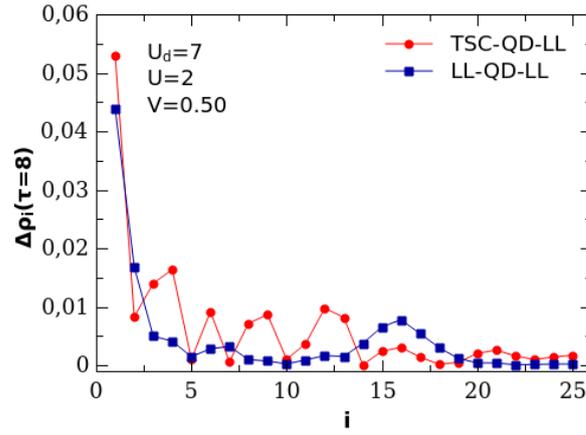


Figura 14 – Comparação da variação de carga local, $\Delta\rho_i$ em função do sítio, i , para o tempo $\tau = 8$ após o *quench* de acoplamento. Os parâmetros fixos foram: $U_d = 7$, $U = 2$ e $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$.

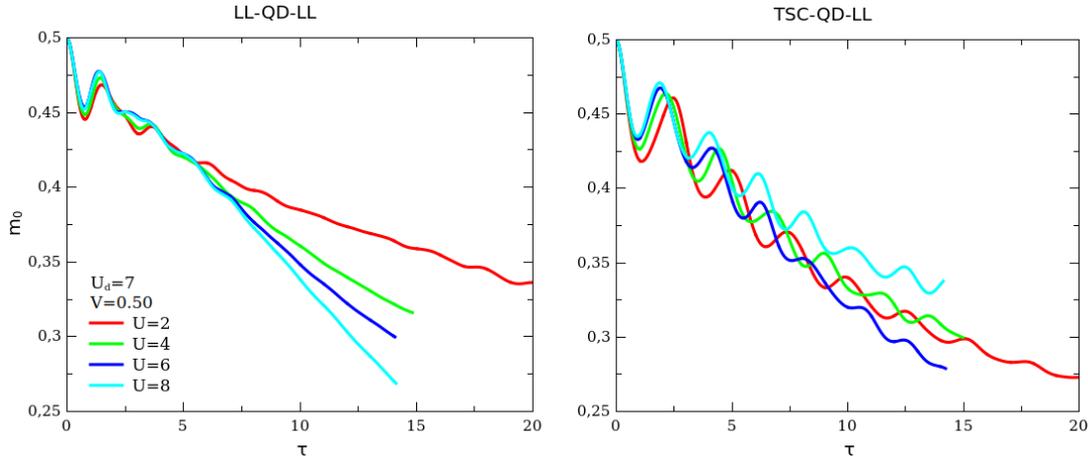


Figura 15 – Magnetização no ponto quântico, m_0 , em função do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento, para diferentes valores de interação nas cadeias interagentes: $U = 2, 4, 6$ e 8 . Os parâmetros fixados foram: $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$ e $U_d = 7$. No primeiro painel, o sistema LL-QD-LL e, no segundo, o TSC-QD-LL.

Resultado também já visto no trabalho anterior. (BRAGANÇA et al., 2021) Quanto maior U_d , mais a ocupação de carga no ponto quântico é próximo de 1, então entramos mais dentro do regime Kondo.

4.3.2.1 Comparação com resultados analíticos

Buscando entender melhor o efeito do Majorana sobre a magnetização das cadeias interagentes, expressões analíticas para a magnetização no ponto quântico foram obtidas por meio de uma abordagem da teoria de campos.¹ O modelo usado para o sistema TSC-QD-LL assume que os graus de liberdade do *bulk* do TSC foi integrado fora e considera

¹ Os resultados analíticos foram obtidos por Moallison F. Cavalcante e Rodrigo G. Pereira.

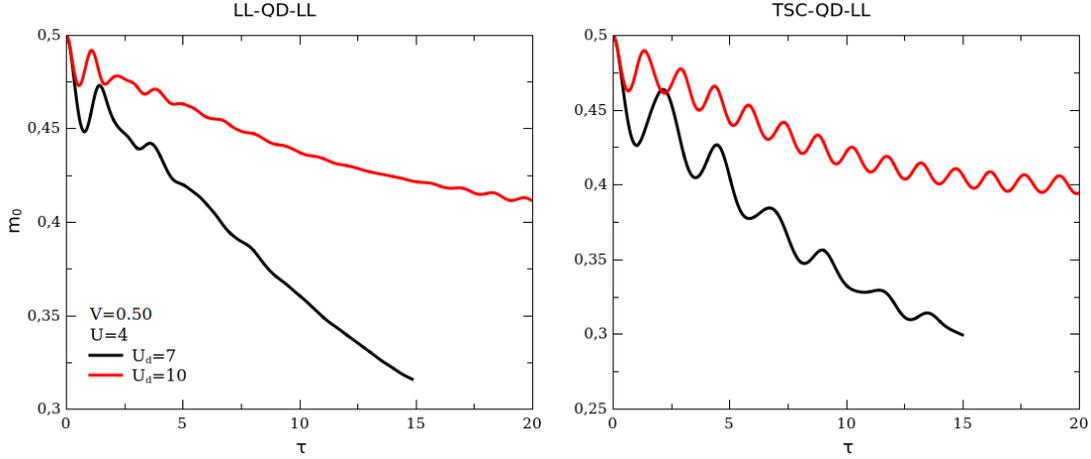


Figura 16 – Magnetização no ponto quântico, m_0 , em função do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento, para diferentes valores de interação no ponto quântico: $U_d = 7$ e 10 . Os parâmetros fixados foram: $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$ e $U = 4$. No primeiro painel, o sistema LL-QD-LL e, no segundo, o TSC-QD-LL.

apenas um modo zero de Majorana na borda que acopla-se a apenas um spin. Além disso, os níveis de energia mais altos do ponto quântico são integrados fora e considera-se somente ocupação simples. O Hamiltoniano fica sendo dado por

$$H = H_{LL} + H_K + H_M, \quad (4.5)$$

$$H_K = J_K \mathbf{S}_0 \cdot c_1^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_1, \quad (4.6)$$

$$H_M = iJ_M \gamma_\uparrow [c_{1\downarrow}^\dagger S_0^+ + c_{1\downarrow} S_0^- + (c_{1\uparrow}^\dagger + c_{1\uparrow}) S_0^z], \quad (4.7)$$

onde H_K é o Hamiltoniano Kondo e H_M é o Hamiltoniano da interação do Majorana com o ponto quântico. O operador $\mathbf{S}_0 = c_0^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_0$ é o operador de spin no ponto quântico e $J_M = \frac{2}{|\epsilon_d|} V t'$. Os demais parâmetros, ϵ_d , V e t' , correspondem aos mesmos já descritos.

Para $\tau \gg 0$, a magnetização no sistema TSC-QD-LL é dada por

$$m_0(\tau) \sim \frac{1}{2} - \frac{V^2}{A} \cos \left[\frac{3 - K_c^{-1}}{2} \left(\frac{\pi}{2} - \frac{1}{\tau} \right) \right] \tau^{\frac{3 - K_c^{-1}}{2}} - \frac{B}{U_d^2} \ln \tau + C \quad (4.8)$$

e para o sistema LL-QD-LL,

$$m_0(\tau) \sim \frac{1}{2} - \frac{D}{U_d^2} \ln \tau + \frac{E}{U_d^2} \frac{1}{\tau^{K_c^{-1} - 1}} + F, \quad (4.9)$$

sendo A, B, C, D, E e F constantes não-universais.

Os termos $\ln \tau$ presentes nas duas equações acima vêm do efeito Kondo. A diferença entre as duas está nos termos de leis de potência, que dependem de U através de K_c . Esses termos comportam-se de formas diferentes em cada expressão, crescendo no tempo para o

sistema com Majorana e decrescendo para o sistema sem Majorana. Na [Figura 17](#), onde as equações acima estão plotadas, podemos observar que a magnetização do ponto quântico decai mais rapidamente no tempo para o sistema com Majorana do que para o sistema sem Majorana.

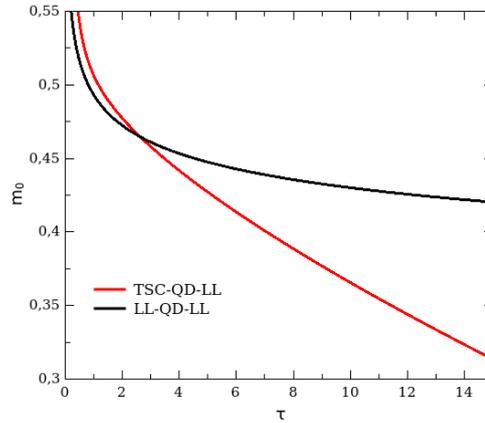


Figura 17 – Expressões analíticas para a magnetização no ponto quântico, m_0 , em função do tempo, τ , para $\tau \gg 0$. Na curva em vermelho, a [Equação 4.8](#), que corresponde ao sistema TSC-QD-LL e, na curva em preto, a [Equação 4.9](#), que corresponde ao sistema LL-QD-LL.

Na [Figura 18](#), a comparação da magnetização na impureza para os dois sistemas para diferentes valores de U e U_d e V fixos é mostrada. Esses resultados numéricos de t-DMRG são os mesmos da [Figura 15](#), mas agora comparando os sistemas para cada U . Observamos que a magnetização decai mais rapidamente para o sistema com Majorana nos casos de $U = 2, 4$ e 6 , se comparada ao sistema sem Majorana, o que não acontece para o valor de $U = 8$. E, comparando com as expressões analíticas no gráfico da [Figura 17](#), temos que o comportamento qualitativo é como esperado. Faremos ajustes mais detalhados no futuro.

Nos painéis da [Figura 19](#), temos alguns ajustes das expressões analíticas sobre os resultados numéricos de t-DMRG com $U_d = 7$, $U = 4$ ($K_c = 0,71$) e $V = 0,5$. Os parâmetros ajustados foram: $A = 3,1 \pm 0,1$, $B = -0,5 \pm 0,1$ e $C = 0,017 \pm 0,003$ para a [Equação 4.8](#) (com Majorana) e $D = 4,5 \pm 0,1$, $E = -7,0 \pm 0,3$ e $F = 0,13 \pm 0,01$ para a [Equação 4.9](#) (sem Majorana). Não obtivemos um ajuste tão bom da curva do sistema LL-QD-LL, por outro lado o sistema TSC-QD-LL ajustou bem. Contudo, esses ajustes ainda são preliminares.

Por fim, uma diferença importante que observamos entre os casos numéricos e analíticos são as oscilações e, além disso, o acoplamento do Majorana gera oscilações com maiores frequências. Essa diferença acontece porque, no resultado analítico, nós integramos fora os casos em que a impureza está vazia ou duplamente ocupada. No resultado numérico, nós tratamos o modelo de forma mais geral. Isso será investigado na [subse-](#)

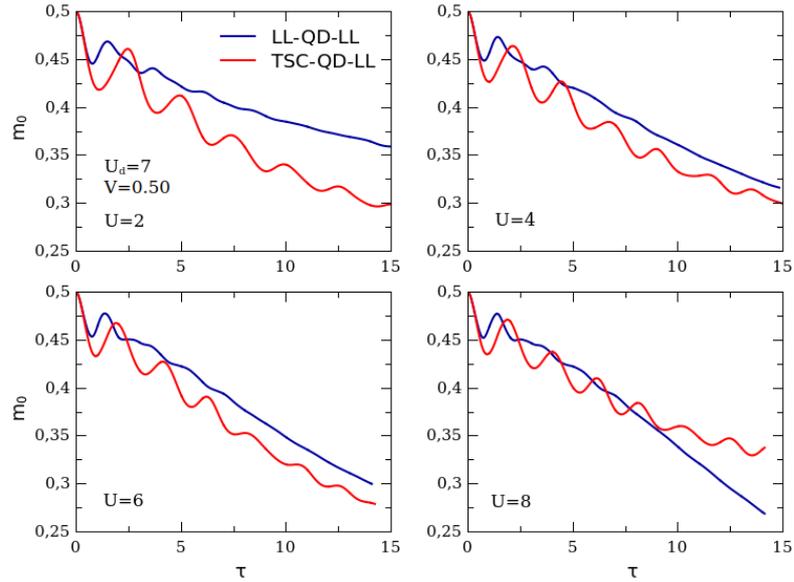


Figura 18 – Magnetização no ponto quântico, m_0 , em função do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento. Os parâmetros fixados foram: $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$ e $U_d = 7$. Comparação entre os sistemas TSC-QD-LL (curvas em vermelho) e LL-QD-LL (curvas em azul) para diferentes valores de interação nas cadeias interagentes: $U = 2, 4, 6$ e 8 .

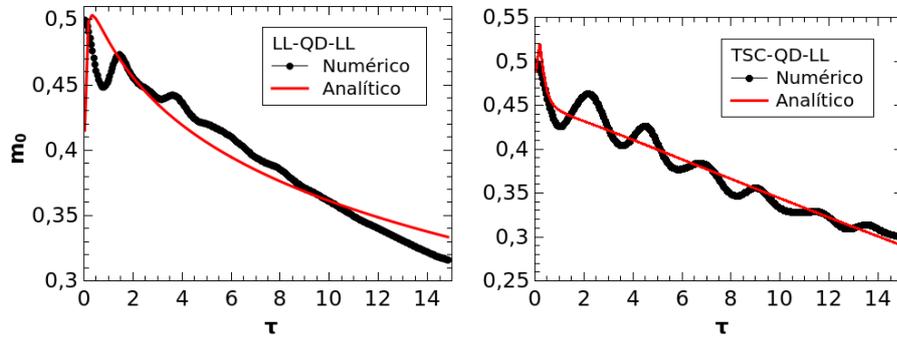


Figura 19 – Magnetização no ponto quântico, m_0 , em função do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento. Os parâmetros dos dados numéricos (curvas em preto) são: $U_d = 7$, $U = 4$ e $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$. As curvas em vermelho representam os ajustes da [Equação 4.8](#) e da [Equação 4.9](#). No primeiro painel, o sistema LL-QD-LL e, no segundo, o TSC-QD-LL.

ção 4.3.3.1.

4.3.3 Ocupação no ponto quântico

Resultados de t-DMRG para a ocupação no ponto quântico $\rho = \langle \Psi_i(\tau) | n_i | \Psi_i(\tau) \rangle$ após o *quench* é mostrada na [Figura 20](#). Os parâmetros usados foram $U_d = 7$, $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$ (os resultados são semelhantes para outros valores de U_d, V e t'). Observamos que a ocupação parece depender do valor U assumindo menores valores para

U' s menores. Essa dependência, que é clara no sistema LL-QD-LL, é mais sutil no sistema TSC-QD-LL. Podemos ver que, em todas as curvas, a ocupação é sempre próxima de 1, mas oscila. E ela é tão mais próxima de 1 quanto maior for o U .

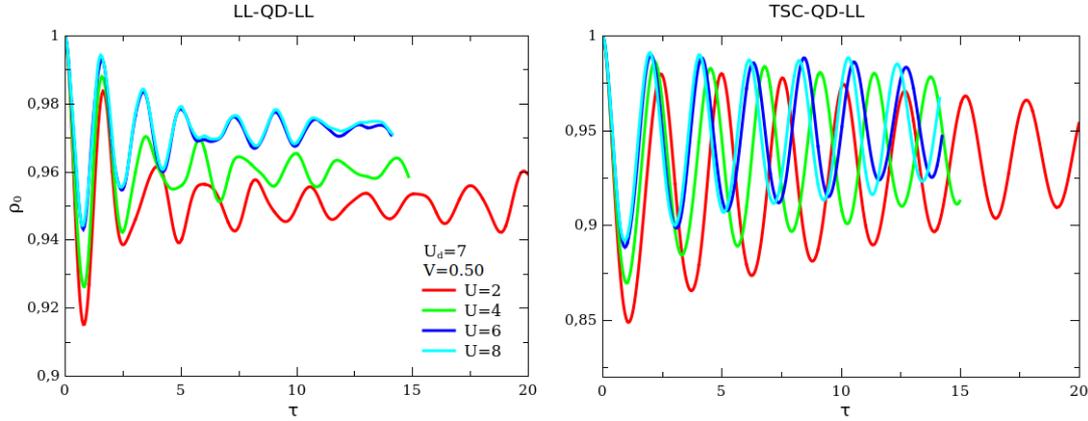


Figura 20 – Ocupação no ponto quântico, ρ_0 , em função do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento, para diferentes valores de interação nas cadeias interagentes: $U = 2, 4, 6$ e 8 . Os parâmetros fixados foram: $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$ e $U_d = 7$. No primeiro painel, o sistema LL-QD-LL e, no segundo, o TSC-QD-LL.

Na Figura 21, temos a ocupação no ponto quântico em função do tempo para valores diferentes de U_d . Observamos nesses gráficos que a ocupação assume um valor maior e mais próximo de 1 quanto maior for o valor de U_d , em ambos os sistemas. Aqui, podemos observar também que as oscilações diminuem quando aumentamos U_d e as amplitudes de oscilações são maiores no sistema com Majorana.

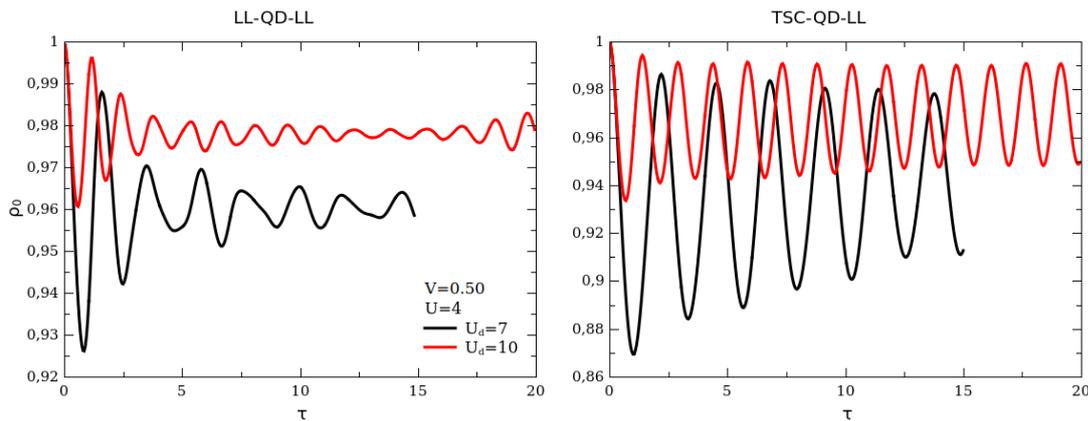


Figura 21 – Ocupação no ponto quântico, ρ_0 , em função do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento, para diferentes valores de interação no ponto quântico: $U_d = 7$ e 10 . Os parâmetros fixados foram: $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$ e $U = 4$. No primeiro painel, o sistema LL-QD-LL e, no segundo, o TSC-QD-LL.

Finalmente, na Figura 22, a ocupação é comparada entre os sistemas. Esses resultados são para $U_d = 7$, $V = 0.50$ e $U = 2, 4, 6$ e 8 . Reforçamos a discussão já feita,

a amplitude das oscilações é maior no sistema TSC-QD-LL em comparação com o LL-QD-LL, além disso as oscilações parecem ter um período bem definido que depende de U . Buscando entender melhor essas oscilações e, dado que essas oscilações não aparecem no resultado analítico, faremos uma análise exata do sistema composto apenas por Majorana-QD na seção seguinte.

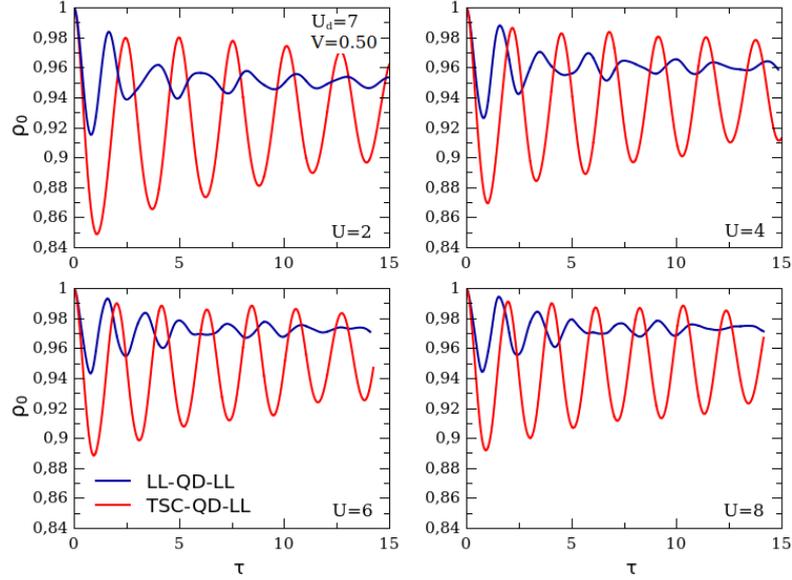


Figura 22 – Ocupação no ponto quântico, ρ_0 , em função do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento. Os parâmetros fixados foram: $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$ e $U_d = 7$. Comparação entre os sistemas TSC-QD-LL (curvas em vermelho) e LL-QD-LL (curvas em azul) para diferentes valores de interação nas cadeias interagentes: $U = 2, 4, 6$ e 8 .

4.3.3.1 Resultado exato: Majorana-QD

Com o objetivo de investigar as oscilações presentes nos resultados do sistema TSC-QD-LL, realizamos um estudo do sistema Majorana-QD, um sistema híbrido de um Modo Zero de Majorana com um ponto quântico, por meio da diagonalização exata visto que trata-se de apenas dois sítios. Similarmente ao TSC-QD-LL, realizamos um *quench* correspondente ao acoplamento de um ponto quântico à um modo zero de Majorana. O Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = H^{dot} + H^{int}, \quad (4.10)$$

com

$$H^{dot} = -\frac{U_d}{2}(n_\uparrow + n_\downarrow) + U_d(n_\uparrow n_\downarrow), \quad n_\sigma = c_\sigma^\dagger c_\sigma, \quad (4.11)$$

onde H^{dot} é o Hamiltoniano do ponto quântico (o mesmo da [Equação 2.18](#) com $\epsilon_d = -U_d/2$), e H^{int} é o Hamiltoniano de interação entre o modo zero de Majorana e o ponto quântico que é dado por

$$H^{int} = iV\gamma(c_\uparrow + c_\uparrow^\dagger), \quad (4.12)$$

sendo V , o parâmetro que acopla o Majorana com o ponto quântico; γ_\uparrow , o operador de Majorana; e $c_\uparrow/c_\uparrow^\dagger$, os operadores de aniquilação/criação. Usamos $\gamma = (c_\uparrow + c_\uparrow^\dagger)$, de forma que o Hamiltoniano total é um Hamiltoniano de dois sítios

$$H = \mathbb{1} \otimes H^{dot} + iV[(c_\uparrow + c_\uparrow^\dagger) \otimes (c_\uparrow + c_\uparrow^\dagger)], \quad (4.13)$$

sendo $\mathbb{1}$ uma identidade 4×4 .

Primeiro, preparamos o sistema no estado fundamental $|\psi(0)\rangle$ do Hamiltoniano da [Equação 4.10](#) fazendo $V = 0$ com a energia sendo dada por $H_0|\psi(0)\rangle = E_0|\psi(0)\rangle$ e, em seguida, o sistema foi evoluído com $V \neq 0$ para tempo $\tau > 0$ da seguinte forma

$$|\psi(\tau)\rangle = e^{-iH_f\tau}|\psi(0)\rangle, \quad (4.14)$$

com $H_f|\varepsilon_j\rangle = E_j|\varepsilon_j\rangle$, onde $|\varepsilon_j\rangle$ são os auto-estados de H_f com energia ε_j .

O Hamiltoniano final é degenerado, com apenas duas energias distintas que são dadas por $E_1 = -\frac{(U_d/2) + \sqrt{(U_d/2)^2 + 4V^2}}{2}$ e $E_2 = \frac{-(U_d/2) + \sqrt{(U_d/2)^2 + 4V^2}}{2}$. Para $U_d = 6$ e $V = 0.5$, por exemplo, temos $E_1 = -3.0811$ e $E_2 = 0.0811$ com *gap* de energia $\Delta E \sim 3.16$.

O resultado do cálculo exato para a evolução temporal da magnetização no ponto quântico é apresentada na [Figura 23](#). No primeiro painel, fixamos $U_d = 6$ e comparamos diferentes valores de V e, no segundo painel, fixamos $V = 5.0$ e comparamos diferentes valores de U_d . Observamos que a amplitude das oscilações está relacionada aos parâmetros U_d e V . Podemos diminuir a amplitude, diminuindo a amplitude do acoplamento do Majorana com o QD e aumentando a intensidade da interação no QD.

Para a magnetização com $U_d = 6$ e $V = 0.5$, como pode ser visto no gráfico da [Figura 23](#), obtemos que a frequência da oscilação é $\omega \sim 3.14$, o que é bem próximo ao *gap* de energia que calculamos previamente para esses mesmos parâmetros $\Delta E \sim 3.16$. A diferença entre a frequência e o *gap* está apenas na precisão do cálculo da frequência, que depende do passo de tempo da evolução temporal. Importante ressaltar que, no resultado numérico, temos o decaimento da magnetização, pois temos a cadeia interagente no sistema que absorve essas oscilações, isso não acontece no resultado exato visto que tratamos de um sistema híbrido Majorana-QD.

Na [Figura 24](#), temos o resultado exato do sistema Majorana-QD para a ocupação no ponto quântico em função do tempo (curva em preto) sendo comparado aos resultados numéricos (demais curvas). Esse gráfico corresponde aos parâmetros: $U_d = 7$ e $V = 0.5$.

A partir das curvas, calculamos o período das oscilações: $T = 1.733$ para o caso exato; $T = 2.45$ para $U = 2$; $T = 2.20$ para $U = 4$; $T = 2.05$ para $U = 6$ e; $T = 2.00$ para $U = 8$. O resultado exato possui energias $E_1 \sim -3.57$ e $E_2 \sim -0.07$ com o *gap* de energia sendo $\Delta E \sim 3.64$. Considerando que $\omega = \Delta E$, calculamos o período $T = 2\pi/\omega$ e obtemos $T \sim 1.73$, o que concorda com o período obtido a partir da curva do gráfico.

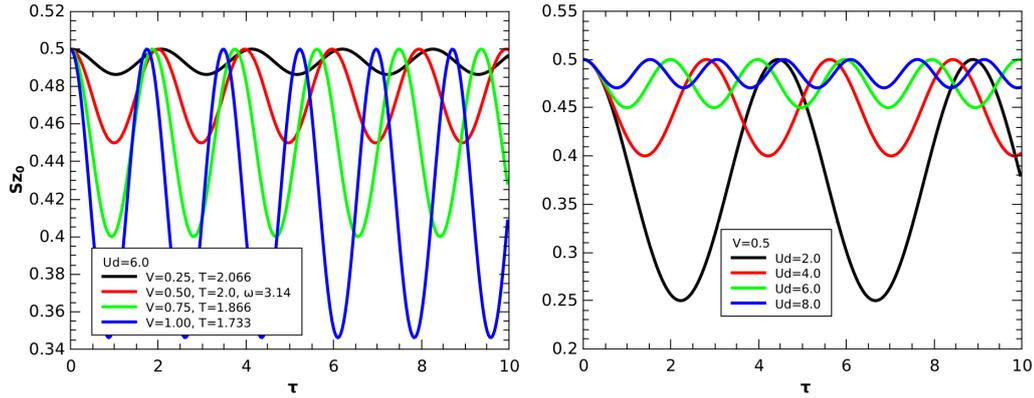


Figura 23 – Resultado exato da magnetização no ponto quântico, S_{z_0} , em função do tempo, τ , após o *quench* para o sistema Majorana-QD. No primeiro painel, $U_d = 6$ e diferentes valores de V e, no segundo painel, $V = 0.5$ e diferentes valores de U_d .

Vemos que a frequência de oscilação depende de U , o que faz sentido pois o Hamiltoniano muda, as energias mudam e, então, a frequência também muda. Ainda assim, a oscilação parece ser dominada pelo acoplamento Majorana-QD.

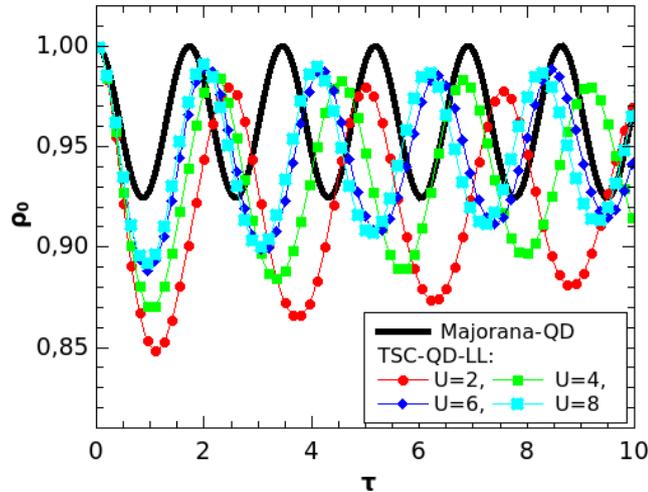


Figura 24 – Ocupação no ponto quântico, ρ_0 , em função do tempo, τ , após o *quench* de acoplamento. As curvas pontilhadas correspondem aos resultados numéricos do sistema TSC-QD-LL para diferentes valores de interação nas cadeias interagentes: $U = 2, 4, 6$ e 8 com $U_d = 7$ e $V = t' = t'_1 = t'_2 = 0.50$. A curva em preto corresponde ao resultado exato do sistema Majorana-QD com $U_d = 7$ e $V = 0.50$.

Conclusão

Nós investigamos uma possível assinatura do Majorana e, para isso, consideramos o *quench* de acoplamento de um ponto quântico a um modo zero de Majorana e a uma cadeia metálica interagente descrita pelo modelo de Hubbard. Para comparação, estudamos também o *quench* de acoplamento de um ponto quântico a duas cadeias metálicas interagentes. Nós estudamos o modelo por meio de cálculo numérico via grupo de renormalização da matriz densidade dependente do tempo (t-DMRG) e comparamos com resultados analíticos obtidos via teoria de campos.

Nós observamos a separação spin-carga e a formação de cones de luz com velocidades de propagação da magnetização e carga após o *quench* que não parecem depender do sistema. Apesar da velocidade ser a mesma nos dois sistemas, observamos que o Majorana parece causar algum efeito no *bulk*, porém ainda são resultados preliminares.

Considerando observáveis locais no ponto quântico, vimos que o decaimento da magnetização fica mais rápido com o aumento da interação na cadeia para o sistema sem Majorana. No sistema com Majorana, o decaimento parece depender menos dessa interação. Algo semelhante foi observado para a ocupação no ponto quântico, o sistema sem Majorana possui clara dependência com a interação na cadeia, enquanto que, para o sistema com Majorana, essa dependência é mais sutil.

Os resultados analíticos indicam que a magnetização local no ponto quântico decai mais rapidamente para o sistema com Majorana se comparado ao sistema sem Majorana. E, comparando os resultados numéricos às expressões analíticas, vimos que o comportamento qualitativo é como esperado.

Observamos oscilações nas observáveis locais com amplitudes significativamente maiores no sistema com Majorana. Através de um estudo exato do sistema híbrido de um Majorana acoplado a um ponto quântico, obtivemos que essas oscilações parecem ser dominadas pelo acoplamento Majorana-QD.

Pretendemos finalizar o trabalho em um futuro próximo, incluindo comparações mais precisas entre os resultados analíticos e numéricos. Procuramos conjuntos de parâmetros que reduzem as oscilações para ajustes mais precisos entre as curvas.

Referências

- ANDERSON, P. W. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 124, p. 41–53, 1961. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.
- ANDERSON, P. W. More is different. *Science*, v. 177, p. 393–396, 1972. Citado na página 19.
- AROVAS, D. P. et al. The hubbard model. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, Annual Reviews, v. 13, p. 239–274, 2022. Citado na página 29.
- BRAGANÇA, H. et al. Quench dynamics and relaxation of a spin coupled to interacting leads. *Phys. Rev. B*, v. 103, p. 125152, 2021. Citado 7 vezes nas páginas 23, 24, 25, 26, 45, 49 e 50.
- CALABRESE, P.; CARDY, J. Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2005, n. 04, p. P04010, 2005. Citado na página 25.
- CALABRESE, P.; CARDY, J. Time dependence of correlation functions following a quantum quench. *Phys. Rev. Lett.*, v. 96, p. 136801, 2006. Citado 4 vezes nas páginas 22, 23, 24 e 25.
- CHENEAU, M. et al. Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system. *Nature*, v. 481, n. 7382, p. 484–487, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 22, 25 e 26.
- CHENG, M. et al. Interplay between kondo and majorana interactions in quantum dots. *Phys. Rev. X*, American Physical Society, v. 4, p. 031051, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 38.
- CHIARA, G. D. et al. Density matrix renormalization group for dummies. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, American Scientific Publishers, v. 5, n. 7, p. 1277–1288, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 39 e 43.
- COLEMAN, P. *Introduction to Many-Body Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2015. Citado na página 19.
- DAGOTTO, E.; TOKURA, Y. Strongly correlated electronic materials: Present and future. *MRS Bulletin*, v. 33, p. 1037–1045, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 20.
- EISERT, J.; CRAMER, M.; PLENIO, M. B. Colloquium: Area laws for the entanglement entropy. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society (APS), v. 82, n. 1, p. 277–306, 2010. ISSN 1539-0756. Citado na página 42.
- EISERT, J.; FRIESDORF, M.; GOGOLIN, C. Quantum many-body systems out of equilibrium. *Nature Physics*, v. 11, n. 2, p. 124–130, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 22, 23 e 24.
- ESSLER, F. H. L. et al. *The One-Dimensional Hubbard Model*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2005. Citado na página 30.

- 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, 2008. Citado na página 37.
- GREINER, M. et al. Collapse and revival of the matter wave field of a bose–einstein condensate. *Nature*, Nature, v. 419, p. 51–54, 2002. Citado na página 22.
- HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy. Soc. of London. Series A, Mathematical and Physical*, The Royal Society, v. 276, n. 1365, p. 238–257, 1963. Citado na página 29.
- KITAEV, A. Y. Unpaired majorana fermions in quantum wires. *Physics-Uspekhi*, v. 44, p. 131–136, 2001. Citado na página 32.
- KOREPIN, V. E.; RODITI, I. *Charge and spin separation in the 1D Hubbard model*. 2000. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/cond-mat/0012266>>. Citado na página 47.
- KOTLIAR, G.; VOLLHARDT, D. Strongly correlated materials: Insights from dynamical mean-field theory. *Physics Today*, v. 57, p. 53–59, 2004. Citado na página 20.
- LEIJNSE, M.; FLENSBERG, K. Introduction to topological superconductivity and majorana fermions. *Semiconductor Science and Technology*, IOP Publishing, v. 27, n. 12, p. 124003, 2012. Citado na página 37.
- LIEB, E.; ROBINSON, D. The finite group velocity of quantum spin systems. *Communications in Mathematical Physics*, v. 28, 09 1972. Citado na página 25.
- LIN, R.; WANG, Z. A brief review on majorana bound states in topological superconductors. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, v. 59, n. 7, 2016. Citado na página 32.
- MACRIDIN, A. et al. Physics of cuprates with the two-band hubbard model: The validity of the one-band hubbard model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 71, p. 134527, 2005. Citado na página 29.
- MAJORANA, E. Teoria simmetrica dell’elettrone e del positrone. *Il Nuovo Cimento (1924-1942)*, v. 14, p. 171–184, 1937. Citado na página 31.
- MANDAL, M. et al. *Topological superconductors from a materials perspective*. 2023. Citado na página 37.
- MITRA, A. Quantum quench dynamics. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, v. 9, n. 1, p. 245–259, 2018. Citado na página 24.
- PAULA, A. L. de et al. Spinon and bound-state excitation light cones in heisenberg XXZ chains. *Physical Review B*, v. 95, n. 4, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- SATO, M.; ANDO, Y. Topological superconductors: a review. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 80, n. 7, p. 076501, 2017. Citado na página 31.
- 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, 2010. Citado na página 37.

SCHÄFER, F. et al. Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices. *Nature Reviews Physics*, v. 2, n. 8, p. 411–425, 2020. Citado na página 22.

SCHOLLWÖCK, U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, Elsevier BV, v. 326, n. 1, p. 96–192, 2011. Citado 5 vezes nas páginas 22, 39, 41, 42 e 43.

SCHRIEFFER, J. R.; WOLFF, P. A. Relation between the anderson and kondo hamiltonians. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 149, p. 491–492, 1966. Citado na página 31.

WHITE, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 69, p. 2863–2866, 1992. Citado na página 39.

WHITE, S. R. Spin gaps in a frustrated heisenberg model for CaV_4O_9 . *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 77, n. 17, p. 3633–3636, 1996. Citado na página 43.

WHITE, S. R.; FEIGUIN, A. E. Real-time evolution using the density matrix renormalization group. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 93, n. 7, 2004. ISSN 1079-7114. Citado na página 43.

WRZEŚNIEWSKI, K.; WEYMANN, I. Magnetization dynamics in a majorana-wire–quantum-dot setup. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 103, p. 125413, 2021. Citado na página 38.