



Universidad de Oviedo

Modelos de materia topológica

Jose Sánchez Fernán

Tutores: Jaime Ferrer Rodríguez

Amador García Fuente

Trabajo Fin de Grado en Física

Facultad de Ciencias

Universidad de Oviedo

Julio de 2023

Índice general

1. Introducción	4
2. Materiales topológicos	6
2.1. Introducción a los materiales topológicos	7
2.1.1. Aislantes topológicos	7
2.1.2. Superconductores topológicos	8
2.2. Clasificación	8
3. Modos de Majorana en superconductores topológicos	11
3.1. Modos de Majorana	12
3.2. Modos de Majorana como anyones no abelianos	15
3.3. Computación cuántica topológica	19
4. Modelo de Kitaev	24
4.1. Descripción del modelo	25
4.2. Cadena de Kitaev cerrada.	25
4.2.1. Relación de dispersión	26
4.2.2. Invariantes topológicos	29
4.3. Cadena de Kitaev abierta	32
4.3.1. Casos extremos	33
4.3.2. Caso general	34
4.3.3. Energía de hibridación como función de la longitud	38
4.4. Efectos a segundos vecinos	42
4.5. Fusión de modos de Majorana	45
5. Conclusiones	49
Bibliografía	51

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	3
A. Conceptos previos	53
A.1. Aproximación de <i>tight-binding</i> : cadena monoatómica	53
A.2. Espacio de Fock y formalismo de segunda cuantización	54
A.3. La cadena monoatómica en segunda cuantización	55
B. Código	57

Capítulo 1

Introducción

Los materiales consisten, en esencia, en una colección de un gran número de átomos agregados dando lugar a un sistema con características físicas y químicas determinadas.

Poniendo el foco sobre el caso de los sólidos, resulta elemental comprender y describir el comportamiento de los electrones que los conforman. No obstante, debido al gran número de partículas involucradas, resulta imposible hacerlo únicamente a partir de primeros principios. Se recurre, por tanto, a simplificaciones que capturen las propiedades emergentes de interés.

Un ejemplo de ello es la teoría de bandas, una herramienta que permite explicar, entre otras cosas, las propiedades de conducción de los sólidos. Consiste en que los estados electrónicos se agrupan en bandas de energía prácticamente continuas. Simplificando enormemente, un material conduce si la banda inferior, o de valencia, no está separada de la banda superior, o de conducción. Por el contrario, los aislantes, se caracterizan por la existencia de una separación energética entre las bandas, conocida como banda prohibida o *gap*.

De forma similar a como la materia puede encontrarse en fase sólida o líquida, o los materiales magnéticos en fase ferromagnética o paramagnética, los materiales topológicos están definidos por la existencia de diferentes fases topológicas. El adjetivo *topológico* hace referencia a que un sistema que se encuentra en fase topológica trivial, es decir, aquella que presenta las propiedades de un material usual, no puede llevarse de forma continua a otra fase no trivial sin eliminar en el proceso el *gap* entre las bandas.

Las fases topológicas no triviales se caracterizan por la aparición de estados electrónicos localizados en los bordes del material o los límites de fase cuya energía está el interior del *gap*. Dado que su existencia depende de propiedades globales del sistema, estos estados de borde son robustos frente a perturbaciones locales, lo que se conoce como protección topológica. Además, la separación en energía entre los estados permite suprimir los efectos térmicos.

Debido a la estabilidad de los estados protegidos topológicamente, podrían ser útiles para almacenar información cuántica. En efecto, una de las razones del auge de los superconductores topológicos durante las dos últimas décadas es su posible aplicación en computación cuántica.

Los estados de borde que aparecen en los superconductores topológicos son partículas que coinciden con su propia antipartícula o hueco y se conocen como modos de Majorana. Sus propiedades exóticas permiten no sólo almacenar información en forma de cúbits con altos tiempos de coherencia, sino también implementar puertas cuánticas, es decir, las operaciones básicas empleadas en computación cuántica.

Este texto se centra especialmente en los superconductores topológicos y las propiedades y aplicaciones en computación cuántica topológica de los modos de Majorana que albergan. Además, se estudia el modelo de cadena de Kitaev [1] para ilustrar el origen de las propiedades topológicas y la aparición de los modos de Majorana.

El modelo de Kitaev es un modelo sencillo de superconductor topológico unidimensional. Es un modelo basado en la aproximación de *tight-binding* que describe un sistema de fermiones sin spin en una cadena con emparejamiento superconductor. Pese a que no se trata de un modelo realista, permite realizar cálculos sin excesiva dificultad, lo que lo hace adecuado para una primera introducción a este tipo de sistemas.

El capítulo 2 presenta una introducción general a los materiales topológicos y su clasificación en base a simetrías del sistema. El capítulo 3 se centra en los superconductores topológicos y su posible aplicación en computación cuántica. Para ello se exponen diversas propiedades de los modos de Majorana. Finalmente, el capítulo 4 se dedica al estudio del modelo de Kitaev, comprobando analítica y numéricamente algunas de sus propiedades características.

Capítulo 2

Materiales topológicos

El objetivo de este capítulo es proporcionar una introducción a las características generales de los materiales topológicos.

En la sección 2.1 se define brevemente qué se conoce como material topológico y se introducen los dos tipos principales: los aislantes topológicos y los superconductores topológicos. En la sección 2.2 se explica como estos pueden clasificarse de forma unificada en 10 clases diferentes según sus simetrías fundamentales.

La sección 2.1 de este capítulo se basa en gran parte en el contenido encontrado en las dos primeras secciones de [2]. Se ha consultado [3] y [4] en relación a la clasificación en base a simetrías expuesta en la sección 2.2.

2.1. Introducción a los materiales topológicos

Se conocen como materiales topológicos aquellos que presentan distintas fases caracterizadas por el valor de un invariante topológico, es decir, una magnitud que se conserva bajo transformaciones continuas del hamiltoniano del sistema. En este contexto, en el que se estudian modelos desde el punto de vista de la teoría de bandas, se entiende como transformación continua aquella que, además, puede realizarse sin cerrar la banda prohibida o *gap* del espectro de una partícula y respetando ciertas simetrías del hamiltoniano.

A grandes rasgos, estos materiales pueden dividirse en aislantes topológicos y superconductores topológicos. En ambos casos, una de las propiedades fundamentales es la correspondencia volumen-borde. Dicha correspondencia relaciona la existencia de estados de borde localizados y que tienen una energía en el interior del *gap* con la fase topológica del volumen del sistema. De forma más general, estos estados localizados pueden aparecer en defectos topológicos, es decir, regiones en las que se produce un cambio del invariante topológico correspondiente. Dado que las perturbaciones que no cierran el *gap* del espectro y respetan las simetrías correspondientes no modifican la fase topológica y, por tanto, no pueden eliminar dichos estados, se dice que disfrutan de protección topológica.

2.1.1. Aislantes topológicos

Los materiales aislantes usuales se caracterizan por la separación energética entre las bandas de conducción y de valencia. Un caso extremo es aquel en el que los electrones sólo pueden ocupar sitios completamente separados entre sí. En principio, todos estos sistemas pueden deformarse de forma continua para dar lugar a dicho caso extremo y, por tanto, se consideran una fase trivial desde el punto de vista topológico.

Los aislantes topológicos, por el contrario, presentan fases no triviales. Esto significa que su hamiltoniano no puede transformarse de forma continua para dar lugar a la fase trivial descrita anteriormente.

Las fases topológicas no triviales mantienen el *gap* en el espectro y su carácter aislante en el volumen del sistema. Sin embargo, presentan estados de borde cuya energía está en el interior del *gap* que sí pueden permitir el transporte de carga [5].

2.1.2. Superconductores topológicos

Según la teoría BCS, en un material superconductor los electrones se emparejan dando lugar a cuasipartículas conocidas como pares de Cooper.

A la hora de describir el comportamiento de los electrones no emparejados pueden considerarse modelos efectivos que permiten la creación y destrucción de electrones por pares. Así, se tiene en cuenta el intercambio de partículas con el condensado de pares de Cooper. Como consecuencia, estos modelos efectivos no conservan el número de partículas pero sí su paridad.

Para estudiar los modelos efectivos de superconductividad se emplea el formalismo de Bogoliubov-de Gennes [6], el cuál duplica el número de grados de libertad del sistema al considerar partículas y huecos como objetos independientes.

Los superconductores topológicos se pueden tratar de manera totalmente análoga a los aislantes topológicos. Basta considerar el hamiltoniano del sistema en su forma de Bogoliubov-de Gennes. No obstante, debido a la redundancia al describir partículas y huecos, los estados localizados que surgen en los superconductores topológicos pueden no ser estados fermiónicos usuales, sino modos de Majorana.

2.2. Clasificación

Los modelos de aislantes y superconductores topológicos admiten una clasificación en 10 clases según su comportamiento ante tres tipos de simetría. En concreto, se consideran la simetría de inversión temporal, la simetría partícula-hueco y la simetría quirial.

Al considerar transformaciones continuas que respeten las simetrías correspondientes, la clase y la dimensión espacial del sistema determinan el tipo de invariante topológico que caracteriza las distintas fases. Pueden darse tres casos. En primer lugar, se tienen los sistemas que sólo presentan la fase trivial, por lo que el invariante topológico se puede considerar 0. En segundo lugar, se encuentran aquellos en los que se dan dos fases diferenciadas, trivial y no trivial, en cuyo caso se puede tomar un invariante topológico en \mathbb{Z}_2 . Finalmente, en el tercer caso se consideran sistemas con un número arbitrario de fases caracterizadas por un invariante topológico en \mathbb{Z} .

A continuación se resume en que consiste cada una de las simetrías al trabajar con el hamiltoniano en primera cuantización del sistema, \mathcal{H} . Para los superconductores, este hamiltoniano debe ser el de Bogoliubov-de Gennes.

La simetría de inversión temporal, como su nombre indica, trata la transformación $t \rightarrow -t$. El operador inversión temporal es en general $\mathcal{T} = U_{\mathcal{T}}\mathcal{K}$, donde $U_{\mathcal{T}}$ es una matriz unitaria y \mathcal{K} representa la conjugación compleja. Hay que tener en cuenta que si \mathcal{H} está expresado en términos del momento q , entonces \mathcal{K} también realiza el cambio $q \rightarrow -q$. El sistema tiene simetría de inversión temporal si existe tal $U_{\mathcal{T}}$ cumpliendo

$$\mathcal{T}\mathcal{H}\mathcal{T}^{-1} = U_{\mathcal{T}}\mathcal{H}^*U_{\mathcal{T}}^{\dagger} = \mathcal{H}.$$

Cuando esto ocurre, el operador de inversión temporal puede cumplir $\mathcal{T}^2 = 1$ o $\mathcal{T}^2 = -1$ dando lugar a clases diferentes en la clasificación topológica.

La simetría partícula-hueco considera el intercambio de los roles de los operadores de creación y destrucción de fermiones, es decir, de partículas y huecos. El operador correspondiente es en general, de la misma forma que en el caso anterior, $\mathcal{C} = U_{\mathcal{C}}\mathcal{K}$. Por tanto, el sistema tiene simetría partícula-hueco si existe $U_{\mathcal{C}}$ unitaria tal que

$$\mathcal{C}\mathcal{H}\mathcal{C}^{-1} = U_{\mathcal{C}}\mathcal{H}^*U_{\mathcal{C}}^{\dagger} = -\mathcal{H}.$$

De nuevo, puede ocurrir que $\mathcal{C}^2 = 1$ o $\mathcal{C}^2 = -1$.

Por último, la simetría quirral viene dada por un operador unitario \mathcal{S} tal que

$$\mathcal{S}\mathcal{H}\mathcal{S}^{-1} = -\mathcal{H}.$$

Si el sistema tiene simetría partícula-hueco y de inversión temporal, entonces tiene simetría quirral con $\mathcal{S} = \mathcal{T}\mathcal{C}$. De hecho, si se cumplen dos de las simetrías entonces lo hacen todas. Si el sistema no tiene ninguna de las dos simetrías anteriores, entonces la simetría quirral puede estar presente o no. Por otro lado, en caso de existir, siempre se puede escoger la fase de \mathcal{S} para que $\mathcal{S}^2 = 1$.

Las diez formas posibles de combinar estas tres simetrías dan lugar a las diez clases de la clasificación topológica. Estas pueden organizarse en una tabla en la que se asigna a cada clase y dimensión espacial d un tipo de invariante topológico.

Clase	\mathcal{T}	\mathcal{C}	\mathcal{S}	d							
				1	2	3	4	5	6	7	8
A	0	0	0	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}
AIII	0	0	1	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0
AI	1	0	0	0	0	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}
BDI	1	1	1	\mathbb{Z}	0	0	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2
D	0	1	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}_2
DIII	-1	1	1	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0	0	\mathbb{Z}	0
AII	-1	0	0	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0	0	\mathbb{Z}
CII	-1	-1	1	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0	0
C	0	-1	0	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0
CI	1	-1	1	0	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0

Tabla 2.1: Tabla que resume las 10 clases de hamiltoniano posibles según las simetrías \mathcal{T} , \mathcal{C} y \mathcal{S} . En las columnas referentes a dichas simetrías, se indica el valor de \mathcal{T}^2 , \mathcal{C}^2 y \mathcal{S}^2 , o 0 en caso de no darse la simetría correspondiente. En la región de la derecha se indica el tipo de invariante topológico según la dimensión.

Nótese que el hamiltoniano no determina de forma única la clasificación, sino que esta también depende de qué simetrías son conservadas en las transformaciones continuas a considerar. Es decir, un hamiltoniano que presente una simetría concreta puede verse como una instancia de una clase que no esté caracterizada por dicha simetría. En ese caso, la simetría en cuestión estaría apareciendo de manera accidental.

Capítulo 3

Modos de Majorana en superconductores topológicos

A continuación se ofrece una introducción general a los modos de Majorana que aparecen como cuasipartículas localizadas en los superconductores topológicos.

En la sección 3.1 se definen estas cuasipartículas, se explica su origen y se introducen sus propiedades básicas. En la sección 3.2 se muestra cómo los modos de Majorana que aparecen en los superconductores topológicos dan lugar a estadística no abeliana. Finalmente, en la sección 3.3 se ejemplifica como podrían emplearse en el campo de la computación cuántica para almacenar información e implementar puertas cuánticas protegidas topológicamente a partir de sus propiedades de intercambio.

Las principales fuentes bibliográficas empleadas en este capítulo son [7], [8] y [9].

3.1. Modos de Majorana

Los fermiones de Majorana son partículas que satisfacen la ecuación de Dirac y que son su propia antipartícula. Esta condición es equivalente a que puedan ser representadas por un campo real. Por ello, su evolución necesariamente está gobernada por un hamiltoniano puramente imaginario.

Los fermiones de Majorana fueron introducidos por Ettore Majorana como una alternativa a los fermiones de Dirac, que difieren de su antipartícula, para describir partículas sin carga.

En el ámbito de la física de partículas es conocido que, excepto los neutrinos, el resto de fermiones elementales son de Dirac. En el caso de los neutrinos, su naturaleza aún no ha sido confirmada experimentalmente y sigue siendo objeto de estudio.

En el contexto de la materia condensada aparecen los modos de Majorana, cuasipartículas análogas en superconductores topológicos. En este caso, se consideran teorías efectivas donde el condensado superconductor actúa como vacío y los respectivos huecos como antipartículas. Dichas cuasipartículas se localizan en defectos topológicos, por ejemplo, vórtices en sistemas bidimensionales o la frontera entre distintas fases topológicas en sistemas unidimensionales.

La aparición de modos de Majorana en estos sistemas puede explicarse de forma intuitiva como consecuencia de combinar los estados localizados que aparecen en el *gap*, característicos de las fases topológicas, con la naturaleza de las excitaciones en los sistemas superconductores. Dichas excitaciones consisten en superposiciones de partículas y huecos. Por la simetría partícula-hueco, a cada excitación con energía positiva le corresponde una excitación con energía negativa. Considérese el caso en que dichas excitaciones se encuentran en el centro del *gap* con energía cero. En ese caso, ambas deben coincidir, siendo partícula y hueco al mismo tiempo. Además, esto implica que la contribución de partículas y huecos a la superposición se iguala, por lo que se tratan de excitaciones sin carga. En definitiva, se trata de un modo de Majorana de energía cero.

Matemáticamente, los modos de Majorana se describen mediante operadores c_l que cumplen

$$c_l^\dagger = c_l, \quad \{c_l, c_m\} = 2\delta_{lm}.$$

Al igual que los operadores fermiónicos usuales, dos operadores de Majorana diferentes anticonmutan. Sin embargo, en este caso es posible aplicar un mismo operador dos veces volviendo al estado original debido a que $c_l^2 = \{c_l, c_l\}/2 = 1$. Una consecuencia directa de esta igualdad es que no es posible definir un operador número que determine la ocupación de un modo de Majorana.

Por el contrario, los modos de Majorana pueden tratarse como medio fermión. De la misma manera que un número complejo puede descomponerse en sus partes real e imaginaria, un operador fermiónico a da lugar a dos operadores de Majorana mediante la relación

$$\begin{aligned} c_1 &= a^\dagger + a, \\ c_2 &= i(a^\dagger - a). \end{aligned}$$

Asimismo, dados dos operadores de Majorana c_1 y c_2 se puede construir un operador fermiónico mediante la relación inversa, es decir,

$$a = \frac{1}{2}(c_1 + ic_2).$$

A causa de esta correspondencia los modos de Majorana deben aparecer por parejas en un sistema cerrado.

Dado que de acuerdo con el párrafo anterior cualquier fermión puede descomponerse, al menos formalmente, en dos modos de Majorana, sería razonable plantearse por qué considerar superconductores topológicos en lugar de cualquier otro sistema fermiónico. Como se verá a continuación, la importancia radica en que se trate de modos localizados, separados entre sí y de energía cero. Esto no ocurre en los materiales usuales.

Considérense dos modos de Majorana de energía cero, c_1 y c_2 , localizados y separados espacialmente entre sí. Entonces, se puede construir un operador fermiónico a mediante el procedimiento descrito anteriormente. Pese a que la ocupación de los modos de Majorana no está determinada por separado, una vez emparejados se tiene el operador número

$$n = a^\dagger a = \frac{1}{2}(1 + ic_1 c_2).$$

Por tanto, n determina la ocupación de un estado fermiónico no localizado conocido como estado de Majorana. Nótese que el estado ocupado se corresponde con $ic_1 c_2 = 1$, mientras

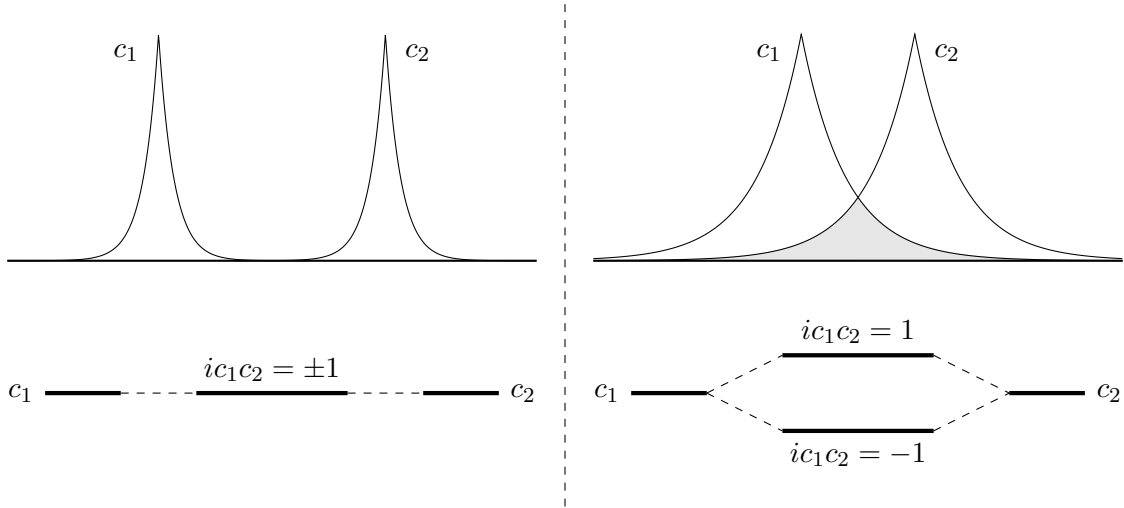


Figura 3.1: Distribución espacial de dos modos de Majorana c_1 y c_2 y la energía de los estados fermiónicos asociados. A la izquierda están separados y desacoplados, por lo que dan lugar a un estado de Majorana de energía cero y, por tanto, a la degeneración del estado fundamental. A la derecha ambos modos se superponen e hibridan, separando la energía de los estados.

que el desocupado con $ic_1c_2 = -1$. Dado que c_1 y c_2 son modos sin carga y no se superponen espacialmente, el estado de Majorana asociado también se trata de una excitación sin carga. Además, es robusto frente a perturbaciones locales ya que para ello tendrían que afectar a ambos modos de Majorana al mismo tiempo. De hecho, cada c_i no puede interactuar con el entorno por sí mismo, pues no representa un objeto físico sino parte de un fermión. Por último, su energía es nula puesto que lo es la de los modos de Majorana. Esto causa la degeneración del estado fundamental del sistema puesto que el estado de Majorana puede estar ocupado o desocupado sin modificar la energía.

Los estados de Majorana con energía cero, sin embargo, no suelen existir de forma exacta. Dado que los sistemas físicos reales tienen un tamaño finito, dos modos de Majorana no pueden estar completamente separados, sino que presentan cierto solapamiento. Por tanto, ambos modos se hibridan dando lugar a estados con energía de hibridación $\pm E_M$ y rompiendo así la degeneración del estado fundamental. Esto puede expresarse mediante una interacción efectiva entre los modos dada por $H_{\text{eff}} = iE_M c_1 c_2 = 2E_M(n - 1/2)$.

Como se mostrará más adelante, la degeneración del estado fundamental es una característica necesaria para asegurar la estadística no abeliana de los modos de Majorana y sus posibles aplicaciones en el campo de la computación cuántica. Por suerte, al igual que el solapamiento, la energía de hibridación suele decaer de forma exponencial con la

distancia entre los modos. Siempre que la energía del *gap* del espectro de excitación sea suficientemente grande en comparación a la energía de hibridación, se puede considerar que hay degeneración de forma aproximada. En efecto, si se hace evolucionar el sistema de forma adiabática, los dos estados de baja energía no se mezclan con el resto de estados debido a la diferencia de energía. Por tanto, se puede restringir la evolución del sistema al subespacio de estados fundamentales. Asimismo, tampoco se mezclan los estados mientras la temperatura y las perturbaciones sean pequeñas en comparación con el *gap*.

Para concluir esta sección, nótese que la discusión anterior puede extenderse a sistemas con cualquier número par de modos de Majorana desacoplados entre sí. De esta forma, $2N$ modos de Majorana darían lugar a N estados de Majorana y la dimensión del subespacio fundamental degenerado sería 2^N .

3.2. Modos de Majorana como anyones no abelianos

En un sistema constituido por partículas idénticas en un mundo tridimensional, el intercambio de dos partículas deja invariante el estado global del sistema salvo una fase. Dicha fase es $+1$ para bosones y -1 para fermiones. En ambos casos, dos intercambios consecutivos devuelven al sistema al estado inicial.

En dos dimensiones, en cambio, el comportamiento de un sistema bajo el intercambio de partículas idénticas no está restringido únicamente a esos dos casos. Las partículas que no son fermiones ni bosones desde el punto de vista del intercambio se conocen como anyones.

Los modos de Majorana que aparecen asociados a defectos en los superconductores topológicos se comportan como anyones no abelianos. Esto significa que el resultado de varios intercambios consecutivos depende del orden en que se realicen. Esto es posible debido a que el estado fundamental está degenerado. Ciertamente, si el subespacio fundamental es unidimensional cualquier transformación tal que este sea invariante consistiría únicamente en modificar la fase de los estados.

Considérese un sistema con $2N$ modos de Majorana de energía cero en el interior del *gap*. Si se hace evolucionar el sistema de forma adiabática a partir de un estado fundamental intercambiando dos modos sin hacer que se acoplen, lo cual se puede suponer que se realiza sin afectar al resto de modos al estar alejados espacialmente, el sistema no puede abandonar el subespacio fundamental debido a que el resto de estados se encuentran

separados energéticamente. Debido a la degeneración de dicho subespacio, el intercambio se describe en general por una matriz unitaria de dimensión 2^N actuando sobre el estado inicial. Dado que dichas matrices no conmutan en general, esto puede dar origen a la estadística no abeliana. No obstante, debido a que la paridad del número de fermiones se conserva en los superconductores topológicos, la operación de intercambio no mezcla estados de distinta paridad. Esto requiere que $N > 1$.

Para estudiar como actúa la operación de intercambio de forma explícita se consideran dos modos de Majorana c_l y $c_{l'}$. Si $U_{ll'}$ es el operador unitario que describe el intercambio de dichos modos de Majorana, necesariamente debe llevar el uno al otro excepto por una fase, es decir,

$$\begin{aligned} U_{ll'} c_l U_{ll'}^\dagger &= s_l c_{l'}, \\ U_{ll'} c_{l'} U_{ll'}^\dagger &= s_{l'} c_l, \end{aligned}$$

donde s_l y $s_{l'}$ son fases aún por determinar.

Dado que los operadores de Majorana son idempotentes, tomando el cuadrado de estas expresiones se obtiene $s_l^2 = s_{l'}^2 = 1$. Por otro lado, debido a que la paridad fermiónica del sistema completo debe conservarse y el resto de modos no son afectados, la ocupación $n_{ll'} = (1 + i c_l c_{l'})/2$ del estado de Majorana asociado a c_l y $c_{l'}$ también se conserva. Por tanto,

$$U_{ll'} n_{ll'} U_{ll'}^\dagger = n_{ll'} \implies \frac{1}{2} (1 - i s_l s_{l'} c_l c_{l'}) = \frac{1}{2} (1 + i c_l c_{l'}),$$

lo que implica que $s_l s_{l'} = -1$. Se concluye entonces que $s_l = 1$ y $s_{l'} = -1$, o bien $s_l = -1$ y $s_{l'} = 1$.

Se puede suponer sin pérdida de generalidad que $s_l = -s_{l'} = 1$. Así, la elección opuesta está descrita por $U_{ll'}$. Nótese que esto implica que existen dos formas distintas de realizar el intercambio, las cuales dependen de la implementación específica.

En resumen, $U_{ll'}$ da lugar a la siguiente transformación:

$$\begin{aligned} c_l &\rightarrow c_{l'}, \\ c_{l'} &\rightarrow -c_l, \\ c_m &\rightarrow c_m, \end{aligned}$$

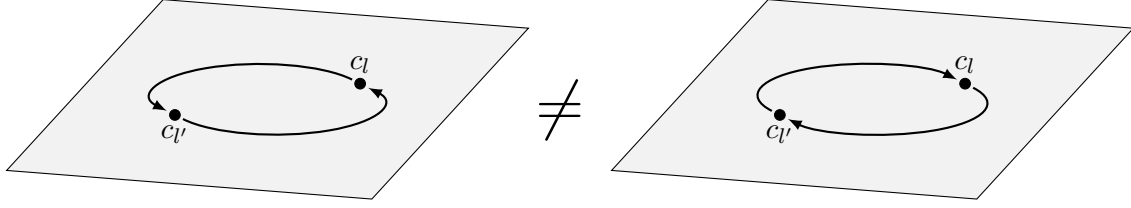


Figura 3.2: Los operadores de intercambio de modos de Majorana no son iguales a sus inversos. Por tanto, si dicho intercambio se realiza modificando las posiciones de los modos de forma continua, el sentido del giro influye en el resultado final. Además, sólo existen estas dos opciones siempre que se imponga no afectar al resto de modos y respetar la paridad global.

con $l \neq m \neq l'$. Se puede comprobar que esto se cumple tomando

$$U_W = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + c_l c_{l'}).$$

Una expresión alternativa que resulta de utilidad es

$$U_W = e^{\frac{\pi}{4} c_l c_{l'}}.$$

Para comprobar su validez basta tener en cuenta que $(c_l c_{l'})^2 = -1$. Entonces,

$$\begin{aligned} e^{\frac{\pi}{4} c_l c_{l'}} &= 1 + \frac{\pi}{4} c_l c_{l'} + \frac{1}{2!} \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 (c_l c_{l'})^2 + \dots \\ &= \left[1 - \frac{1}{2!} \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\pi}{4}\right)^4 + \dots\right] + \left[\frac{\pi}{4} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\pi}{4}\right)^3 + \frac{1}{5!} \left(\frac{\pi}{4}\right)^5 + \dots\right] c_l c_{l'} \\ &= \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) + \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) c_l c_{l'} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + c_l c_{l'}) \end{aligned}$$

Así, es evidente que el operador inverso coincide con la otra forma de realizar el intercambio:

$$U_W^{-1} = e^{-\frac{\pi}{4} c_l c_{l'}} = e^{\frac{\pi}{4} c_{l'} c_l} = U_{W'}.$$

Por tanto, U_W no es idempotente. De hecho, es necesario aplicarlo 8 veces para volver al estado inicial.

Para ver que estos operadores no conmutan es necesario incluir un tercer modo de Majorana c_m distinto de c_l y $c_{l'}$. Entonces,

$$[U_{lm}, U_{ml'}] = \frac{1}{2} [c_l c_m, c_m c_{l'}] = \frac{1}{2} (c_l c_m c_m c_{l'} - c_m c_{l'} c_l c_m) = c_l c_m c_m c_{l'} = c_l c_{l'}.$$

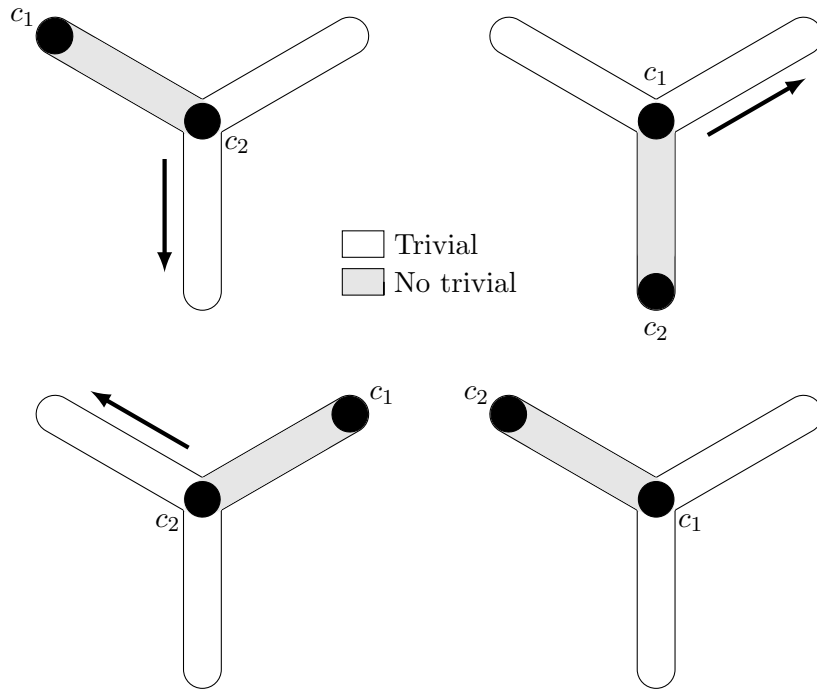


Figura 3.3: Método para intercambiar dos modos de Majorana en una junta triple de hilos. Inicialmente sólo uno de los hilos se encuentra en fase no trivial y los modos se encuentran en sus extremos. Desplazando los límites de fase se llevan ambos modos a otro de los hilos, lo que resulta en un giro de 60° . Repitiendo el procedimiento tres veces se intercambian los modos respecto al estado inicial.

Por tanto, si se hacen intercambios de 3 o más modos de Majorana, es necesario tener en cuenta el orden.

En caso de considerar un sistema unidimensional el tratamiento anterior deja de ser válido. Esto es debido a que no es posible intercambiar la posición de dos modos de Majorana de forma continua sin que se superpongan en el proceso. No obstante, este obstáculo se puede salvar si se considera una unión de sistemas unidimensionales que dan lugar a un sistema de dimensión mayor.

Un ejemplo sencillo que demuestra que sigue siendo posible definir el intercambio en ese caso se trata de tres hilos unidos por uno de sus extremos formando una junta triple. Si uno de los hilos se encuentra en fase no trivial mientras que el resto del sistema se encuentra en fase trivial, aparecen dos modos de Majorana en sus extremos.

Modificando los parámetros del sistema se puede desplazar la región en fase no trivial hacia otro de los hilos, moviendo a los modos en el proceso. Tras esto, el modo que se encontraba en la junta central está en el extremo del segundo hilo y el que se encontraba en el extremo del primer hilo está en la junta central. Repitiéndolo dos veces más se logra

devolver ambos modos de Majorana al primer hilo tras realizar un giro de media vuelta, lo cuál resulta en un intercambio en la posición de ambos respecto al estado inicial. Este procedimiento se ilustra en la figura 3.3.

Pese a que el procedimiento anterior prueba que es posible llevar a cabo el intercambio de modos de Majorana en una junta triple, es necesario que ambos modos se encuentren en los extremos de una misma región en fase no trivial. No obstante, existen otros mecanismos que permiten implementar los intercambios sin necesidad de desplazar los modos espacialmente. Estos se basan en modificar los acoplamientos entre distintos modos en una secuencia específica o en medir la paridad fermiónica en las diferentes regiones.

3.3. Computación cuántica topológica

La principal aplicación potencial de los superconductores topológicos es su uso como soporte físico para cúbits en computación cuántica. Los estados de Majorana pueden emplearse para almacenar información de forma robusta frente a perturbaciones gracias a la protección topológica. Además, la estadística no abeliana permite implementar distintas operaciones mediante intercambios de modos de Majorana.

Un cúbit es la unidad mínima de información con la que se trabaja en computación cuántica. Se trata de un sistema cuántico que puede encontrarse en una superposición de dos estados ortonormales $|0\rangle$ y $|1\rangle$, de forma que un estado genérico se expresa como

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

El estado de un cúbit se suele representar, salvo una fase global, como un punto en la esfera de Bloch. Esta representación consiste en asignar coordenadas esféricas al estado de forma que el ángulo polar θ describe la relación entre $|\alpha|$ y $|\beta|$ y el ángulo azimutal ϕ es la diferencia de fase entre α y β . En concreto,

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle.$$

Las operaciones básicas sobre cúbits se conocen como puertas cuánticas y son análogas a las puertas lógicas clásicas. Se tratan de transformaciones unitarias que afectan a un cierto conjunto de cúbits, por lo que se pueden representar mediante matrices unitarias

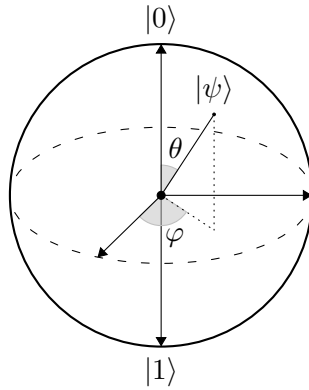


Figura 3.4: Visualización de un estado genérico de un cúbit empleando la representación de la esfera de Bloch.

fijando una cierta base.

Entre las puertas cuánticas que actúan sobre un único cúbit se encuentran las puertas de Pauli X , Y y Z . Estas dan lugar a una rotación de ángulo π sobre el eje correspondiente en la esfera de Bloch. Su nombre hace referencia a que en la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ se representan por las respectivas matrices de Pauli. La puerta X también se conoce como puerta NOT ya que, de forma análoga a la puerta lógica NOT clásica, intercambia $|0\rangle$ y $|1\rangle$.

Otras puertas cuánticas sobre un sólo cúbit de interés son las puertas H y T . La puerta H o de Hadamard implementa una rotación de ángulo $\pi/2$ sobre el eje y seguida de otra de ángulo π sobre el eje x . Suele expresarse como

$$H = \frac{1}{\sqrt{i}} X \sqrt{Y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Por otro lado, la puerta T desplaza $\pi/4$ la fase de la componente $|1\rangle$. Es decir, se trata de una rotación de ángulo $\pi/4$ sobre el eje z . De forma matricial:

$$T = \sqrt[4]{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix}.$$

Respecto a las puertas que actúan sobre dos cúbits, destacan las puertas controladas. Estas actúan como una puerta de un sólo cúbit sobre uno de los dos, llamado cúbit objetivo, si y sólo si el otro, llamado cúbit de control, se encuentra en el estado $|1\rangle$.

En concreto, la puerta $C(X)$, también llamada CNOT, invierte el valor del cúbit objetivo si y sólo si el cúbit de control se encuentra en el estado $|1\rangle$. Si \mathcal{H}_{con} y \mathcal{H}_{obj} son los espacios

de Hilbert correspondientes a los cúbit de control y objetivo, respectivamente, entonces la puerta $C(X)$ actúa sobre el producto $\mathcal{H}_{\text{con}} \otimes \mathcal{H}_{\text{obj}}$ como

$$C(X) = (|0\rangle\langle 0|) \otimes 1 + (|1\rangle\langle 1|) \otimes X.$$

En un sistema con un único cúbit se puede aproximar cualquier puerta cuántica con precisión arbitraria mediante la aplicación sucesiva de puertas T y H , salvo una fase. Este comportamiento puede extenderse a un mayor número de cúbits al añadir las puertas $C(X)$. Por tanto, se dice que estas tres puertas son un ejemplo de conjunto de puertas cuánticas universales.

Un estado de Majorana constituye un cúbit al poder estar ocupado o desocupado. Sin embargo, dado que la paridad fermiónica debe conservarse, no es posible implementar puertas lógicas en este sistema.

Para construir un cúbit computacional a partir de modos de Majorana es necesario considerar al menos 4 de ellos, denotados por c_1, c_2, c_3 y c_4 . Se pueden agrupar de dos en dos para dar lugar a dos estados de Majorana. Los estados fundamentales del sistema pueden etiquetarse según los números de ocupación correspondientes como $|n_{12}n_{34}\rangle$. Basta entonces considerar el cúbit formado por dos estados de la misma paridad.

En lo que sigue, se considera el cúbit formado por los estados de paridad par. Así, se puede tomar

$$|0\rangle = |00\rangle, \quad |1\rangle = |11\rangle.$$

También se podría proceder de forma análoga con los estados de paridad impar.

Considerando únicamente el subespacio generado por $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, se puede comprobar calculando los elementos de matriz explícitamente que

$$\begin{aligned} -ic_2c_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x, \\ ic_1c_3 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y, \\ -ic_1c_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z. \end{aligned}$$

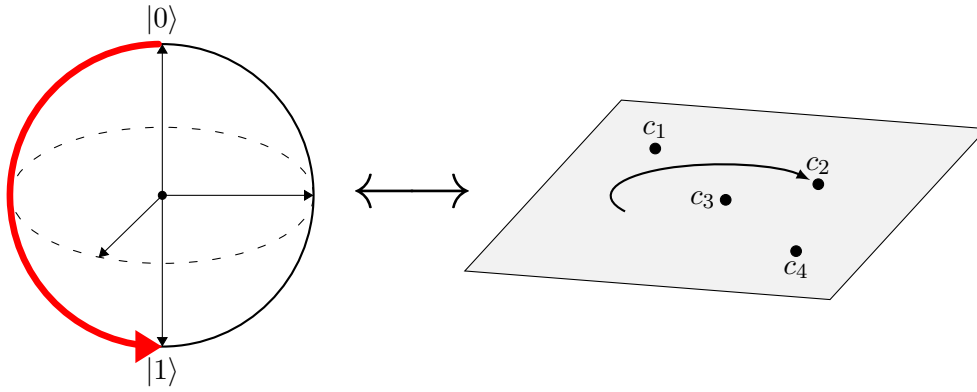


Figura 3.5: Posible implementación de la puerta X , la cual consiste en una rotación de ángulo π alrededor de dicho eje en la esfera de Bloch, mediante intercambios de modos de Majorana. Según el criterio escogido, esta equivale, salvo una fase global, a intercambiar dos veces consecutivas los modos c_2 y c_3 . Como aparece representado en el diagrama de la derecha, esto es lo mismo que hacer que c_2 dé una vuelta completa alrededor de c_3 sin rodear al resto de modos.

Se tiene entonces, por ejemplo, que

$$U_{23}^2 = e^{\frac{\pi}{2} c_2 c_3} = e^{i \frac{\pi}{2} \sigma_x} = i \sigma_x.$$

Realizando el cálculo análogo en los otros dos casos, se deduce que las puertas cuánticas X , Y y Z se pueden implementar como intercambios de los modos de Majorana de la siguiente forma:

$$X = -i U_{23}^2,$$

$$Y = i U_{13}^2,$$

$$Z = -i U_{12}^2.$$

A partir de estas expresiones, la puerta de Hadamard puede expresarse como

$$H = -i U_{23}^2 U_{13}.$$

Además, la puerta $C(X)$ también puede implementarse con protección topológica, con ayuda de un tercer cúbit auxiliar, combinando operaciones de intercambio y medidas de la paridad fermiónica de ciertos estados.

Sin embargo, la puerta T , que completaría el conjunto de puertas universales, no puede expresarse mediante los operadores de intercambio. Para implementar dicha operación, es necesario recurrir a procesos no protegidos topológicamente. Por ejemplo, los modos

c_1 y c_2 pueden acercarse provocando su hibridación. Si E_M es su energía de hibridación, entonces tras un tiempo t el estado $|0\rangle$ adquiere una fase $e^{iE_M t}$ mientras que el estado $|1\rangle$ adquiere una fase $e^{-iE_M t}$. Así, ajustando el tiempo de la evolución se puede, en principio, implementar la puerta T salvo una fase global.

Un paso fundamental al implementar algoritmos en un ordenador cuántico es la medida del estado del sistema. No obstante, las propiedades que confieren protección topológica a los modos de Majorana de energía cero también dificultan su medición.

Entre los diversos métodos para la lectura del estado de un cúbit se encuentra la fusión de los modos de Majorana que lo forman. Al contrario que otras propuestas, este fenómeno puede explicarse sin recurrir a las características particulares del sistema que albergue a los modos de Majorana.

La fusión de dos modos consiste en acercarlos adiabáticamente provocando su hibridación. Entonces, el estado de Majorana correspondiente da lugar a un fermión o un hueco, según la ocupación inicial. Pese a que el estado de Majorana original tiene energía y carga nulas, el fermión resultante sí se trata de una partícula cargada y tiene asociada una energía de hibridación finita. Por tanto, dicho fermión puede, en principio, detectarse, proporcionando así una medida del estado inicial.

La fusión de modos de Majorana no sólo puede emplearse a la hora de leer el estado de un cúbit. De hecho, una alternativa a la computación cuántica topológica basada en operaciones intercambios consiste en implementar las distintas puertas mediante fusión [7].

Capítulo 4

Modelo de Kitaev

A lo largo de este capítulo se estudian las propiedades topológicas y la aparición de modos de Majorana desacoplados en el modelo de cadena de Kitaev.

En la sección 4.1 se introduce brevemente el modelo a tratar. Le sigue la sección 4.2, donde se obtiene la relación de dispersión con condiciones de contorno periódicas y se establecen las distintas fases topológicas a partir de las propiedades del volumen. En la sección 4.3 se estudian las propiedades de la cadena finita. En concreto, se comprueba analítica y numéricamente la aparición de modos de Majorana desacoplados en la fase no trivial, un caso concreto de la correspondencia volumen-borde. En la sección 4.4 se exploran los efectos de extender el modelo a segundos vecinos sobre las propiedades topológicas, incluyendo una nueva fase topológica no trivial. Por último, en 4.5 se ilustra la fusión de los modos de Majorana de la cadena de Kitaev mediante una simulación numérica.

Todos los resultados numéricos presentados en este capítulo se han obtenido mediante código escrito en Python. En las secciones 4.2 y 4.3 se desarrollan con detalle los resultados establecidos en [1] y [8]. Los cálculos presentados en la sección 4.4 provienen de trabajo propio. No obstante, en [10] se estudia la cadena extendida a un número arbitrario de vecinos cuando los acoplamientos decaen exponencialmente. Por último, la evolución temporal empleada en la simulación de la sección 4.5 se basa en [11], donde se realiza un estudio más extenso de la fusión de modos de Majorana mediante simulación numérica.

4.1. Descripción del modelo

El modelo de cadena de Kitaev fue propuesto por Alexei Kitaev en 2001 para mostrar la posible existencia de modos de Majorana desacoplados y protegidos topológicamente en un sistema unidimensional. Consiste en una cadena de *tight-binding* de fermiones sin spin con emparejamiento superconductor. Así, se trata del modelo más sencillo de superconductor topológico.

El hamiltoniano del modelo de Kitaev se escribe como

$$H = \sum_j -\mu \left(a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \right) - w \left(a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j \right) + \Delta a_j a_{j+1} + \Delta^* a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger,$$

donde μ es el potencial químico, w el parámetro de salto entre sitios y Δ un parámetro que describe de forma efectiva el emparejamiento superconductor. En general, $\Delta = |\Delta|e^{i\theta}$ es un número complejo. Para simplificar el tratamiento, la fase θ puede eliminarse mediante la transformación $a_j \rightarrow e^{-i\theta/2}a_j$. Como resultado se obtiene:

$$H = \sum_j -\mu \left(a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \right) - w \left(a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j \right) + |\Delta| \left(a_j a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger \right). \quad (4.1)$$

Este hamiltoniano no conserva el número total de partículas, aunque sí lo hace su paridad. Esto es debido al término $|\Delta| \left(a_j a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger \right)$ que describe la creación y destrucción de pares de partículas en sitios contiguos.

Como se desarrolla en las secciones siguientes, el modelo de Kitaev se encuentra en una fase topológica no trivial siempre que $\Delta \neq 0$ y $|\mu| < |2w|$. En ese caso, si el sistema es suficientemente grande, aparece un modo de Majorana desacoplado localizado en cada extremo de la cadena.

4.2. Cadena de Kitaev cerrada.

El objetivo principal de esta sección es obtener la relación de dispersión en el caso de una cadena de Kitaev cerrada con condiciones de contorno periódicas. Siguiendo el procedimiento habitual, se diagonaliza el hamiltoniano en el espacio de momentos. Además, se verifica la relación entre las fases de la cadena finita y los invariantes topológicos asociados al modelo.

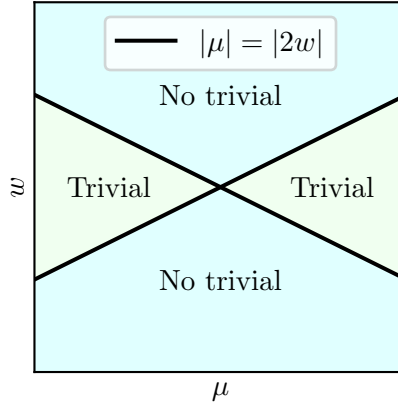


Figura 4.1: Diagrama de fases de la cadena de Kitaev suponiendo que $|\Delta| > 0$. Las transiciones de fase se dan cuando el *gap* se cierra, es decir, cuando $|\mu| = |2w|$. El sistema se encuentra en fase no trivial cuando $|\mu| < |2w|$.

4.2.1. Relación de dispersión

Se considera una cadena de Kitaev periódica constituida por N sitios. Se introducen los operadores de creación y destrucción en el espacio de momentos mediante la transformación dada por

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqj} a_q,$$

$$a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{-iqj} a_q^\dagger,$$

donde a_q, a_q^\dagger cumplen las relaciones de conmutación fermiónicas. Para determinar los valores de q permitidos basta imponer $a_j = a_{j+N}$. De esta forma,

$$q = \frac{2\pi}{N} m, \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Debido a la periodicidad, sólo hay N operadores independientes. Por tanto, se pueden restringir los valores al intervalo $q \in [-\pi, \pi)$.

A continuación se expresa cada uno de los términos de (4.1) en función de los nuevos operadores. Para ello, se emplea la relación

$$\delta_{qq'} = \frac{1}{N} \sum_j e^{i(q-q')j},$$

donde δ denota la delta de Kronecker. Se tiene que

$$\sum_j a_j^\dagger a_j = \frac{1}{N} \sum_{j,q,q'} e^{i(q-q')j} a_{q'}^\dagger a_q = \sum_q a_q^\dagger a_q = \sum_{q>0} a_q^\dagger a_q - a_{-q} a_{-q}^\dagger + \dots, \quad (4.2)$$

$$\sum_j a_j^\dagger a_{j+1} = \frac{1}{N} \sum_{j,q,q'} e^{i(q-q')j} e^{iq} a_{q'}^\dagger a_q = \sum_q e^{iq} a_q^\dagger a_q = \sum_{q>0} e^{iq} a_q^\dagger a_q - e^{-iq} a_{-q} a_{-q}^\dagger + \dots \quad (4.3)$$

$$\sum_j a_j a_{j+1} = \frac{1}{N} \sum_{j,q,q'} e^{i(q+q')j} e^{iq} a_{q'} a_q = \sum_q e^{iq} a_{-q} a_q = \sum_{q>0} e^{iq} a_{-q} a_q - e^{-iq} a_{-q} a_q, \quad (4.4)$$

donde, para simplificar las expresiones, se omiten las constantes y los términos correspondientes a $q = 0$ y, cuando N es par, $q = -\pi$. Tomando el conjugado hermítico de (4.3) y (4.4) se deduce que

$$\begin{aligned} \sum_j a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j &= \sum_{q>0} e^{iq} a_q^\dagger a_q - e^{-iq} a_{-q} a_{-q}^\dagger + e^{-iq} a_q^\dagger a_q - e^{iq} a_{-q} a_{-q}^\dagger + \dots \\ &= 2 \sum_{q>0} \cos(q) a_q^\dagger a_q - \cos(q) a_{-q} a_{-q}^\dagger + \dots, \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} \sum_j a_j a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger &= \sum_{q>0} e^{iq} a_{-q} a_q - e^{-iq} a_{-q} a_q + e^{-iq} a_q^\dagger a_{-q}^\dagger - e^{iq} a_q^\dagger a_{-q}^\dagger + \dots \\ &= 2i \sum_{q>0} \sin(q) a_{-q} a_q - \sin(q) a_q^\dagger a_{-q}^\dagger \end{aligned} \quad (4.6)$$

Teniendo en cuenta (4.2), (4.5) y (4.6), el hamiltoniano (4.1) se puede reescribir en forma matricial como

$$\begin{aligned} H &= \sum_{q>0} \underbrace{\begin{pmatrix} a_q^\dagger & a_{-q} \end{pmatrix}}_{\phi_q^\dagger} \underbrace{\begin{pmatrix} -\mu - 2w \cos(q) & -2i|\Delta| \sin(q) \\ 2i|\Delta| \sin(q) & \mu + 2w \cos(q) \end{pmatrix}}_{H_q} \underbrace{\begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix}}_{\phi_q} + \dots \\ &= \sum_{q>0} \phi_q^\dagger H_q \phi_q + \dots \end{aligned}$$

Esta manera de expresar el hamiltoniano se conoce como formalismo de Bogoliubov-de Gennes. Es inmediato obtener que los autovalores de H_q son $\pm\epsilon_q$, donde

$$\epsilon_q = \sqrt{(u + 2w \cos(q))^2 + 4|\Delta|^2 \sin^2(q)}. \quad (4.7)$$

Puesto que H_q es una matrix hermítica, existe una matrix unitaria U tal que

$$H = \sum_{q>0} (U \phi_q)^\dagger \begin{pmatrix} \epsilon_q & 0 \\ 0 & -\epsilon_q \end{pmatrix} U \phi_q + \dots = \sum_{q>0} \begin{pmatrix} b_q^\dagger & b_{-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_q & 0 \\ 0 & -\epsilon_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_q \\ b_{-q}^\dagger \end{pmatrix} + \dots,$$

donde para $q > 0$ los operadores b_q, b_{-q} están definidos por

$$\begin{pmatrix} b_q \\ b_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix}.$$

Llegados a este punto, es posible fijar

$$b_0 = \begin{cases} a_0 & \mu + 2w \leq 0, \\ a_0^\dagger & \mu + 2w > 0, \end{cases}$$

$$b_{-\pi} = \begin{cases} a_{-\pi} & \mu - 2w \leq 0, \\ a_{-\pi}^\dagger & \mu - 2w > 0. \end{cases}$$

De esta forma b_q^\dagger y b_q son nuevos operadores de creación y destrucción que siguen las reglas de anticonmutación fermiónicas. Es evidente que si $|q| \neq |q'|$ entonces $\{b_q, b_{q'}\} = \{b_q, b_{q'}^\dagger\} = 0$. Por otra parte, si $|q| = |q'|$, el resultado es cierto ya que las filas de U son vectores ortonormales de \mathbb{C}^2 . Estos nuevos operadores representan cuasipartículas que mezclan partículas y huecos, conocidas en la literatura como cuasipartículas de Bogoliubov.

Despreciando las constantes y reintroduciendo los términos con $q = 0$ y $q = -\pi$ al sumatorio, el hamiltoniano diagonalizado se escribe finalmente como

$$H = \sum_{q>0} \epsilon_q b_q^\dagger b_q - \epsilon_q b_{-q} b_{-q}^\dagger + \dots = \sum_{q>0} \epsilon_q b_q^\dagger b_q + \epsilon_q b_q^\dagger b_{-q} + \dots = \sum_q \epsilon_q b_q^\dagger b_q. \quad (4.8)$$

Nótese que en la expresión (4.8) sólo aparece la rama de energías positivas. Esto se debe a la elección tomada a la hora de definir los operadores, pues se podría obtener la rama negativa intercambiando b_q y b_q^\dagger , es decir, partículas y huecos. Es claro que la física no puede cambiar por una mera elección; ambos resultados coincidirían teniendo en cuenta las constantes despreciadas. De hecho, mantener ambas ramas resultaría en una descripción redundante del sistema.

No obstante, escribiendo el hamiltoniano en la forma (4.8) tal que todas las excitaciones conllevan una energía positiva, el estado fundamental consiste en aquel en que todas tienen ocupación 0. Este se puede obtener trivialmente como

$$|0\rangle_b \propto \left(\prod_k b_k \right) |0\rangle,$$

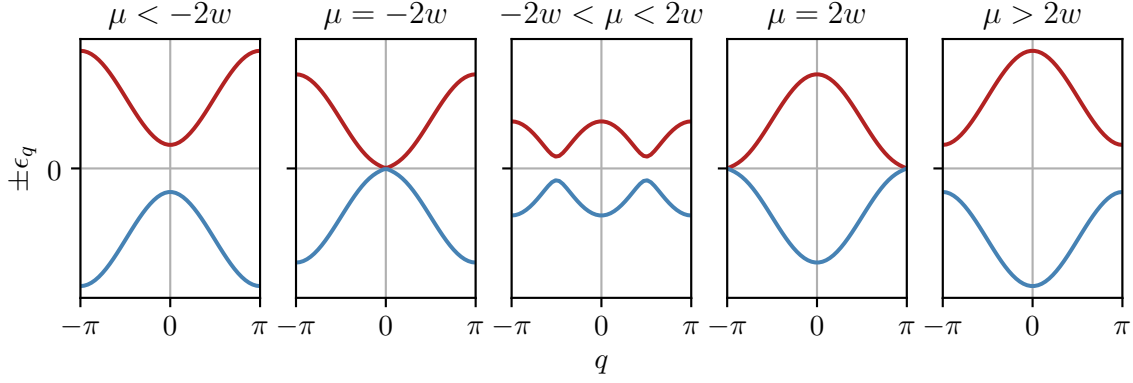


Figura 4.2: Relación de dispersión de la cadena de Kitaev para $w = 1$, $|\Delta| = 0.25$ y $\mu = -3, -2, 0, 2, 3$ de izquierda a derecha. El *gap* se cierra en $q = 0$ cuando $\mu = -2w$ y en $q = \pm\pi$ cuando $\mu = 2w$, marcando las transiciones de fase topológica. Para valores intermedios de μ , el *gap* permanece abierto gracias a la contribución de Δ .

donde $|0\rangle$ denota el vacío de los fermiones originales.

Volviendo a la expresión (4.7) obtenida para la relación de dispersión, se observa que el *gap* se cierra cuando $|\mu| = |2w|$. Esto marca la transición entre la fase trivial y la fase topológica. Además, si μ y w tienen el mismo signo las bandas se cierran en $q = -\pi$, mientras que si tienen signo opuesto lo hacen en $q = 0$. En la figura 4.2 se representa la relación de dispersión para los distintos casos.

4.2.2. Invariantes topológicos

La clasificación topológica del modelo de Kitaev depende de la simetrías consideradas. Si se estudia el hamiltoniano (4.1) directamente sin tener en cuenta su procedencia es inmediato comprobar que se corresponde con la clase BDI. En ese caso, el invariante topológico relacionado con los modos de Majorana localizados en los bordes es \mathbb{Z} . Sin embargo, al tener en cuenta la fase θ , se pierde la simetría de inversión temporal y, por tanto, el modelo pertenece a la clase D. En este caso el invariante topológico correspondiente es \mathbb{Z}_2 .

El segundo acercamiento a la clasificación del modelo de Kitaev resulta más natural, pues tiene en cuenta perturbaciones que afecten a θ . Además, en la práctica, un modelo con fermiones sin spin como este no puede realizarse físicamente sin romper la simetría de inversión temporal, separando así los estados en dos sectores de spin opuesto.

No obstante, el invariante \mathbb{Z}_2 puede obtenerse fácilmente a partir del \mathbb{Z} , obviando el papel de θ . Por tanto, es conveniente comenzar la discusión tratando el primer caso.

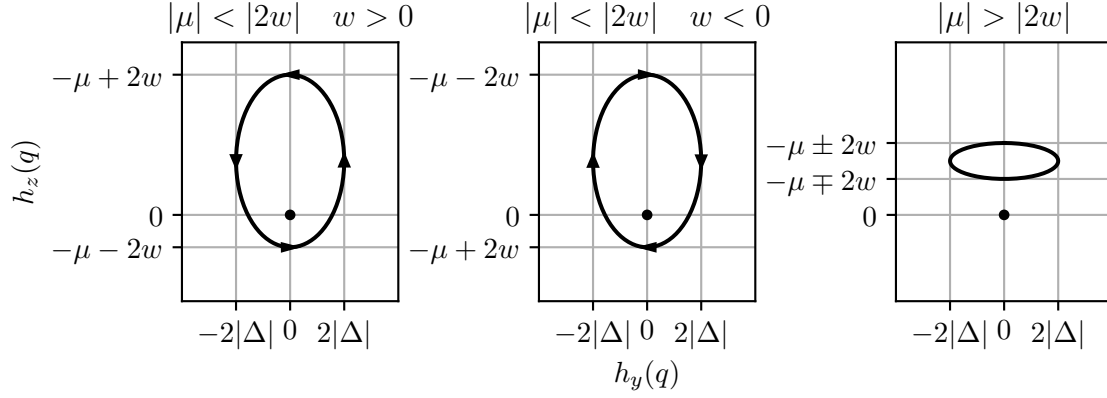


Figura 4.3: Recorrido de $\vec{h}(q)$ cuando q va de $-\pi$ a π para los tres casos posibles según el *winding number*. A la izquierda, da una vuelta alrededor del cero en sentido positivo, lo que se corresponde con $\nu = 1$. En el centro, da una vuelta en sentido negativo, lo que se corresponde con $\nu = -1$. A la derecha, no da ninguna vuelta alrededor del cero, por lo que $\nu = 0$. Se ha supuesto $\mu < 0$ para las representaciones gráficas.

A continuación se introduce el invariante topológico \mathbb{Z} asociado a la clase BDI. Es decir, en este caso se considera que la fase de Δ es fija y, por tanto, se puede obviar dando lugar a la simetría de inversión temporal.

Dicho invariante topológico se puede tomar como *winding number* asociado al hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes H_q mediante el siguiente procedimiento. Dado que H_q es una matriz hermítica de dimensión 2, se puede escribir como vector de Pauli:

$$H_q = \begin{pmatrix} -\mu - 2w \cos(q) & -2i|\Delta| \sin(q) \\ 2i|\Delta| \sin(q) & \mu + 2w \cos(q) \end{pmatrix} = (-\mu - 2w \cos(q))\sigma_z + 2|\Delta| \sin(q)\sigma_y = \vec{h}(q) \cdot \vec{\sigma},$$

siendo $\vec{h}(q) = (0, 2|\Delta| \sin(q), -\mu - 2w \cos(q))$. Al variar q de $-\pi$ a π de forma continua, $\vec{h}(q)$ describe una elipse contenida en el plano dado por $h_x = 0$. El *winding number* ν viene dado por el número de vueltas alrededor del origen teniendo en cuenta la orientación.

El valor de ν puede emplearse para caracterizar la fase del sistema según los siguientes casos:

- i) Si $|\mu| > |2w|$, el sistema se encuentra en la fase trivial y $\nu = 0$.
- ii) Si $|\mu| < |2w|$ y $w > 0$, el sistema se encuentra en fase no trivial y $\nu = 1$.
- iii) Si $|\mu| < |2w|$ y $w < 0$, el sistema se encuentra en fase no trivial y $\nu = -1$.

Es claro que las fases con $\nu = \pm 1$ no pueden transformarse la una en la otra de forma continua, por lo que son topológicamente diferentes y ν es un invariante topológico \mathbb{Z} .

Esto se debe a que no se están permitiendo variaciones de la fase de Δ . De hecho, la transformación $\Delta \rightarrow -\Delta$ intercambia ambas fases. No obstante, esta modificación no puede realizarse de forma continua sin romper la simetría de inversión temporal.

A partir de ahora se trata el caso en que se permite que la fase de Δ varíe rompiendo la simetría de inversión temporal, es decir, el correspondiente a la clase D de la clasificación topológica.

Se podría considerar el caso en el que dicha variación se trata de forma implícita, es decir, transformando a cada instante de tiempo los operadores a_j^\dagger y a_j tal que el hamiltoniano H_q siga teniendo la misma expresión. Entonces, ν se calcula como en el caso anterior. El invariante topológico \mathbb{Z}_2 podría tomarse como $\nu \pmod{2}$.

Para estudiar el caso en que la simetría de inversión temporal se rompe de manera explícita, el invariante topológico Z_2 puede definirse mediante un método alternativo que no requiere la existencia de un *winding number* bien definido. En consecuencia, este se puede calcular directamente a partir del hamiltoniano que incorpora las posibles variaciones de θ de forma explícita.

Deshaciendo la transformación $a_j \rightarrow e^{-i\theta/2}a_j$ se tiene:

$$H = \sum_{q>0} \begin{pmatrix} a_q^\dagger & a_{-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mu - 2w \cos(q) & -2i|\Delta|e^{-i\theta} \sin(q) \\ 2i|\Delta|e^{i\theta} \sin(q) & \mu + 2w \cos(q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix} + \dots$$

Por tanto, el nuevo hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes es

$$\begin{aligned} H_q &= \begin{pmatrix} -\mu - 2w \cos(q) & -2i|\Delta|e^{-i\theta} \sin(q) \\ 2i|\Delta|e^{i\theta} \sin(q) & \mu + 2w \cos(q) \end{pmatrix} \\ &= (-\mu - 2w \cos(q))\sigma_z + 2|\Delta| \cos(\theta) \sin(q)\sigma_y - 2|\Delta| \sin(\theta) \sin(q)\sigma_x = \vec{h}(q) \cdot \vec{\sigma}, \end{aligned}$$

donde $\vec{h}(q) = (-2|\Delta| \sin(\theta) \sin(q), 2|\Delta| \cos(\theta) \sin(q), -\mu - 2w \cos(q))$. Nótese que $\vec{h}(q)$ ya no está contenido en un plano. Esto causa que no se pueda definir el invariante topológico en función de un *winding number*.

No obstante, cuando $q = -\pi$ o $q = 0$, las componentes $h_x(q)$ y $h_y(q)$ se anulan para cualquier valor de θ . En dichos puntos, $\vec{h}(q)$ es un vector que apunta en sentido positivo o negativo del eje Z . Se puede definir el nuevo invariante topológico ρ en base al sentido

relativo entre ambos vectores, es decir,

$$(-1)^\rho = \frac{\vec{h}(-\pi) \cdot \vec{h}(0)}{|\vec{h}(-\pi) \cdot \vec{h}(0)|}.$$

Es inmediato comprobar que $\rho = \nu \pmod 2$ cuando el *winding number* está bien definido pese a permanecer válido en un contexto más general. Cuando $\nu = \pm 1$, la curva que describe $\vec{h}(q)$ rodea al origen de coordenadas, por lo que el punto inicial y el punto medio se encuentran en sentidos opuestos. Asimismo, cuando $\nu = 0$ la curva no rodea al origen y ambos puntos se encuentran en el mismo sentido.

4.3. Cadena de Kitaev abierta

A lo largo de esta sección se estudia la aparición de modos de Majorana desacoplados y localizados en los bordes de la cadena de Kitaev finita. Para ello, se definen los operadores de Majorana asociados a cada sitio j ,

$$\begin{aligned} c_j^A &= c_{2j-1} = a_j^\dagger + a_j, \\ c_j^B &= c_{2j} = i(a_j^\dagger - a_j), \end{aligned}$$

cumpliendo $c_l^\dagger = c_l$, $\{c_l, c_m\} = 2$.

Entonces, se tiene que

$$\begin{aligned} a_j a_{j+1} &= \frac{1}{4} (c_j^A c_{j+1}^A + i c_j^B c_{j+1}^A + i c_j^A c_{j+1}^B - c_j^B c_{j+1}^B), \\ a_j^\dagger a_{j+1} &= \frac{1}{4} (c_j^A c_{j+1}^A - i c_j^B c_{j+1}^A + i c_j^A c_{j+1}^B + c_j^B c_{j+1}^B). \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que $(c_l c_m)^\dagger = c_m c_l = -c_l c_m$ si $l \neq m$, esto implica que

$$\begin{aligned} a_j a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger &= \frac{1}{2} i (c_j^B c_{j+1}^A + c_j^A c_{j+1}^B), \\ a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j &= \frac{1}{2} i (-c_j^B c_{j+1}^A + c_j^A c_{j+1}^B). \end{aligned}$$

Como $a_j^\dagger a_j = \frac{1}{2} (1 + i c_j^A c_j^B)$, el hamiltoniano para una cadena de N sitios expresado en términos de operadores de Majorana resulta

$$H = \frac{i}{2} \sum_j^N -\mu c_j^A c_j^B + \frac{i}{2} \sum_j^{N-1} (|\Delta| - w) c_j^A c_{j+1}^B + (|\Delta| + w) c_j^B c_{j+1}^A. \quad (4.9)$$

4.3.1. Casos extremos

Se consideran dos casos límite correspondientes a las fases topológicas trivial y no trivial. El caso trivial se obtiene cuando $\mu < 0, w = |\Delta| = 0$. Entonces,

$$H = \frac{i}{2} \sum_j^N -\mu c_j^A c_j^B = \sum_j^N -\mu \left(a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \right).$$

Los modos de Majorana pertenecientes a un mismo sitio están acoplados entre sí. El estado fundamental, por tanto, es aquel en el que todos los sitios están desocupados, es decir, el vacío.

El caso no trivial se obtiene cuando $\mu = 0, w = |\Delta| > 0$. Entonces,

$$H = iw \sum_j^{N-1} c_j^B c_{j+1}^A.$$

Cada modo de Majorana está acoplado únicamente al otro modo de Majorana de un sitio contiguo. Se pueden definir operadores fermiónicos que describen las excitaciones del sistema mediante la relación

$$\tilde{a}_j = \frac{1}{2} (c_j^B + ic_{j+1}^A),$$

de forma que el hamiltoniano se expresa como

$$H = 2w \sum_j^{N-1} \left(\tilde{a}_j^\dagger \tilde{a}_j - \frac{1}{2} \right). \quad (4.10)$$

Nótese que los operadores c_1^A y c_N^B no aparecen en el hamiltoniano, sino que representan modos de Majorana desacoplados situados en los extremos de la cadena. Esto da lugar a un estado de Majorana de energía cero descrito por el operador fermiónico

$$\tilde{a} = \frac{1}{2} (c_1^A + ic_N^B).$$

Por tanto, el estado fundamental del sistema está degenerado. Concretamente, hay dos estados fundamentales ortonormales entre sí y diferenciados por el número de ocupación $n = \tilde{a}^\dagger \tilde{a} = \frac{1}{2} (1 + ic_1^A c_N^B)$ del estado de Majorana. En vista de la expresión (4.10) para el hamiltoniano, es claro que cualquier estado fundamental $|\psi\rangle$ se caracteriza por cumplir $\tilde{a}_j |\psi\rangle = 0$ para cualquier $j \in \{1, \dots, N-1\}$. Se pueden construir dos estados fundamen-

tales como

$$|0\rangle_{\tilde{a}} \propto \tilde{a} \left(\prod_j^{N-1} \tilde{a}_j \right) |0\rangle, \quad |1\rangle_{\tilde{a}} \propto \tilde{a}^\dagger \left(\prod_j^{N-1} \tilde{a}_j \right) |0\rangle. \quad (4.11)$$

Dado que los operadores fermiónicos anticonmutan es claro que $\tilde{a}_j |0\rangle_{\tilde{a}} = \tilde{a}_j |1\rangle_{\tilde{a}} = 0$.

Además,

$$i c_1^A c_N^B |0\rangle_{\tilde{a}} = (2n-1) |0\rangle_{\tilde{a}} = -|0\rangle_{\tilde{a}},$$

$$i c_1^A c_N^B |1\rangle_{\tilde{a}} = (2n-1) |1\rangle_{\tilde{a}} = |1\rangle_{\tilde{a}}.$$

Finalmente, ambos estados tienen paridad bien definida. El operador paridad puede expresarse de la siguiente forma:

$$P = \prod_j^N (1 - 2a_j^\dagger a_j) = \prod_j^N (-i c_j^A c_j^B) = -i c_1^A c_N^B \prod_j^{N-1} (1 - 2\tilde{a}_j^\dagger \tilde{a}_j).$$

Entonces,

$$P |0\rangle_{\tilde{a}} = -i c_1^A c_N^B |0\rangle_{\tilde{a}} = |0\rangle_{\tilde{a}},$$

$$P |1\rangle_{\tilde{a}} = -i c_1^A c_N^B |1\rangle_{\tilde{a}} = -|1\rangle_{\tilde{a}},$$

es decir, $|0\rangle_{\tilde{a}}$ tiene un número par de los fermiones originales mientras que $|1\rangle_{\tilde{a}}$ tiene un número impar. Nótese que siempre coincide con la paridad conjunta de los nuevos fermiones \tilde{a}_j y \tilde{a} .

4.3.2. Caso general

La existencia de los modos de Majorana localizados y desacoplados se mantiene de forma aproximada siempre que $|\mu| < |2w|$. Para comprobarlo, es conveniente escribir el hamiltoniano (4.9) de forma matricial como

$$H = \frac{i}{4} c^\dagger A c$$

donde $c^\top = \left(c_1^A \ \dots \ c_N^A \mid c_1^B \ \dots \ c_N^B \right)$ y

$$A = \left(\begin{array}{cccc|cccc} & & & & -\mu & |\Delta| - w & 0 & \dots \\ & & & & -|\Delta| - w & -\mu & |\Delta| - w & \dots \\ & & & & 0 & -|\Delta| - w & -\mu & \dots \\ & & & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \hline & & 0 & & & & & \\ \hline \mu & |\Delta| + w & 0 & \dots & & & & \\ -|\Delta| + w & \mu & |\Delta| + w & \dots & & & & \\ 0 & -|\Delta| + w & \mu & \dots & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \end{array} \right).$$

En caso de existir modos de Majorana de energía cero, teniendo en cuenta la estructura por bloques de A , deben existir autovectores reales $\phi_A^\top = \left(x_1^A \ \dots \ x_N^A \mid 0 \ \dots \right)$ y $\phi_B^\top = \left(0 \ \dots \mid x_1^B \ \dots \ x_N^B \right)$ tales que

$$A\phi_A = A\phi_B = 0. \quad (4.12)$$

Dado que sus entradas son reales, dichos autovectores pueden tomarse como función de onda de los modos de Majorana, suponiendo que estén normalizados correctamente. Los operadores correspondientes son

$$b^A = \phi_A^\top c,$$

$$b^B = \phi_B^\top c.$$

Es claro que $(b^A)^\dagger = b^A$ y $(b^B)^\dagger = b^B$ y que se cumplen las reglas de anticonmutación.

Tomando las condiciones de contorno $x_0^A = x_0^B = x_{N+1}^A = x_{N+1}^B = 0$, la ecuación (4.12) se puede expresar como

$$(w - |\Delta|)x_{j-1}^A + \mu x_j^A + (|\Delta| + w)x_{j+1}^A = 0,$$

$$(|\Delta| + w)x_{j-1}^B + \mu x_j^B + (w - |\Delta|)x_{j+1}^B = 0$$

para cada $j \in \{1, \dots, N\}$. Estas relaciones de recurrencia se resuelven mediante la sustitución $x_j^A = (x_j^B)^{-1} = x^j$, siendo x una constante. Así, suponiendo $|\Delta| \neq |w|$, se obtienen

dos posibles valores para x :

$$x_{\pm} = \frac{-\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4(w^2 - |\Delta|^2)}}{2(|\Delta| + w)}.$$

Para cumplir las condiciones de contorno se toma una combinación lineal de ambas soluciones. Entonces:

$$b^A = \sum_j^N \left(\alpha_+^A x_+^j + \alpha_-^A x_-^j \right) c_j^A,$$

$$b^B = \sum_j^N \left(\alpha_+^B x_+^{-j} + \alpha_-^B x_-^{-j} \right) c_j^B,$$

siendo α_+^A , α_-^A , α_+^B y α_-^B constantes por determinar.

Si $|\mu| > |2w|$, entonces x_+ y x_- son reales. En ese caso

$$(|x_+|^2 - 1)(|x_-|^2 - 1) = \frac{4w^2 - \mu^2}{(w + |\Delta|)^2} < 0,$$

lo cuál implica que $|x_+| > 1 > |x_-|$, o bien $|x_+| < 1 < |x_-|$. Esto imposibilita que se cumplan las condiciones de contorno, por lo que en este caso no hay modos de Majorana de energía cero.

Si $|\mu| < |2w|$, entonces x_+ y x_- pueden ser tanto reales como complejos. En caso de ser reales se tiene que

$$(|x_+|^2 - 1)(|x_-|^2 - 1) = \frac{4w^2 - \mu^2}{(w + |\Delta|)^2} > 0,$$

mientras que, si son complejos, $|x_+| = |x_-|$ al ser conjugados entre sí. Por otro lado,

$$|x_+ x_-| = \left| \frac{w - |\Delta|}{w + |\Delta|} \right|.$$

Si se supone $w > 0$, esto implica que $|x_+| < 1$ y $|x_-| < 1$. En ese caso se puede obtener una solución aproximada imponiendo $x_0^A = x_{N+1}^B = 0$ de forma que

$$b^A \propto \sum_j^N \left(x_+^j - x_-^j \right) c_j^A,$$

$$b^B \propto \sum_j^N \left(x_+^{N+1-j} - x_-^{N+1-j} \right) c_j^B.$$

Si, por el contrario, se supone $w < 0$, esto implica que $|x_+| > 1$ y $|x_-| > 1$. En ese caso se puede obtener una solución aproximada imponiendo $x_0^B = x_{N+1}^A = 0$ de forma que

$$b^A \propto \sum_j^N \left(x_+^{j-N-1} - x_-^{j-N-1} \right) c_j^A,$$

$$b^B \propto \sum_j^N \left(x_+^{-j} - x_-^{-j} \right) c_j^B.$$

Sin importa el signo de w , en caso de que x_{\pm} sea complejo, $x_+ = x_-^*$. Por tanto, siempre se pueden escoger las constantes de proporcionalidad de forma que todos los coeficientes sean reales.

Nótese que, en general, lo anterior no es una solución exacta ya que $x_0^B \neq 0 \neq x_{N+1}^A$, o bien $x_0^A \neq 0 \neq x_{N+1}^B$. De hecho, dichos valores decaen exponencialmente, por lo que las condiciones de contorno sólo se cumplen en el límite $N \rightarrow \infty$. Es decir, los modos de Majorana de energía cero sólo existen de forma aproximada en una cadena finita. En su lugar, los modos de Majorana localizados en los bordes se encuentran acoplados dando lugar a un estado fermiónico con una energía que decae exponencialmente con la longitud de la cadena. En concreto, aparecen en el hamiltoniano en un término de la forma $iE_M b^A b^B$, siendo $E_M \propto e^{-\xi N}$.

Las excitaciones con energías distintas de cero se pueden obtener diagonalizando la matriz A . Dado que se trata de una matriz real y antisimétrica, todos sus autovalores son de la forma $\{\epsilon_j/i, -\epsilon_j/i\}_{j=1}^N$. Además, debido a la estructura por bloques, para cada par de autovalores $\pm\epsilon_j/i$ las fases de los autovectores correspondientes se pueden escoger tal que estos sean

$$\phi_{j+}^{\mathbb{T}} = \left(\vec{y}_j^A \mid i\vec{y}_j^B \right)$$

$$\phi_{j-}^{\mathbb{T}} = \left(\vec{y}_j^A \mid -i\vec{y}_j^B \right)$$

donde los vectores \vec{y}_j^A y \vec{y}_j^B son reales.

Por tanto, es posible definir los operadores fermiónicos

$$\tilde{a}_j^\dagger = \phi_{j+}^{\mathbb{T}} c$$

$$\tilde{a}_j = \phi_{j-}^{\mathbb{T}} c$$

Dado que los autovectores correspondientes a autovalores distintos son ortogonales, estos operadores cumplen las reglas de anticonmutación fermiónicas. Los operadores de Majorana correspondientes son:

$$\begin{aligned} b_j^A &= \left(\phi_{j+}^\top + \phi_{j-}^\top \right) c = \tilde{a}_j^\dagger + \tilde{a}_j \\ b_j^B &= i \left(\phi_{j+}^\top - \phi_{j-}^\top \right) c = i \left(\tilde{a}_j^\dagger - \tilde{a}_j \right) \end{aligned}$$

Como en el caso de energía cero, b_j^A es una superposición de los operadores del tipo c_l^A y b_j^B de los del tipo c_l^B . Otras elecciones de la fase de $\phi_{j\pm}$ no tendrían esta propiedad. Debido a que esto se cumple, en el caso de tratarse de las soluciones del interior del *gap* cuando $|\mu| < |2w|$ se deduce del tratamiento aproximado que los coeficientes correspondientes a c_j^A y c_j^B dan lugar a funciones de onda localizadas en los extremos de la cadena.

En términos de estos operadores, el hamiltoniano se expresa como

$$H = \sum_J^N \epsilon_j \left(\tilde{a}_j^\dagger \tilde{a}_j - \frac{1}{2} \right) = \frac{i}{2} \sum_J^N \epsilon_j b_j^A b_j^B.$$

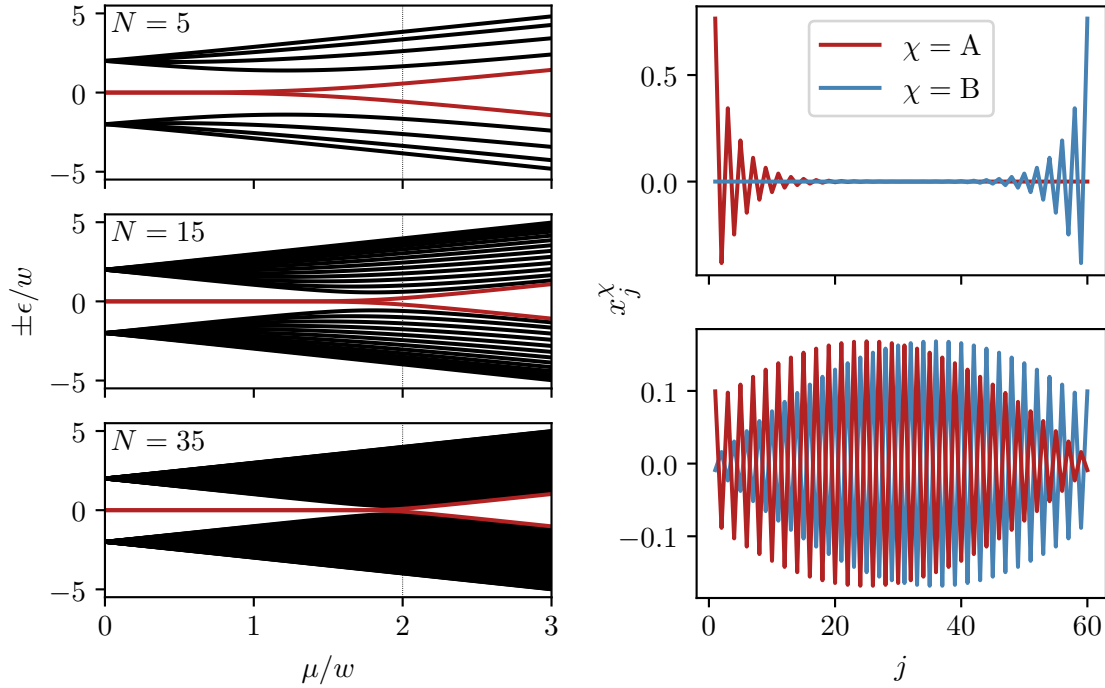
Para concluir la sección se presentan los resultados obtenidos diagonalizando el hamiltoniano numéricamente.

En la figura 4.4a se muestra la evolución de los autovalores al variar μ manteniendo w y $|\Delta|$ fijos para distintos valores de N . Como cabría esperar, para $|\mu| < |2w|$ existen energías cercanas a cero y que se corresponden con el estado de Majorana de la fase topológica no trivial. Al aumentar el el valor de μ estas energías son expulsadas fuera del *gap*, señalizando la transición de fase. De acuerdo con lo esperado, dicha transición está mejor definida cuanto mayor sea la longitud de la cadena.

Por otro lado, en la figura 4.4b se representan las funciones de onda de los modos de Majorana localizados en los bordes obtenidos por el proceso descrito anteriormente. Para contrastar, se incluyen los modos de Majorana asociados al estado de menor energía en la fase trivial, los cuáles no están localizados y están acoplados entre sí.

4.3.3. Energía de hibridación como función de la longitud

Anteriormente se ha comentado que la energía de hibridación de los modos de Majorana decae exponencialmente con la longitud de la cadena. A continuación se comprueba tal



(a) Niveles de energía de la cadena de Kitaev con $w = |\Delta|$ como función de μ para varios valores de N . La línea vertical señala la transición de fase topológica, mientras que se destaca en rojo el nivel menor energía. Cuanto mayor es N , más se ajusta la separación de los niveles de energía cero a la transición de fase teórica.

(b) Funciones de onda de los modos de Majorana asociados al estado de menor energía para $N = 60$. Arriba, $\mu = 2.5, w = 2$ y $|\Delta| = 3$, por lo que el sistema está en fase no trivial y los modos están desacoplados y localizados en los bordes. Abajo, $\mu = 4.5, w = 2$ y $|\Delta| = 3$, por lo que está en fase trivial y los modos están deslocalizados y acoplados entre sí.

Figura 4.4

afirmación, restringiendo el estudio al caso $w = |\Delta| > 0$ para simplificar los cálculos.

Para ello, se considera μ como una perturbación alrededor del caso con $\mu = 0$ y $w = |\Delta| > 0$ ya estudiado. El uso de la teoría de perturbaciones está justificado debido a que la existencia de los modos de Majorana se restringe a $|\mu| < |2w|$ y, por tanto, resulta natural considerar que μ es pequeño. De hecho, para trabajar con un parámetro adimensional, se expresa la perturbación en términos de $\lambda = \mu/2w$

Así, la matriz A que describe al sistema es

$$A = A_0 + \lambda V,$$

donde A_0 es la matriz sin perturbar y

$$V = \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \begin{matrix} -2w \\ \vdots \\ -2w \end{matrix} \\ \hline \begin{matrix} 2w \\ \vdots \\ 2w \end{matrix} & \mathbf{0} \end{array} \right).$$

Existen $N - 1$ autovectores de A_0 con autovalor $\pm 2w/i$, dados por

$$\phi_{1\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ \pm i \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \phi_{(N-1)\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \pm i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Los autovectores restantes son los estados de energía cero y se pueden tomar como

$$\phi_{M\pm} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

Dado que el objetivo es estudiar qué ocurre con los estados de energía cero al introducir la perturbación, se considera una solución que se reduzca a una combinación lineal de estos dos últimos vectores a orden 0. En concreto, se considera la siguiente expansión a orden $N - 1$ para los autovectores:

$$\psi = k_+ \phi_{M+} + k_- \phi_{M-} + \sum_{\rho=1}^{N-1} \lambda^\rho \sum_{j=1}^{N-1} \left(k_{j+}^{(\rho)} \phi_{j+} + k_{j-}^{(\rho)} \phi_{j-} \right).$$

Para los autovalores es necesario llegar a orden N . Teniendo en cuenta que se anulan a orden 0:

$$\epsilon = \sum_{\rho=1}^N \lambda^\rho \epsilon^{(\rho)}$$

Para determinar los coeficientes se impone $A\psi = -i\frac{\epsilon}{\psi}$ orden a orden.

Multiplicando por $\phi_{M\pm}^\dagger$ a la izquierda se tiene a orden 1 que $\epsilon^{(1)} = 0$. A orden $\rho \in \{2, \dots, N\}$ se obtienen las ecuaciones:

$$\begin{aligned} w \left(k_{1+}^{(\rho-1)} - k_{1-}^{(\rho-1)} + k_{(N-1)+}^{(\rho-1)} + k_{(N-1)-}^{(\rho-1)} \right) &= k_+ \epsilon^{(\rho)} \\ w \left(k_{1+}^{(\rho-1)} - k_{1-}^{(\rho-1)} - k_{(N-1)+}^{(\rho-1)} - k_{(N-1)-}^{(\rho-1)} \right) &= k_- \epsilon^{(\rho)} \end{aligned}$$

Multiplicando por $\phi_{1\pm}^\dagger$ y $\phi_{(N-1)\pm}^\dagger$ se tiene a orden 1:

$$\begin{aligned} 2k_{1+}^{(1)} + k_+ + k_- &= 0 \\ 2k_{1-}^{(1)} + k_+ + k_- &= 0 \\ 2k_{(N-1)+}^{(1)} + k_+ - k_- &= 0 \\ 2k_{(N-1)-}^{(1)} - k_+ + k_- &= 0 \end{aligned}$$

Para orden $\rho \in \{2, \dots, N-1\}$:

$$\begin{aligned} w \left(2k_{1+}^{(\rho)} + k_{2+}^{(\rho-1)} - k_{2-}^{(\rho-1)} \right) &= \sum_{s=1}^{\rho-1} k_{1+}^{(\rho-s)} \epsilon^{(s)} \\ -w \left(2k_{1-}^{(\rho)} - k_{2+}^{(\rho-1)} + k_{2-}^{(\rho-1)} \right) &= \sum_{s=1}^{\rho-1} k_{1-}^{(\rho-s)} \epsilon^{(s)} \\ w \left(2k_{(N-1)+}^{(\rho)} + k_{(N-2)+}^{(\rho-1)} + k_{(N-2)-}^{(\rho-1)} \right) &= \sum_{s=1}^{\rho-1} k_{(N-1)+}^{(\rho-s)} \epsilon^{(s)} \\ -w \left(2k_{(N-1)-}^{(\rho)} + k_{(N-2)+}^{(\rho-1)} + k_{(N-2)-}^{(\rho-1)} \right) &= \sum_{s=1}^{\rho-1} k_{(N-1)-}^{(\rho-s)} \epsilon^{(s)} \end{aligned}$$

Finalmente, para cada $j \in \{2, \dots, N-2\}$, multiplicando por $\phi_{j\pm}^\dagger$ se tiene a primer orden que $k_{j+}^{(1)} = k_{j-}^{(1)} = 0$. Para orden $\rho \in \{2, \dots, N-1\}$:

$$\begin{aligned} w \left(2k_{j+}^{(\rho)} + k_{(j-1)+}^{(\rho-1)} + k_{(j-1)-}^{(\rho-1)} + k_{(j+1)+}^{(\rho-1)} - k_{(j+1)-}^{(\rho-1)} \right) &= \sum_{s=1}^{\rho-1} k_{j+}^{(\rho-s)} \epsilon^{(s)} \\ -w \left(2k_{j-}^{(\rho)} + k_{(j-1)+}^{(\rho-1)} + k_{(j-1)-}^{(\rho-1)} - k_{(j+1)+}^{(\rho-1)} + k_{(j+1)-}^{(\rho-1)} \right) &= \sum_{s=1}^{\rho-1} k_{j-}^{(\rho-s)} \epsilon^{(s)} \end{aligned}$$

El sistema de ecuaciones obtenido puede resolverse para obtener, considerando $\epsilon > 0$, $\epsilon^{(1)} = \dots = \epsilon^{(N-1)} = 0$ y $\epsilon^{(N)} = 2w$. Además los coeficientes de los autovectores coinciden con lo obtenido en la subsección 4.3.2. La energía asociada a estos estados es, por tanto,

$$\epsilon = 2w \left(\frac{\mu}{2w} \right)^N.$$

Como se esperaba, esta decae exponencialmente con N siempre que $|\mu| < |2w|$.

4.4. Efectos a segundos vecinos

Como se muestra en la sección 4.2.2, cuando se impone la simetría de inversión temporal el invariante topológico ν asociado a la cadena de Kitaev toma valores en \mathbb{Z} . En concreto, se comprueba que ν puede tomar los valores $-1, 0$ y 1 , apareciendo $|\nu|$ modos de Majorana de energía cero en cada extremo del sistema.

No obstante, es posible considerar modificaciones del hamiltoniano que, respetando las simetrías, den lugar a otras fases topológicas al cerrar el *gap* en la relación de dispersión. Un caso natural en el que esto ocurre consiste en incluir efectos a siguientes vecinos.

Se considera a continuación la cadena de Kitaev con términos a segundos vecinos según el hamiltoniano

$$\begin{aligned} H = \sum_j & -\mu \left(a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \right) - w_1 \left(a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j \right) + \Delta_1 \left(a_j a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger \right) \\ & - w_2 \left(a_j^\dagger a_{j+2} + a_{j+2}^\dagger a_j \right) + \Delta_2 \left(a_j a_{j+2} + a_{j+2}^\dagger a_j^\dagger \right). \end{aligned}$$

Para que el sistema presente la simetría de inversión temporal todos los parámetros se consideran reales. Entonces,

$$\begin{aligned} \sum_j a_j^\dagger a_{j+2} &= \sum_{q>0} e^{2iq} a_q^\dagger a_q - e^{-2iq} a_{-q} a_{-q}^\dagger + \dots, \\ \sum_j a_j a_{j+2} &= \sum_{q>0} e^{2iq} a_{-q} a_q - e^{-2iq} a_{-q} a_q. \end{aligned}$$

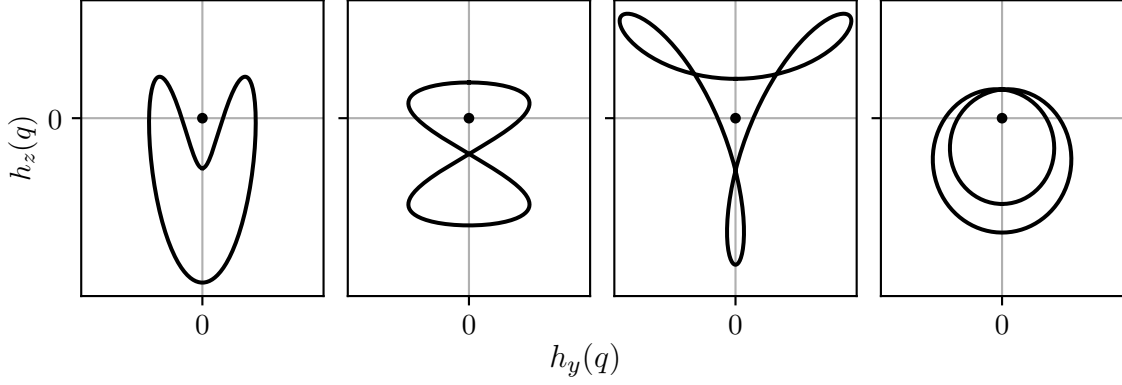


Figura 4.5: Algunos ejemplos de los posibles recorridos que sigue $\vec{h}(q)$ en la cadena de Kitaev extendida a segundos vecinos. A la izquierda se tiene muestra un caso con $\nu = 0$. Los dos ejemplos centrales tienen $|\nu| = 1$. A la derecha, $|\nu| = 2$.

Por tanto,

$$\begin{aligned} \sum_j a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j &= 2 \sum_{q>0} \cos(2q) a_q^\dagger a_q - \cos(2q) a_{-q} a_q^\dagger + \dots, \\ \sum_j a_j a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger &= 2i \sum_{q>0} \sin(2q) a_{-q} a_q - \sin(2q) a_q^\dagger a_{-q}^\dagger. \end{aligned}$$

De esta forma, el hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes es

$$\begin{aligned} H_q &= \begin{pmatrix} -\mu - 2w_1 \cos(q) - 2w_2 \cos(2q) & -2i\Delta_1 \sin(q) - 2i\Delta_2 \sin(2q) \\ 2i\Delta_1 \sin(q) + 2i\Delta_2 \sin(2q) & \mu + 2w_1 \cos(q) + 2w_2 \cos(2q) \end{pmatrix} \\ &= (-\mu - 2w_1 \cos(q) - 2w_2 \cos(2q))\sigma_z + (2\Delta_1 \sin(q) + 2\Delta_2 \sin(2q))\sigma_y = \vec{h}(q) \cdot \vec{\sigma}, \end{aligned}$$

donde $\vec{h}(q) = (0, 2\Delta_1 \sin(q) + 2\Delta_2 \sin(2q), -\mu - 2w_1 \cos(q) - 2w_2 \cos(2q))$. Debido a la simetría de inversión temporal, este vector está contenido en el plano $h_x = 0$. La curva que describe $\vec{h}(q)$ en el plano al variar q deja de ser una elipse, lo cuál permite que dé más de una vuelta alrededor del origen.

El *winding number* se puede determinar a partir de los puntos en los que $h_y(q) = 0$ y el signo de $h_z(q)$ en dichos puntos. Se tiene:

$$\begin{aligned} h_y(q) &= 2\Delta_1 \sin(q) + 2\Delta_2 \sin(2q) = 2\Delta_1 \sin(q) + 4\Delta_2 \sin(q) \cos(q) \\ &= 2 \sin(q) (2\Delta_2 \cos(q) + \Delta_1) = 0. \end{aligned}$$

La igualdad anterior siempre se cumple cuando q toma los valores $-\pi$ y 0 . Además, si $|\Delta_1| < |2\Delta_2|$ entonces existen dos soluciones más al cumplirse $\cos(q) = \Delta_1/(2\Delta_2)$.

Si $|\Delta_1| \geq |2\Delta_2|$, puesto que sólo se cumple $h_y(q) = 0$ para $-\pi$ y 0 , el número de vueltas alrededor del origen es 0 si $h_z(-\pi)$ y $h_z(0)$ tienen el mismo signo y es 1 si tienen signo opuesto. Esto implica que $\nu = 0$ si $|\mu + 2w_2| \geq |2w_1|$ y $|\nu| = 1$ si $|\mu + 2w_2| < |2w_1|$. Si $|\Delta_1| < |2\Delta_2|$, pueden darse tres casos diferentes. De nuevo, si $h_z(-\pi)$ y $h_z(0)$ tienen signo opuesto, es decir, si $|\mu + 2w_2| < |2w_1|$, entonces $|\nu| = 1$. En caso contrario, si $h_z(q)$ tiene el mismo signo cuando $\cos(q) = -\Delta_1/(2\Delta_2)$ que $h_z(-\pi)$ y $h_z(0)$ entonces $\nu = 0$, mientras que si tiene el signo opuesto entonces $|\nu| = 2$. Nótese que si $|\Delta_1/\Delta_2| \rightarrow 2$, entonces el valor de $h_z(q)$ en dicho punto tiende a $h_z(-\pi)$, por lo que tiene el mismo signo. Por tanto, basta comprobar si cambia de signo en algún valor intermedio de Δ_1/Δ_2 . Sustituyendo $\cos(q) = -\Delta_1/(2\Delta_2)$ se tiene que

$$h_z(q) = \mu - w_1 \frac{\Delta_1}{\Delta_2} - w_2 \left(2 - \frac{\Delta_1^2}{\Delta_2^2} \right).$$

Si $w_2 = 0$, dado que en ese caso $|\mu| \geq |2w_1|$, $h_z(q)$ no puede cambiar de signo para ningún valor intermedio. Si $w_2 \neq 0$, igualando a cero se obtiene que el signo cambia siempre que las constantes

$$\eta_{\pm} = \frac{w_1 \pm \sqrt{w_1^2 - 4\mu w_2 + 8w_2^2}}{2w_2}$$

sean reales y $-2 \leq \eta_- < \Delta_1/\Delta_2 < \eta_+ \leq 2$, si $w_2 > 0$, o $-2 \leq \eta_+ < \Delta_1/\Delta_2 < \eta_- \leq 2$, si $w_2 < 0$.

En resumen, pueden ocurrir tres casos distintos:

- i) Si $|\mu + 2w_2| < |2w_1|$, el sistema se encuentra en fase no trivial y $|\nu| = 1$.
- ii) Si $|\mu + 2w_2| > |2w_1|$ y $-2 \leq \eta_- < \Delta_1/\Delta_2 < \eta_+ \leq 2$, si $w_2 > 0$, o $-2 \leq \eta_+ < \Delta_1/\Delta_2 < \eta_- \leq 2$, si $w_2 < 0$, el sistema se encuentra en fase no trivial y $|\nu| = 2$.
- iii) En cualquier otro caso, el sistema se encuentra en la fase trivial y $\nu = 0$.

Los casos en los que $\nu \neq 0$ engloban dos fases topológicas distintas según el signo de ν , el cuál depende de los parámetros, dando un total de cinco fases.

Cuando $|\nu| = 1$, aparece un modo de Majorana de energía cero en cada extremo de la cadena tal como se ha estudiado en la sección 4.3. Asimismo, cuando $|\nu| = 2$, aparecen dos modos de Majorana de energía cero en cada extremo. Para comprobarlo se puede volver a diagonalizar el hamiltoniano numéricamente, incluyendo esta vez los nuevos términos. A continuación se muestran los resultados obtenidos para la elección de parámetros $w_1 =$

$1, w_2 = -2, \Delta_1 = 0$ y $\Delta_2 = 1$ y longitud $N = 60$. Esta permite acceder a tres fases topológicas con diferente número de estados de borde modificando únicamente el valor de μ .

En la figura 4.6a se muestra la evolución de los autovalores al variar μ para la elección del resto de parámetros mencionada anteriormente. Cuando $\mu \in (0, 2)$ se cumple que $|\mu + 2w_2| > |2w_1|$ y $-2 \leq \eta_- < \Delta_1/\Delta_2 < \eta_+ \leq 2$, por lo que se tiene $\nu = 2$. Como cabría esperar, en esta región se tienen 2 estados de energía cero. Cuando $\mu \in (2, 6)$, $|\mu + 2w_2| < |2w_1|$, por lo que $\nu = 1$. Al mismo tiempo, en la figura se observa que sólo uno de los dos estados permanece con energía cero. Finalmente, cuando $\mu \in (6, 8)$ se tiene que $|\mu + 2w_2| > |2w_1|$, pero $\eta_+ < -2$, por lo que $\nu = 0$. En este caso no hay estados con energía cero.

En la figura 4.6b se representan las funciones de onda de los modos de Majorana que corresponden a los dos estados con energía próxima a cero que aparecen cuando $\mu = 1$. Se puede apreciar que están localizados en los bordes. Además, están todos desacoplados entre sí.

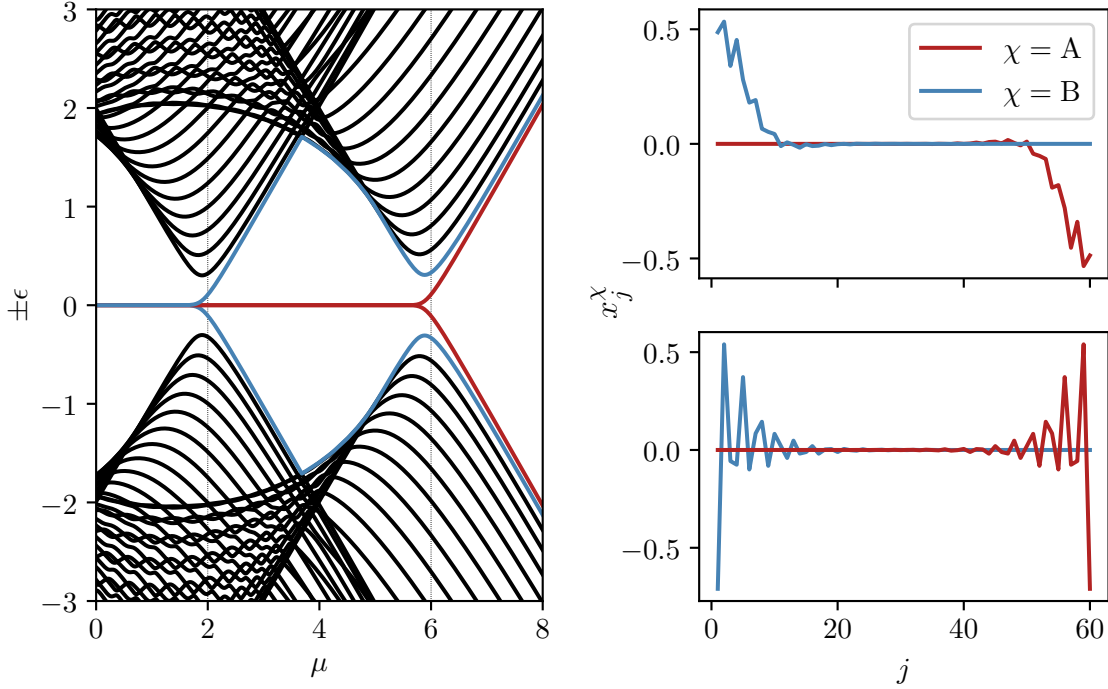
4.5. Fusión de modos de Majorana

El objetivo de esta sección es simular la fusión de modos de Majorana en la cadena de Kitaev. Para ello, se emplea el paquete TeNPy de Python [12].

Se considera una cadena de Kitaev de longitud N impar. En el instante inicial, $\mu = 0$ y $|\Delta| = w > 0$. De acuerdo con lo estudiado en la sección 4.3, en este caso aparece un modo de Majorana desacoplado en cada extremo de la cadena. Se considera que el estado inicial es uno de los dos estados fundamentales definidos por (4.11), es decir, $|0\rangle_{\bar{a}}$ o $|1\rangle_{\bar{a}}$, diferenciados por la ocupación del estado de Majorana correspondiente así como su paridad P .

Para desplazar los modos de Majorana y fusionarlos en el sitio central de la cadena se introduce un potencial electrostático $\mu_j(t)$ para cada $j \in \{1, \dots, N\}$, de forma que los bordes de la fase no trivial se desplacen lentamente de los extremos de la cadena a su centro. El hamiltoniano tiene la forma

$$H = \sum_j -\mu_j(t) \left(a_j^\dagger a_j - \frac{1}{2} \right) - w \left(a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j - a_j a_{j+1} - a_{j+1}^\dagger a_j^\dagger \right).$$



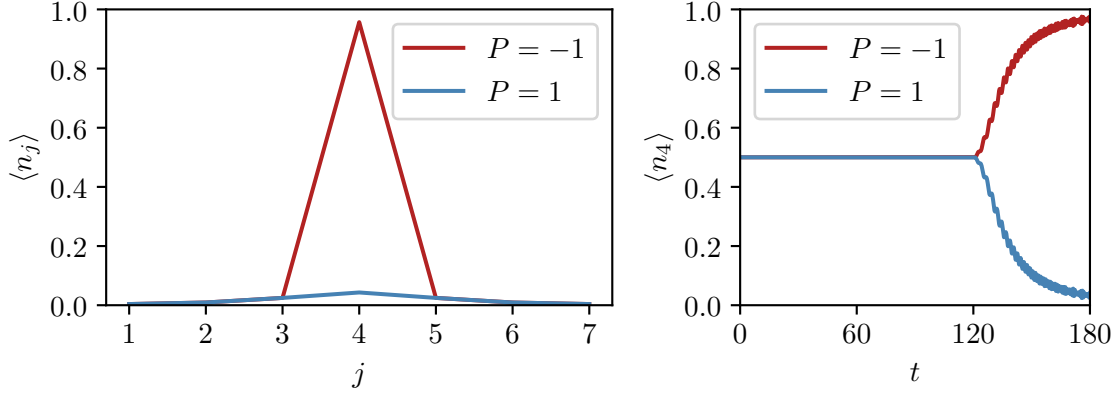
(a) Niveles de energía de la cadena de Kitaev a segundos vecinos con $N = 60$ y $w_1 = 1, w_2 = -2, \Delta_1 = 0$ y $\Delta_2 = 1$ como función de μ . Los valores de los parámetros se han escogido para que se observen tras fases diferentes. Las líneas verticales señalan las transiciones correspondientes, mientras que se destacan en rojo y en azul el primer y el segundo nivel de menor energía. A medida que se incrementa μ entre 0 y 8, el número de estados de energía cero, que coincide con $|\nu|$, pasa por 2, 1 y 0.

(b) Funciones de onda de los modos de Majorana asociados a los dos estados de menor energía para $N = 60$ y $\mu = 1, w_1 = 1, w_2 = -2, \Delta_1 = 0$ y $\Delta_2 = 1$. Arriba, los asociados a la menor energía; abajo, los asociados a la segunda menor energía. En ambos casos están desacoplados y localizados en los bordes.

Figura 4.6

El potencial empleado sigue la idea llevada a cabo en [11]. Al comenzar la evolución temporal, se modifica el potencial electrostático en los extremos de la cadena, de forma que $-\mu_1(t) = -\mu_N(t)$ crece linealmente de 0 a $\mu_0 > 0$ en un tiempo τ . De la misma forma, $-\mu_2(t) = -\mu_{N-1}(t)$ crece de 0 a μ_0 durante el intervalo de tiempo entre τ y 2τ . Esto se repite dando lugar a una barrera de potencial móvil que confina ambos modos de Majorana en el centro de la cadena. Matemáticamente, para $j \in \{1, \dots, (N-1)/2\}$,

$$-\mu_j(t) = \begin{cases} \mu_0 & j < \lceil \frac{t}{\tau} \rceil, \\ \{\frac{t}{\tau}\} \mu_0 & j = \lceil \frac{t}{\tau} \rceil, \\ 0 & j > \lceil \frac{t}{\tau} \rceil, \end{cases}$$



(a) Densidad fermiónica como función de la posición en el instante tras la evolución temporal ($t = 180$). El resultado de la fusión de los modos de Majorana depende de la ocupación del estado de Majorana correspondiente. Si el estado fundamental inicial es $|1\rangle_{\bar{a}}$, es decir, si $P = -1$, se crea un fermión en el centro de la cadena. Por el contrario, si el estado fundamental inicial es $|0\rangle_{\bar{a}}$, es decir, si $P = 1$, se crea un hueco en su lugar. Dado que la barrera de potencial empleada no es infinita, parte de los fermiones se extiende a los sitios contiguos.

(b) Valor esperado de la ocupación del sitio central como función del tiempo. Cuando los modos de Majorana se encuentran en el centro de la cadena, este aumenta si $P = -1$ o disminuye si $P = 1$. Así, se forma un fermión o un hueco según el estado inicial. En ambos casos se observan oscilaciones que parecen deberse a que la evolución no es perfectamente adiabática.

Figura 4.7

donde $\lceil \cdot \rceil$ y $\{ \cdot \}$ representan la función techo y la parte fraccionaria, respectivamente. Para $j \in \{(N+3)/2, \dots, N\}$, $u_j(t) = \mu_{N-i+1}(t)$. Finalmente, en el sitio central el potencial electrostático permanece fijo, es decir, $\mu_{(N+1)/2}(t) = 0$.

Para observar la fusión de los modos puede estudiarse la evolución del valor esperado del operador número asociado a cada sitio j , $\langle n_j \rangle = \langle a_j^\dagger a_j \rangle$, es decir, la densidad fermiónica. En ambos estados iniciales es sencillo comprobar que $\langle n_j \rangle = 1/2$ para cualquier $j \in \{1, \dots, N\}$. A medida que el potencial químico local disminuye, ocupar el sitio correspondiente requiere una mayor energía y, como consecuencia, el valor esperado disminuye. Cuando la barrera de potencial desplaza ambos modos de Majorana hasta el centro, el resultado depende del estado inicial. Si se trata de $|0\rangle_{\bar{a}}$, entonces el valor esperado en el sitio central se aproxima a 0. Por el contrario, si se trata de $|1\rangle_{\bar{a}}$ el valor esperado en el sitio central se aproxima a 1. Es decir, la fusión de los modos de Majorana da lugar a un hueco o a un fermión, respectivamente. Nótese que esto respeta la conservación de la paridad fermiónica del estado global durante todo el proceso.

En la figura 4.7 se representan los resultados obtenidos al realizar la simulación en una cadena de longitud $N = 7$ con $|\Delta| = w = 1$ y aplicando un potencial con $\mu_0 = 8$ y $\tau = 60$.

Como cabría esperar, si se inicia la evolución temporal en el estado $|0\rangle_{\tilde{a}}$ el estado final presenta un hueco en el centro de la cadena, mientras que si se inicia en el estado $|1\rangle_{\tilde{a}}$ el estado final presenta un fermión en el centro de la cadena. No obstante, ocurre de forma exacta debido a que la barrera de potencial empleada no es suficientemente grande como para considerarse infinita y porque la evolución no es perfectamente adiabática.

Capítulo 5

Conclusiones

Este texto pretende ser una introducción teórica a los modelos de materia topológica. En concreto, se centra en los superconductores topológicos.

Como se ha podido comprobar, los superconductores topológicos presentan, al menos en teoría, propiedades exóticas que los convierten en una interesante propuesta en el campo de la computación cuántica. En este trabajo, se ha hecho hincapié en las propiedades de los modos de Majorana que aparecen en los superconductores topológicos. su robustez frente a perturbaciones y la estadística no abeliana los hacen ideales para almacenar y procesar información en forma de cúbits. No obstante, su implementación aún no es posible a día de hoy desde el punto de vista experimental.

Dichas propiedades se han ejemplificado a partir del modelo de Kitaev, con el cual se ha finalizado el trabajo. Se han estudiado sus propiedades topológicas y se ha demostrado la aparición de modos de Majorana en la fase topológica no trivial. Por otro lado, se ha comprobado cómo se modifican estas propiedades al extender el modelo a segundos vecinos. Finalmente, se han verificado las reglas de fusión de los modos de Majorana mediante simulación numérica.

Otras cuestiones que se han estudiado a lo largo de este trabajo, sin embargo, no constan en el documento final. Por ejemplo, se ha dedicado gran esfuerzo en intentar obtener de forma exacta, posibles soluciones al problema de la cadena finita. Durante este proceso, se ha visto cómo puede reducirse a dos cadenas SSH, un modelo típico de aislante topológico [5], acopladas entre sí. Pese a que no se han obtenidos resultados satisfactorios se ha encontrado respuesta al problema en [13].

El campo de los materiales topológicos resulta de gran riqueza tanto matemática como física. En consecuencia, es inevitable que este trabajo no abarque un gran número de temas que podrían tratarse en estudios posteriores.

Bibliografía

- [1] A Yu Kitaev. Unpaired majorana fermions in quantum wires. *Physics-Uspekhi*, 44(10S):131, oct 2001.
- [2] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, 82(4):3045–3067, nov 2010.
- [3] Shinsei Ryu, Andreas P Schnyder, Akira Furusaki, and Andreas W W Ludwig. Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy. *New Journal of Physics*, 12(6):065010, jun 2010.
- [4] Jeffrey C. Y. Teo and C. L. Kane. Topological defects and gapless modes in insulators and superconductors. *Physical Review B*, 82(11), sep 2010.
- [5] János K. Asbóth. *A short course on topological insulators : band-structure and edge states in one and two dimensions*. Lecture notes in physics: v. 919. Springer, 2020.
- [6] Alexander Altland. *Condensed matter field theory*. Cambridge University Press, 2013.
- [7] C. W. J. Beenakker. Search for non-Abelian Majorana braiding statistics in superconductors. *SciPost Phys. Lect. Notes*, page 15, 2020.
- [8] Pasquale Marra. Majorana nanowires for topological quantum computation. *Journal of Applied Physics*, 132(23):231101, dec 2022.
- [9] Ville Lahtinen and Jiannis K. Pachos. A Short Introduction to Topological Quantum Computation. *SciPost Phys.*, 3:021, 2017.
- [10] Antonio Alece and Luca Dell'Anna. Extended kitaev chain with longer-range hopping and pairing. *Physical Review B*, 95(19), may 2017.
- [11] Bradraj Pandey, Narayan Mohanta, and Elbio Dagotto. Out-of-equilibrium majorana zero modes in interacting kitaev chains. *Physical Review B*, 107(6), feb 2023.

- [12] Johannes Hauschild and Frank Pollmann. Efficient numerical simulations with Tensor Networks: Tensor Network Python (TeNPy). *SciPost Phys. Lect. Notes*, page 5, 2018.
- [13] Nico Leumer, Magdalena Marganska, Bhaskaran Muralidharan, and Milena Grifoni. Exact eigenvectors and eigenvalues of the finite kitaev chain and its topological properties. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32(44):445502, aug 2020.

Apéndice A

Conceptos previos

A.1. Aproximación de *tight-binding*: cadena monoatómica

Una de las formas de obtener la estructura de bandas de un sistema es utilizar la aproximación de *tight-binding*. La idea principal consiste en suponer que los electrones no se encuentran libres, sino que están localizados alrededor los átomos. De esta forma, se puede suponer que el estado de un electrón es una superposición de orbitales atómicos. Además, se trabaja en la aproximación de un sólo electrón, por lo que se obvian los efectos de interacción.

Por ejemplo, considérese una cadena cerrada de N átomos iguales con un sólo orbital. Sean $|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_N\rangle$ los estados correspondientes a cada orbital. Para simplificar, supóngase forman un sistema ortonormal. El hamiltoniano puede escribirse matricialmente calculando los elementos de matriz

$$H_{ij} = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle.$$

Supóngase que cada orbital sólo sufre los efectos de los primeros vecinos, pues decaen rápidamente con la distancia. Entonces,

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & t & 0 & \dots & t \\ t & \epsilon_0 & & & \vdots \\ 0 & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \epsilon_0 & t \\ t & \dots & 0 & t & \epsilon_0 \end{pmatrix}.$$

Puede comprobarse que los autoestados son de la forma

$$|\phi_q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{iqj} |\psi_j\rangle$$

con $q = 2\pi m/N$, $m \in \mathbb{Z}$. Esto da N valores independientes de q , que pueden tomarse en el intervalo $[-\pi/2, \pi/2)$. A partir de la ecuación $H|\phi_q\rangle = \epsilon_q |\phi_q\rangle$ se obtiene que las energías vienen dadas por

$$\epsilon_q = \epsilon_0 - 2t \cos q.$$

A.2. Espacio de Fock y formalismo de segunda cuantización

A lo largo de este texto se tratan sistemas cuánticos en los que el número de partículas no permanece constante. Por tanto, es necesario emplear una formulación matemática que permita considerar al mismo tiempo estados con un número diferente de partículas. Para ello, se introducen el espacio de Fock y formalismo de segunda cuantización.

Si los estados que puede tomar una única partícula están descritos por un espacio de Hilbert \mathcal{H} , entonces los estados con N partículas iguales pertenecen al producto

$$\mathcal{H}^N = \overbrace{\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}^N.$$

No obstante, si, como es el caso, se trabaja con fermiones indistinguibles, sólo se dan los estados antisimétricos bajo el intercambio de las partículas. Así, el espacio de Hilbert correspondiente es $\mathcal{A}(\mathcal{H}^N)$, siendo \mathcal{A} el operador de antisimetrización.

Para describir unificar los espacios de estados con distinto número de partículas se define el espacio de Fock, \mathcal{F} , como su suma directa:

$$\mathcal{F} := \bigoplus_N \mathcal{A}(\mathcal{H}^N).$$

Pese a que sigue siendo posible describir los estados de la forma usual, resulta más conveniente expresar cuántas partículas se encuentran en cada estado en lugar del estado en que se encuentra cada partícula. Si se numeran todos los estados de la base ortonormal escogida para \mathcal{H} de 1 a k , entonces el estado global con n_j partículas en el estado j se denota $|n_1 n_2 \dots n_k\rangle$.

El espacio \mathcal{F} puede generarse a partir del vacío $|0\rangle := |0\dots 0\rangle$ actuando sobre él con operadores de creación y destrucción de partículas. En el caso de fermiones se denotan a_j^\dagger y a_j y cumplen

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{a_i, a_j\} = 0, \quad \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0,$$

siendo $\{\cdot, \cdot\}$ el anticonmutador y δ_{ij} la delta de Kronecker. Al actuar sobre los estados:

$$\begin{aligned} a_j |n_1 \dots n_j \dots n_k\rangle &= n_j^{1/2} (-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l} |n_1 \dots (n_j - 1) \dots n_k\rangle, \\ a_j^\dagger |n_1 \dots n_j \dots n_k\rangle &= (n_j + 1)^{1/2} (-1)^{\sum_{l=1}^{j-1} n_l} |n_1 \dots (n_j + 1) \dots n_k\rangle. \end{aligned}$$

Así, el número de partículas en el estado j viene dado por el operador $n_j = a_j^\dagger a_j$.

A.3. La cadena monoatómica en segunda cuantización

El modelo de *tight-binding* de A.1 puede expresarse de forma sencilla en segunda cuantización. Si a_j^\dagger y a_j son los operadores asociados a cada $|\psi_j\rangle$, entonces el hamiltoniano puede escribirse como

$$H = \sum_{i,j=1}^N H_{ij} a_i^\dagger a_j = \sum_j^N \epsilon_0 a_j^\dagger a_j - t \left(a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j \right).$$

Al tratarse de una cadena cerrada, se ha considerado que $|\psi_1\rangle = |\psi_{N+1}\rangle$.

Los operadores relacionados con las soluciones $|\phi_q\rangle$ se pueden obtener como una combinación lineal de la forma $a_q = \sum_{j=1}^N A_{qj} a_j$. En concreto:

$$\sum_{j=1}^N A_{qj}^* a_j^\dagger |0\rangle = a_q^\dagger |0\rangle = |\phi_q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{iqj} |\psi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{iqj} |\psi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{iqj} a_j^\dagger |0\rangle.$$

Por tanto,

$$a_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-iqj} a_j, \quad a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqj} a_q.$$

Sustituyendo y empleando la igualdad

$$\delta_{qq'} = \frac{1}{N} \sum_j e^{i(q-q')j},$$

donde $\delta_{qq'}$ es la delta de Kronecker, se obtiene:

$$H = \sum_q (\epsilon_0 - 2t \cos q) a_q^\dagger a_q = \sum_q \epsilon_q a_q^\dagger a_q.$$

Apéndice B

Código

A continuación se incluye el código de Python empleado para la simulación estudiada en la sección 4.5. Requiere la instalación del paquete TeNPy [12].

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from tenpy.models import fermions_spinless
from tenpy.algorithms import exact_diag
from tenpy.networks.mps import MPS
from tenpy.algorithms import tebd, dmrg, mpo_evolution

#This implements a model of Kitaev's Chain Hamiltonian with
N = 7

#sites and parameters
w = 1.0
delta = 1.0
mu = 0

#Set parameters used in base FermionChain Class and KitaevChain Class.
model_params = {
    'L': N,
    'bc_MPS': 'finite',
    'J': w, # hopping amplitude
    'mu': mu, # chemical potential
```

```

    'V': 0.0, # interaction strength
    'delta': delta, # superconducting parameter
    'conserve': 'parity'
}

#Definition of time dependent potential.
def h_t(i, t, mu, tau, N_max):
    if i > N_max/2:
        return h_t(N_max-i, t, mu, tau, N_max)
    i0 = int(t/tau)
    if i < i0:
        strength = mu
    elif i == i0:
        strength = (t/tau % 1) * mu
    else:
        strength = 0
    return strength

class KitaevChain(fermions_spinless.FermionChain):
    def init_terms(self, model_params):
        super().init_terms(model_params)

        delta = model_params.get('delta', 0)
        mu = model_params.get('mu', 0)

        self.add_coupling(delta, 0, 'C', 0, 'C', 1, plus_hc = True)
        self.add_onsite(mu/2, 0, 'Id')

        t = model_params.get('time', None)
        if t != None:
            for i in range(int(self.lat.N_sites)):
                s = h_t(i,t, 8, 60, self.lat.N_sites-1)
                self.add_onsite_term(s, i, 'N')
                self.add_onsite_term(-s/2, i, 'Id')

```

```

#Create the model with the previous parameters.
model = KitaevChain(model_params)

psi_odd = [[1]]+[[0]]*(N-1) #Use this for odd parity.
psi_even = [[1]]*2+[[0]]*(N-2) #Use this for even parity.

#Ground state from DMRG. Should obtain a different state in each
#parity sector, both with the same energy, as long as w=delta>0, mu = 0.
psi_odd = MPS.from_lat_product_state(model.lat, psi_odd)
E_gs_dmrg_odd = dmrg.run(psi_odd, model, {'chi_list':{0:2}})['E']
print('E_odd: ', E_gs_dmrg_odd)

psi_even = MPS.from_lat_product_state(model.lat, psi_even)
E_gs_dmrg_even = dmrg.run(psi_even, model, {'chi_list':{0:2}})['E']
print('E_even: ', E_gs_dmrg_even)

#Time dependent simulation.
evol_params = {'approximation': 'II', 'order': 2, 'N_steps': 5, 'dt': 0.025,
               'compression_method': 'SVD', 'chi_list':{0: 2}}

psi_t = psi_odd

n_centro = []

evol = mpo_evolution.TimeDependentExpMPOEvolution(psi_t, model, evol_params)
for time_step in range(1450):
    if time_step % 3 == 0: print(f'time step: {time_step}')
    psi_new = evol.run()
    n = psi_new.expectation_value("N")
    t = (time_step+1)*5*0.025
    if t == 60 or t == 120 or t == 180:
        plt.plot(n)

```

```
    np.save(f"n_time {t}", n)
    n_centro.append(n[int(N/2)])

np.save(f"n_centro", n_centro)

plt.plot(n_centro)
plt.show()
```