

Modos cero de Majorana y Fases
Topológicas en Nanocables
Superconductores

Tesis presentada para optar por el grado de
Licenciado en Física



Autor: Leandro Micael Chinellato
Director: Dr. Claudio Javier Gazza

Departamento de Física
Facultad de Ciencias Exactas, Ingenierías y Agrimensura
Universidad Nacional de Rosario
Marzo de 2022

A mis seres queridos.

Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecerle a el Flaco, por hacer posible este trabajo y por motivarme constantemente. A Luis por siempre estar dispuesto a dedicar tiempo y esfuerzo en enseñar. A todo el grupo de “Electrones fuertemente correlacionados” por su grata acogida. Incluyendo a Nacho y Ade con los que compartí parte de este proceso.

A mi familia. En particular a mis viejos que me bancaron y apoyaron durante toda mi carrera universitaria.

A mis profesores, por inspirarme y motivarme constantemente con su pasión y su dedicación.

La facultad me dio la oportunidad de conocer y rodearme de grandes personas. Puedo asegurar con certeza su *gran* sentido del compañerismo y amistad. Les agradezco por todos los momentos dentro y fuera de la misma. En particular a dos grandes amigas que me dio la Universidad como lo son Jofi y Eli.

A Flopi por ser mi compañera todos estos años y brindarme más amor que nadie.

A las y los que lucharon, luchan y seguirán luchando por una educación pública gratuita y de calidad.

Leandro Micael Chinellato

Rosario, 20 de mayo de 2022

Índice general

1. Introducción	1
2. Entrelazamiento, Estados productos de matrices y DMRG	5
2.1. Generalidades	6
2.1.1. Entrelazamiento cuántico	6
2.1.2. Descomposición de Schmidt	7
2.1.3. Matriz densidad y Matriz densidad reducida	9
2.1.4. Cuantificando el entrelazamiento	10
2.1.5. Ley de Área	13
2.2. Estados productos de matrices (MPS)	14
2.2.1. Construcción de un MPS	15
2.2.2. Ejemplos	19
2.3. Operadores productos de matrices (MPO)	21
2.3.1. Representación de un Hamiltoniano como un MPO	23
2.4. Grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG)	24
2.4.1. Estructura básica del algoritmo DMRG	26
3. Fases topológicas protegidas por simetrías	29
3.1. Clases de simetrías	30
3.1.1. Simetría de inversión temporal	32
3.1.2. Simetría hueco-partícula	33
3.2. Representación MPS de fases protegidas por simetrías	35
3.2.1. Degeneración en el espectro de entrelazamiento	36
3.3. Ejemplos simples de fases SPT	37
4. Cadenas de Kitaev y Nanocables	39
4.1. Cadenas de Kitaev y fermiones de Majorana	40
4.1.1. Operadores fermiónicos y de Majorana	40
4.1.2. Modos de Majorana desapareados	42
4.1.3. Cadena de Kitaev	43

4.2. Nanocables y Modos de Majorana	44
4.2.1. Modelo microscópico	45
4.3. Resultados	50
4.3.1. Diagrama de fases topológicas	50
4.3.2. Función de onda de Majorana	52
4.3.3. Apagado adiabático de la unión central	56
4.3.4. Fraccionalización del spin	58
5. Comentarios, Conclusiones y Perspectivas	61
Bibliografía	62
Anexos	
Anexo A. Algoritmo DMRG: Formulación original	71
Algoritmo Infinito: <i>Warmup</i>	71
Algoritmo finito: <i>Sweeping</i>	73
Anexo B. Algoritmo TEBD	75
Anexo C. Generalización de la cadena de Kitaev a fermiones con spin	79
Anexo D. Diagramas de fases topológicos complementarios	81

Resumen

La idea de que existen fases de la materia que no pueden ser caracterizadas mediante la ya famosa y estudiada teoría de Landau ha aparecido en años recientes con el descubrimiento de nuevos fenómenos como el efecto Hall cuántico. Estas nuevas fases, denominadas fases topológicas, se caracterizan por ser robustas ante perturbaciones ambientales y por almacenar la información del estado cuántico de manera no local.

Esta área de estudio ha dado lugar a nuevos materiales como los aislantes topológicos, los semimetales topológicos y los superconductores topológicos. En este trabajo se pretende estudiar y caracterizar las fases topológicas de un superconductor topológico unidimensional, el cual alberga un grupo muy especial de cuasipartículas denominadas fermiones de Majorana.

Mediante el uso de técnicas numéricas, como el grupo de renormalización de la matriz densidad, estudiaremos la degeneración del espectro de entrelazamiento del estado fundamental, un invariante topológico novedoso con el cual podemos identificar las fases del sistema.

Capítulo 1

Introducción

Esta tesina está enmarcada en el área de la materia condensada (*condensed matter physics*), en particular en la subárea conocida como electrones fuertemente correlacionados (*strongly correlated electrons*). Los materiales con electrones fuertemente correlacionados son materiales en los que el movimiento de un electrón depende de las posiciones y movimientos de todos los demás electrones debido al largo alcance de la interacción Culombiana. Con esta definición, podríamos pensar ingenuamente que todos los materiales muestran fuertes correlaciones electrónicas. Sin embargo, en los sistemas puramente iónicos los electrones están confinados a las cercanías del núcleo atómico. Por otro lado, en sistemas metálicos ideales, la interacción de Coulomb es apantallada, por lo que si bien las correlaciones electrónicas están presentes en estos sistemas y conducen, por ejemplo, al magnetismo, las principales propiedades de los sistemas se pueden explicar en modelos simples donde las correlaciones electrónicas se desprecian por completo (gas de Fermi de electrones libres) o se toman en cuenta sólo en aproximaciones de bajo orden (líquido de Fermi, interacciones de intercambio en magnetismo, etc.). En sistemas de electrones altamente correlacionados, las aproximaciones simples dejan de representar la física real de estos sistemas y pueden aparecer fenómenos completamente nuevos. Estos fenómenos llamados *fenómenos emergentes* [4] no pueden ser predichos a partir de las interacciones locales entre los electrones y entre los electrones y la red. Es por esto que los sistemas de electrones fuertemente correlacionados son un campo de investigación a la vanguardia de la física de la materia condensada. Si bien los principios fundamentales subyacentes de la teoría cuántica, ecuación de Schrödinger o ecuación de Dirac y mecánica estadística, son bien conocidos, no hay forma conocida en la actualidad para resolver el problema de muchos cuerpos para un número de Avogrado de partículas. Por esto último nuevos métodos y aproximaciones son desarrolladas para darle respuesta a las

gran variedad de preguntas que surgen en esta gran área de la física.

Sabemos de la experiencia cotidiana que la materia puede encontrarse en distintos estados, nombrados como fases. Entre ellos conocemos la fase líquida, el sólido cristalino o el gas. Sin embargo, el mundo cuántico esconde muchos más misterios. La teoría cuántica predice una cantidad innumerable de estados de la materia, tales como superconductores, condensados de Bose-Einstein, ferromagnetos y antiferromagnetos. En todos estos casos, el concepto de ruptura de simetría juega un rol fundamental. Podemos diferenciar un estado con un cierto orden a partir de las simetrías que rompe o preserva haciendo uso de un coeficiente (real o complejo de carácter escalar, vectorial o matricial), llamado **parámetro de orden**. El parámetro de orden es una cantidad que sirve para medir el orden en una fase, siendo cero en una fase que preserva una simetría dada y distinto de cero cuando esta simetría se rompe ordenándose el sistema. Por ejemplo, para un ferromagneto el parámetro de orden es la magnetización total, dicha magnetización es un vector con una determinada dirección, rompiendo así la simetría de rotación que tiene el estado desordenado. La teoría de Landau [24] de las transiciones de fase provee una explicación fenomenológica que explica los estados con ruptura de simetría. En esta teoría, las fases de altas temperaturas son fases desordenadas y al bajar la temperatura ocurre una transición a un nuevo estado menos simétrico. Se ha encontrado que existen estados de la materia que no pueden describirse con un parámetro de orden local y tampoco por la teoría de Landau. A este tipo de fases se las comenzó a llamar **fases topológicas**.

En las últimas décadas, hubo un progreso notable en nuestra comprensión de los estados topológicos de la materia. Decimos que un estado cuántico se llama topológico cuando sus funciones de onda tienen un carácter no local que puede especificarse mediante algún invariante topológico, una cantidad discreta que permanece sin cambios en las deformaciones adiabáticas del sistema. Los materiales que albergan a estos estados se suelen denominar **materiales topológicos**. Desde la década de 1980, se ha conocido que los sistemas Hall cuánticos y el Helio 3 (He-3) superfluido son topológicos. Durante varios años se creyó que tales estados eran de naturaleza bastante excepcional y existían solo bajo condiciones extremas (campos magnéticos elevados o a bajas temperaturas). El descubrimiento de los aisladores topológicos (TI); primero de manera teórica [55, 34] y varios años más tarde confirmados experimentalmente [23]; ha mostrado que, tal vez, los estados topológicos de la materia pueden ser más ‘comunes’ de lo pensado inicialmente.

En este trabajo nos dedicaremos a estudiar sistemas **superconductores topológicos** (TSC). Para definir un superconductor topológico es necesario primero definir un SC trivial. Un superconductor trivial es aquel que apagando lentamente

las interacciones entre distintos sitios fluye adiabáticamente hacia el límite atómico. Por otro lado, la estructura electrónica de los SC topológicos no puede ser conectada con transformaciones suaves a la de un SC trivial. Este hecho se puede expresar matemáticamente con la existencia de un invariante topológico distinto de cero, un número entero que cuantifica el orden topológico no local en el estado fundamental y diferencia esta fase de otras.

Un invariante topológico que ha cobrado popularidad en los últimos años es el grado de degeneración del **espectro de entrelazamiento**, el cual se calcula obteniendo los valores singulares de la matriz densidad reducida del sistema. Estos cálculos pueden escribirse de manera eficiente en el lenguaje de los **estados producto de matrices** (MPS) y realizarse mediante métodos numéricos cuasi-exactos como el **grupo de renormalización de la matriz densidad** (DMRG). En el *Capítulo 2* realizamos una rápida introducción al lenguaje de los MPS, representación heredada del área de la información cuántica, y al DMRG.

La búsqueda de estados novedosos que albergan una topología no trivial se ha convertido en un área de estudio con fuerte relevancia dentro de la física de la materia condensada y ha abierto nuevos caminos hacia la computación cuántica tolerante a errores [46]. En el *Capítulo 4*, haciendo uso de técnicas numéricas como el DMRG, caracterizaremos las fases topológicas de un superconductor topológico, el cual en su estado fundamental alberga **modos borde de Majorana** (*Majorana bound states*, MBSs).

Los MBSs pueden ser pensados como el equivalente en materia condensada a los fermiones de Majorana, partículas fundamentales encontradas por E. Majorana [28] en 1937 como solución a la ecuación de Dirac, pero aún nunca detectadas en la naturaleza. Los MBSs se caracterizan por poseer una estadística no-Abeliana comportándose así como aniones. Esta exótica estadística los hace muy atractivos desde un punto de vista fundamental y tecnológico. Estudiaremos en el *Capítulo 4* como se manifiestan en los bordes de un superconductor topológico y como interactúan bajo la acción de un campo magnético.

Capítulo 2

Entrelazamiento cuántico, Estados productos de matrices y DMRG

En este capítulo introducimos brevemente algunos conceptos fundamentales de la física de muchos cuerpos (*Many Body physics*), algunos de ellos heredados de la teoría de la información cuántica. En particular, definimos uno de los fenómenos mecánico-cuántico más interesantes y escurridizos conocidos hasta la fecha, el **entrelazamiento cuántico**.

El entrelazamiento en un sistema es un fenómeno fundamental en la mecánica cuántica e implica que los diferentes grados de libertad de un sistema cuántico no pueden ser descriptos de manera independiente ni local. Desde las primeras discusiones entre Bohr y Einstein, y los experimentos mentales de mediados de la década del '30 realizados por Einstein, Podolsky y Rosen que los llevaron a postular la renombrada “Paradoja EPR” [9], hasta los grandes avances logrados en las últimas décadas propiciados por la conjunción de varias áreas de la física. El entendimiento de este (muy) contra-intuitivo fenómeno ha mostrado ser de gran utilidad para la descripción de sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Por ejemplo, las propiedades de escalo de la entropía del entrelazamiento ayudan a caracterizar los sistemas críticos [7, 48, 37], y el entrelazamiento es la base para la clasificación de los ordenes topológicos [25, 19].

Además de los conceptos previamente mencionados, en este capítulo se realiza una breve introducción a la representación de **estados productos de matrices** (*Matrix Product State, MPS*). Esta representación, desarrollada en los últimos años y heredada del área de la información cuántica, es una forma muy eficiente de representar estados entrelazados de muchos cuerpos. El entendimiento de este formalismo ha permitido el desarrollo de algoritmos eficientes para el cálculo de estados fundamentales de Hamiltonianos (DMRG), evolución temporal de estados

(TEBD) y cálculos dinámicos. Aunque el DMRG fue desarrollado originalmente sin el uso de los MPS, las últimas implementaciones de este famoso algoritmo se apoyan en esta nueva formulación que, además, a permitido extender el concepto para desarrollar métodos eficientes en dimensiones mayores (PEPS, MERA). En este capítulo desarrollamos el concepto fundamental del funcionamiento del DMRG, descrito en el lenguaje de los MPS.

2.1. Generalidades

2.1.1. Entrelazamiento cuántico

Consideremos un sistema cuántico que vive en una red de L sitios con una base local de estados $\{\sigma_i\}$ con dimensión d en cada sitio $i \in \{1, 2, \dots, L\}$. Como ejemplo, podemos pensar en una cadena de spines- $\frac{1}{2}$ donde los estados locales son $|\downarrow\rangle$, $|\uparrow\rangle$ y $d = 2$. En principio la red puede tener una dimensión arbitraria, solo necesitamos definir un orden para identificar a los sitios. Sin embargo, en lo que sigue, siempre trabajaremos con cadenas unidimensionales de L sitios.

Los estados puros del sistema están definidos en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ de dimensión L^d , donde

$$\mathcal{H} = \otimes_{i=1}^L \mathcal{H}_i \quad \mathcal{H} = \{|1_i\rangle, \dots, |d_i\rangle\} \quad (2.1)$$

y el estado más general posible se escribe como

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c^{\sigma_1 \dots \sigma_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle \quad (2.2)$$

El problema más común en las simulaciones numéricas radica en que el número de coeficientes $c^{\{\sigma\}}$ crece exponencialmente con el tamaño del sistema L como d^L , por ejemplo, para el caso de una cadena de spin- $\frac{1}{2}$ de 100 sitios tenemos $2^{100} \sim 10^{30}$ coeficientes. Una primera aproximación al problema, en orden de reducir el número de parámetros, consiste en factorizar los coeficientes como

$$c^\sigma = c^{\sigma_1} \cdot c^{\sigma_2} \dots c^{\sigma_L} \quad (2.3)$$

ahora, en vez de tener d^L coeficientes, tenemos que trabajar con dL coeficientes -200 para el ejemplo anterior- y, si además, consideramos invarianza traslacional solo es necesario trabajar con d coeficientes. Esta aproximación no es más que una **teoría de campo medio** (*mean field theory*) que, a pesar de ser muy exitosa en muchos campos, no captura el fenómeno fundamental del entrelazamiento

cuántico.

Volvamos al ejemplo de la cadena de spines, pero consideremos una cadena de solo 2 sitios. En este caso, por el principio de superposición y porque el espacio de Hilbert del sistema es $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, el estado más general posible es

$$|\Psi\rangle = c^{\uparrow\uparrow}|\uparrow\uparrow\rangle + c^{\uparrow\downarrow}|\uparrow\downarrow\rangle + c^{\downarrow\uparrow}|\downarrow\uparrow\rangle + c^{\downarrow\downarrow}|\downarrow\downarrow\rangle \quad (2.4)$$

Es fácil ver que no cualquier estado se puede factorizar, es decir escribir como el producto tensorial de otros dos, para ver esto podemos considerar como ejemplo un estado singlete, el cual no puede ser factorizado. Un estudio más profundo sobre los estados tripletes puede verse en [45].

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle \quad (2.5)$$

Estados que si son factorizables se conocen como **estados productos**, mientras los que no lo son reciben el nombre de **estados entrelazados**. La propiedad más exótica de los estados entrelazados es el hecho de que albergan información de manera no local, una propiedad esencial y esquiva a la intuición de la mecánica cuántica.

2.1.2. Descomposición de Schmidt

Consideremos un sistema unidimensional compuesto por dos partes, A y B , como se observa en la Fig.2.1 el espacio de Hilbert del sistema bipartito será de la forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \quad (2.6)$$

donde $\mathcal{H}_A$ ($\mathcal{H}_B$) es el espacio de Hilbert de la parte A (B). Llamemos $\{|i\rangle\}$ y $\{|j\rangle\}$ a las bases de los espacios de Hilbert de cada parte del sistema respectivamente.

A cualquier estado del sistema bipartito $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, podemos descomponerlo en la base $\{|i\rangle_A |j\rangle_B\}$ de la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} c_{i,j} |i\rangle_A |j\rangle_B \quad (2.7)$$

donde $c_{i,j}$ serán los coeficientes de la expansión.

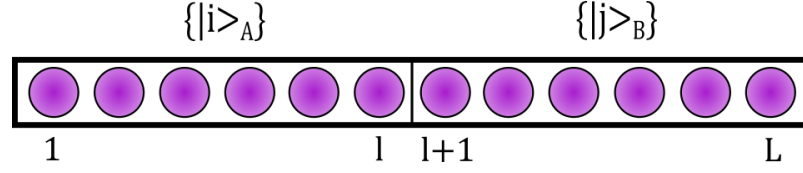


Figura 2.1: Bipartición de un sistema cuántico en los bloques A y B.

Descomposición en valores singulares (SVD):

Sea $M \in \mathbb{C}^{n \times m}$, entonces M acepta la siguiente descomposición:

$$M = UDV^\dagger$$

siendo U una matriz de dimensión $(n \times \min(n, m))$ con columnas ortonormales (los *vector singulares izquierdos*), tal que si $n \leq m$ entonces $U^\dagger U = \mathbb{I}$. V matriz de dimensión $(\min(n, m) \times m)$ con columnas ortonormales (los *vector singulares derechos*), tal que si $n \geq m$ esto implica que $V^\dagger V = \mathbb{I}$. Y por último D una matriz diagonal de dimensión $(\min(n, m) \times \min(n, m))$ con entradas no negativas $D_{aa} = s_a$, cuya forma es

$$D = \begin{pmatrix} s_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s_r \end{pmatrix} \quad r \leq m, n$$

Los valores $s_1 \geq s_2 \dots \geq s_r$ se conocen como los valores singulares de M . La cantidad de valores singulares no nulos r es el **rango de Schmidt** de M .

Realizando una SVD sobre la matriz de coeficientes $c = (c_{i,j})$

$$c = UDV^\dagger \equiv c_{i,j} = \sum_k u_{i,k} s_k \bar{v}_{j,k} \quad (2.8)$$

se puede escribir al estado $|\Psi\rangle$ como

$$|\Psi\rangle = \sum_k s_k \underbrace{\left(\sum_i u_{i,k} |i\rangle_A \right)}_{\in A} \overbrace{\left(\sum_j \bar{v}_{j,k} |j\rangle_B \right)}^{\in B} \quad (2.9)$$

en donde inmediatamente vemos que, mediante la SVD aplicada a la matriz de coeficientes c , el estado $|\Psi\rangle$ pasa a escribirse como la suma de productos tensoriales de estados correspondientes a la parte A y B del sistema. Esta suma está

pesada por los valores singulares de la matriz de coeficientes,

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^r s_k |\Psi_A^k\rangle \otimes |\Psi_B^k\rangle \quad (2.10)$$

La anterior descomposición, la cual es única, se conoce como la **descomposición de Schmidt**. Los s_k son los coeficientes de Schmidt, $|\Psi_{(A,B)}^k\rangle$ son los autovectores de Schmidt y r es el rango de Schmidt.

2.1.3. Matriz densidad y Matriz densidad reducida

Consideremos el valor medio de un observable Π en el estado $|\Psi\rangle$, es decir $\langle\Psi|\Pi|\Psi\rangle$, se puede ver que

$$\langle\Psi|\Pi|\Psi\rangle = \text{Tr} [\Pi|\Psi\rangle\langle\Psi|] \quad (2.11)$$

El valor medio del operador Π sobre un conjunto de estados $\{\psi_i\}$ con probabilidad de ocurrencia ρ_i se puede obtener como

$$\sum_i \langle\psi_i|\Pi|\psi_i\rangle = \sum_i \rho_i \text{Tr} [\Pi|\psi_i\rangle\langle\psi_i|] \quad (2.12)$$

$$= \text{Tr} \left[\Pi \sum_i \rho_i |\Psi\rangle\langle\Psi| \right] \quad (2.13)$$

$$= \text{Tr} \Pi \rho \quad (2.14)$$

donde ρ , conocido como el **operador densidad**, se define como

$$\rho = \sum_i \rho_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (2.15)$$

y sus elementos (ρ) forman la llamada **matriz densidad**.

Dado un estado entrelazado de la forma $|\Psi\rangle = \sum_i c_{i,j} |i\rangle_A |j\rangle_B$, donde A y B son las partes de un sistema bipartito. Se puede definir un operador que actúe solo en la parte A del sistema de la forma $\Pi = \Pi_A \otimes \mathbb{I}_B$. Si calculamos el valor

medio del operador en el estado entrelazado, tenemos

$$\langle \Psi | \Pi_A \otimes \mathbb{I}_B | \Psi \rangle = \sum c_{i,j} c_{i',j'}^* (\langle i' |_A \langle j' |_B) (\Pi_A \otimes \mathbb{I}_B) (|i\rangle_A |j\rangle_B) \quad (2.16)$$

$$= \sum c_{i,j} c_{i',j'}^* \langle i' | \Pi_A | i \rangle \quad (2.17)$$

$$= \sum c_{i,j} c_{i',j'}^* \text{Tr} [\Pi_A |i'\rangle \langle i|] \quad (2.18)$$

$$= \text{Tr} \Pi_A \rho_A \quad (2.19)$$

siendo ahora $\rho_A = \sum_{i,i',j} c_{i,j} c_{i',j}^* |i\rangle \langle i'|$ el operador densidad reducido y $\rho_{i,i'}^A = (cc^\dagger)_{i,i'}$ (no confundir con los operadores de creación y destrucción) la **matriz densidad reducida**. Podemos pensar a este último operador como la ‘traza parcial’ de la matriz densidad.

$$\rho_A = \text{Tr}_B \rho = \sum_{i,i',j} \langle i, j | \rho | i', j \rangle |i\rangle \langle i'| \quad (2.20)$$

Es decir, para obtener la matriz reducida de la parte A del sistema, tomamos la matriz densidad y la ‘trazamos’ sobre la parte B del mismo. Este nuevo operador describe cualquier propiedad del sistema respecto a la bipartición A.

Consideremos ahora la descomposición de Schmidt de un vector $|\Psi\rangle$ del espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ (Eq. 2.10), entonces la matriz reducida del subsistema A es

$$\rho_A = \text{Tr}_B \left[\sum_{k,l} s_k s_l |\Psi_A^k\rangle \langle \Psi_A^l| |\Psi_B^k\rangle \langle \Psi_B^l| \right] \quad (2.21)$$

$$= \sum_{k,l} s_k s_l |\Psi_A^k\rangle \langle \Psi_A^l| \underbrace{\text{Tr}_B [|\Psi_B^k\rangle \langle \Psi_B^l|]}_{\delta_{kl}} \quad (2.22)$$

$$= \sum_k s_k^2 |\Psi_A^k\rangle \langle \Psi_A^k| \quad (2.23)$$

Inmediatamente vemos que los coeficientes de Schmidt (s_k) al cuadrado son los autovalores no nulos de la matriz densidad reducida ρ_A (ρ_B) y que los vectores de Schmidt son los autovectores correspondientes.

2.1.4. Cuantificando el entrelazamiento

Queremos encontrar una cantidad que nos permita discernir si un estado es separable o entrelazado, además nos interesa conocer ‘que tan’ entrelazado está dicho estado. Nuevamente, la descomposición de un estado $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, donde $\mathcal{H} =$

$\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ en la forma de Schmidt es

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^r s_k |\Psi_A^k\rangle \otimes |\Psi_B^k\rangle \quad (2.24)$$

donde los estados $\{|\Psi_{A(B)}^k\rangle\}$ forman una base ortonormal del subespacio $\mathcal{H}_{A(B)}$ y $s_k > 0$. Un aspecto importante de esta descomposición es que nos brinda una idea directa del **entrelazamiento bipartito** de un estado, es decir, el entrelazamiento cuántico entre los grados de libertad en $\mathcal{H}_A$ y $\mathcal{H}_B$. Si no existe entrelazamiento entre ambos subsistemas entonces el estado es un estado producto no correlacionado y la descomposición de Schmidt solo posee un coeficiente no nulo ($s_1 = 1$ y $s_{k>1} = 0$). Por otro lado, si los grados de libertad de los dos subsistemas están entrelazados, múltiples coeficientes de Schmidt serán no nulos pero decrecerán de manera exponencial, diremos que existe una correlación *imperfecta*. En el caso particular donde todos los coeficientes sean iguales, la correlación será *perfecta* (ver Fig. 2.2).

Definimos la llamada **entropía de entrelazamiento** (*entanglement entropy*) como la entropía de von Neumann de la matriz densidad reducida ρ_A ,

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) \quad (2.25)$$

por la Eq. 2.23 podemos expresar a la entropía de entrelazamiento en términos de los valores de Schmidt como

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A) = -\sum_k s_k^2 \ln s_k^2. \quad (2.26)$$

El mismo resultado es encontrado si utilizamos la matriz densidad reducida ρ_B . De manera sencilla vemos que, si no existe entrelazamiento entre los dos subsistemas entonces $S = 0$, en cambio si $S > 0$ entonces ambos subsistemas están entrelazados.

Para demostrar los conceptos definidos en el párrafo de arriba consideremos un sistema formado por dos spines $\frac{1}{2}$ con una bipartición donde el primer spin es el subsistema A y el otro el B . Como primer ejemplo tomemos el siguiente estado:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \quad (2.27)$$

el cual puede ser descompuesto como

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (2.28)$$

como puede ser escrito como un estado producto, la entropía de entrelazamiento será nula ($S = 0$). Como segundo ejemplo consideremos el siguiente estado

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.29)$$

con una descomposición de Schmidt

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \quad (2.30)$$

este estado presenta un entrelazamiento máximo (*maximally entangled state*) con una entropía de entrelazamiento $S = \ln 2$,

$$\begin{aligned} S &= - \sum_{k=1}^2 s_k^2 \ln s_k^2 \\ &= - \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} \right) \\ &= \ln 2 \end{aligned} \quad (2.31)$$

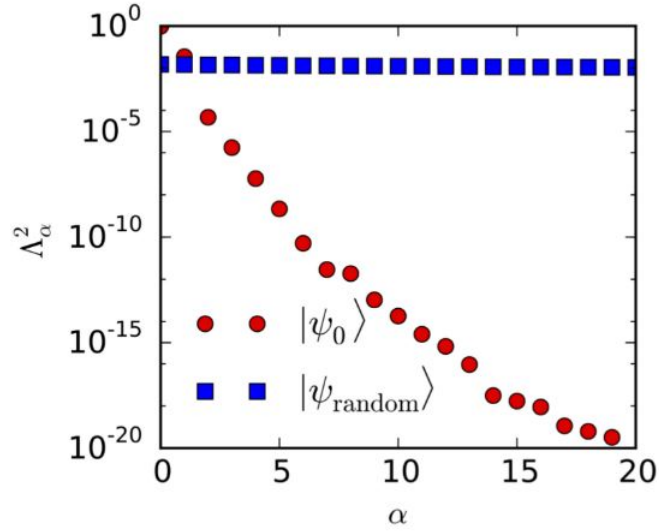


Figura 2.2: Comparación del espectro de entrelazamiento de un estado con correlación imperfecta (rojo) y un estado con correlación perfecta (azul). El índice α representa a los coeficientes de Schmidt en orden.

2.1.5. Ley de Área

Decimos que un estado $|\Psi\rangle$ satisface una **Ley de Área** (*Area law*) si por cada región A del sistema, el entrelazamiento $E(A)$ escala como

$$E(A) \leq \alpha |\partial A| \quad (2.32)$$

siendo ∂A el área del contorno de la región A.

Es de particular interés para las secciones posteriores remarcar que el estado fundamental $|\Psi_0\rangle$ de un hamiltoniano con interacciones locales y ‘gapeado’, es decir donde existe un gap finito de energía entre el estado fundamental y los estados excitados, respeta la Ley de Área enunciada anteriormente.

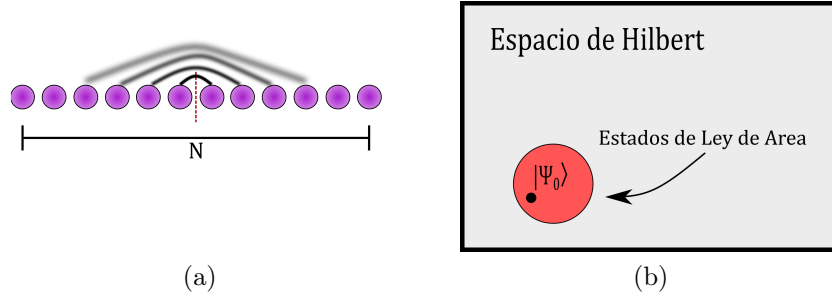


Figura 2.3: (a) Fluctuaciones cuánticas significativas en estados fundamentales con gap ocurren solo a cortas escalas. (b) Estados de ley de área 1D constituyen una fracción muy pequeña del espacio de Hilbert.

Que un estado satisfaga una ley de área implica que la entropía de entrelazamiento de dicho estado crece proporcionalmente con el área de la región de corte, luego $S(N)$ es constante para $N \geq \xi$, siendo ξ la longitud de correlación. De manera más intuitiva podemos pensar que un estado fundamental gapeado contiene solo fluctuaciones cuánticas en la longitud de correlación ξ y por ello solo los grados de libertad cerca del corte estarán entrelazados fuertemente, como se muestra en la Fig. 2.3 (a). Una demostración rigurosa de lo recién enunciado se encuentra en [13].

Como vimos, los estados fundamentales son muy especiales y pueden ser encontrados en un pequeño rincón del espacio de Hilbert como se ilustra en la Fig. 2.3 (b). Para estados muy poco entrelazados un número relativamente pequeño de estados contribuyen significativamente, es decir solo unos pocos coeficientes de Schmidt poseen un peso significativo, como se muestra en la Fig. 2.2.

Como un ejemplo de un estado que sigue la ley de Área, consideremos el estado

fundamental del modelo de Ising con campo transversal

$$H = - \sum_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + g \sigma_j^x \quad (2.33)$$

con una transición de fase en $g = 1$, este modelo presenta dos límites muy simples. Para $g = 0$, el estado fundamental es dos veces degenerado y está dado por el estado producto ferromagnético, y a $g \rightarrow \infty$, el estado fundamental es nuevamente un estado producto en el cual todos los espines están polarizados. Para valores intermedios de g , los estados fundamentales son estados entrelazados (excepto en el punto crítico $g = 1$). Estos estados fundamentales tienen esencialmente todo el peso contenido en unos pocos coeficientes de Schmidt.

Otros estados que cumplen la ley de Área muestran un comportamiento similar y, por lo tanto, la observación anterior proporciona un enfoque extremadamente útil para «comprimir» estados cuánticos al truncar la descomposición de Schmidt. En particular, siempre podemos truncar la descomposición de Schmidt en algún D finito tal que

$$\| |\Psi\rangle - \sum_{\alpha=1}^D s_{\alpha} |\alpha\rangle_A \otimes |\alpha\rangle_B \| < \epsilon, \quad \forall \epsilon > 0 \quad (2.34)$$

Esta propiedad particular de los estados que siguen la ley de Área está íntimamente relacionada a la representación de los estados producto de matrices para estados cuánticos en 1D, como se demostrará en la próxima sección.

2.2. Estados productos de matrices (MPS)

En esta sección se realiza una breve introducción a la representación MPS (*matrix product states*), lenguaje derivado del área de la información cuántica e introducido en varias ocasiones en los últimos 50 años (de manera más notable quizás en [6]). Sin embargo, el estudio de los MPS solo cobra relevancia a partir del 2004 con los trabajos de Cirac, Verstraete y Vidal [51, 54] para luego ser adoptado como una potente herramienta en el estudio de fases protegidas por simetrías, transiciones de fases topológicas y otros fenómenos en el área de sistemas fuertemente correlacionados. En la actualidad existen varios trabajos introductorios a esta representación, entre ellos [43, 44, 36].

Consideremos una cadena unidimensional de L sitios con espacios locales de dimensión d , $\{\sigma_i\}$, en los sitios $i = 1 \dots L$. Como vimos anteriormente, el estado

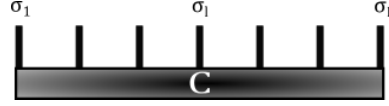
cuántico puro más general posible es

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}^d c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (2.35)$$

con dimensión d^L . ¿Podemos encontrar una notación que de una noción más local del estado, preservando la no-localidad del mismo?

2.2.1. Construcción de un MPS

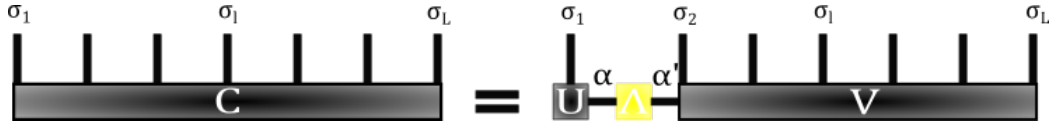
Tomando al estado $|\Psi\rangle$ podemos pensar a los coeficientes $c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$ como un tensor de L índices donde cada índice puede tomar d valores. Además como existe una relación uno a uno entre $|\Psi\rangle$ y los $c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$ representamos gráficamente al estado como



Otra forma de pensar a los coeficientes es como una matriz de dimensión $d \times d^{L-1}$, compuesta por σ_1 filas y $(\sigma_2, \dots, \sigma_L)$ columnas, es decir $c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} = c_{\sigma_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}$. Hagamos ahora una SVD de esta última matriz, obtenemos

$$\mathcal{C} = c_{\sigma_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} = \sum_{\alpha, \alpha'} \mathcal{U}_{\sigma_1, \alpha} \Lambda_{\alpha, \alpha'} \mathcal{V}_{\alpha', (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} \quad (2.36)$$

es decir, $\mathcal{C} = \mathcal{U} \Lambda \mathcal{V}$. Donde $\Lambda_{\alpha, \alpha'} = \lambda_{\alpha} \delta_{\alpha, \alpha'}$ es una matriz diagonal con entradas positivas y $\mathcal{U}, \mathcal{V}$ son matrices isométricas, de forma gráfica esto se lee como



Expresamos ahora al estado $|\Psi\rangle$ con las matrices $\mathcal{U}, \mathcal{V}$ y Λ ,

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L, \alpha} \mathcal{U}_{\sigma_1, \alpha} \Lambda_{\alpha, \alpha} \mathcal{V}_{\alpha, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (2.37)$$

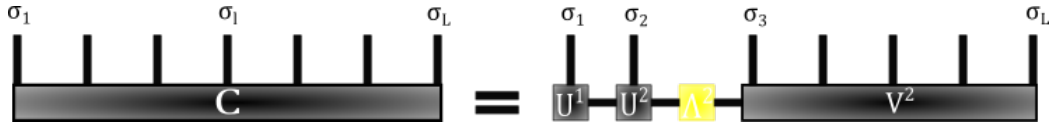
$$= \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha, \alpha} \underbrace{\left(\sum_{\sigma_1} \mathcal{U}_{\sigma_1, \alpha} |\sigma_1\rangle \right)}_{=|l_{\alpha}\rangle} \underbrace{\left(\sum_{\sigma_2, \dots, \sigma_L} \mathcal{V}_{\alpha, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} |\sigma_2, \dots, \sigma_L\rangle \right)}_{=|r_{\alpha}\rangle} \quad (2.38)$$

se puede ver que los vectores $\{|l_\alpha\rangle\}$ forman una base ortonormal, mientras que los $\{|r_\alpha\rangle\}$ en general no. Esto puede ser pensado como la descomposición de Schmidt de $|\Psi\rangle$ en la partición $(1|2, \dots, L)$ con $\Lambda_{\alpha,\alpha}$ los coeficientes de Schmidt de las descomposición, con la salvedad de que los $\{|r_\alpha\rangle\}$ no cumplen necesariamente la ortonormalidad.

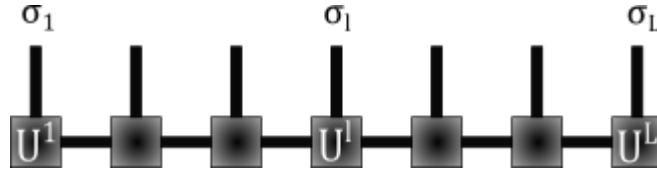
Ahora llamemos $\mathcal{U} = \mathcal{U}^{(1)}$, $\mathcal{V} = \mathcal{V}^{(1)}$, $\Lambda = \Lambda^{(1)}$ y definimos la matriz $\mathcal{M}^{(1)} = \Lambda^{(1)}\mathcal{V}^{(1)}$ o en componentes

$$\mathcal{M}_{\alpha,\sigma_2,(\sigma_3,\dots,\sigma_N)}^{(1)} = \sum_{\alpha'} \Lambda_{\alpha,\alpha'} \mathcal{V}_{\alpha',(\sigma_2,\dots,\sigma_N)}^{(1)} \quad (2.39)$$

a continuación realizamos una SVD sobre $\mathcal{M}^{(1)}$, gráficamente obtenemos



donde $\Lambda^{(2)}$ es una matriz diagonal con entradas positivas o nulas y $\mathcal{U}^{(2)}$ ($\mathcal{V}^{(2)}$) es isométrica. Nuevamente, esto no es más que hacer la descomposición de Schmidt en el corte $(1, 2|3, \dots, L)$. Ahora podemos seguir con el procedimiento propuesto, definiendo nuevas matrices auxiliares $\mathcal{M}$ de la forma $\mathcal{M}^{(k)} = \Lambda^{(k)}\mathcal{V}^{(k)}$ para $k = 2, \dots, L$ y descomponiéndolas mediante una SVD, terminamos arribando a una representación de $\mathcal{C}$ de la forma



El estado $|\Psi\rangle$ se puede representar como un **producto de matrices** (*Matrix Product State*) de la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1} \mathcal{U}_{\sigma_1}^{(1)} \mathcal{U}_{\sigma_2}^{(2)} \dots \mathcal{U}_{\sigma_{L-1}}^{(L-1)} \mathcal{U}_{\sigma_L}^{(L)} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle \quad (2.40)$$

Donde las matrices $\mathcal{U}$ están normalizadas a izquierda (*left-normalized*)

$$\sum_{\sigma_i} \mathcal{U}_{\sigma_i}^\dagger \mathcal{U}_{\sigma_i} = I \quad (2.41)$$

aunque no a derecha, es decir $\sum_{\sigma_i} \mathcal{U}_{\sigma_i} \mathcal{U}_{\sigma_i}^\dagger \neq I$. Poseen dimensión $(1 \times D_1)(D_1 \times D_2) \dots (D_{L-2} \times D_{L-1})(D_{L-1} \times D_L)$, con igual número de columnas y filas a las

matrices vecinas para asegurar que el producto esté bien definido. Además la primer matriz y la última aseguran que el producto total arroje un escalar. Las dimensiones D_i se conocen como *bond dimension* y son equivalentes al rango de Schmidt de la matriz, en general toma el valor $\min(d^i, d^{L-i})$. De esto último vemos que el número de parámetros crece exponencialmente con el número de sitios, por lo tanto no hemos reducido el número de parámetros al cambiar la representación del estado - algo esperable porque la representación en MPS es exacta. Veremos, más adelante, que esta representación es muy útil para comprimir los estados y evitar así el problema del crecimiento descontrolado en el número de parámetros.

Es fácil observar que esta descomposición no es única, consideremos una matriz X arbitraria pero reversible de dimensión $(D_i \times D_i)$. El estado producto matricial no cambiará ante la inserción de $XX^{-1} = 1$ entre las matrices $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ y $\mathcal{U}_{\sigma_{i+1}}$, lo que implica una transformación de gauge de la forma

$$\mathcal{U}_{\sigma_i} \rightarrow \mathcal{U}_{\sigma_i} X \quad \mathcal{U}_{\sigma_{i+1}} \rightarrow X^{-1} \mathcal{U}_{\sigma_{i+1}} \quad (2.42)$$

por lo que tenemos una libertad de gauge en nuestra representación matricial de los estados.

Como la construcción de esta representación de hizo se izquierda a derecha se le llama *left canonical*, mientras que si se hubiera empezado desde el lado opuesto se conocería como *right canonical*. Otra posibilidad es mezclar ambas descomposiciones obteniendo la descomposición conocida como *mixed canonical*, a continuación desarrollaremos esta última **forma canónica**.

Asumamos que realizamos la descomposición desde el lado izquierdo hasta el sitio ℓ , tenemos que

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = \sum_{\alpha_\ell} (\mathcal{U}_{\sigma_1} \dots \mathcal{U}_{\sigma_\ell}) \Lambda_{\alpha_\ell, \alpha_\ell} \mathcal{V}_{\alpha_\ell, (\sigma_{\ell+1} \dots \sigma_L)} \quad (2.43)$$

Redefinimos a $\mathcal{V}$ como $\mathcal{V}_{(\alpha_\ell \sigma_{\ell+1} \dots \sigma_{L-1}), \sigma_L}$ y realizamos sucesivas SVDs desde la derecha hasta incluido el sitio $\sigma_{\ell+2}$, obteniendo

$$\mathcal{V}_{\alpha_\ell, (\sigma_{\ell+1} \dots \sigma_L)} = \sum_{\alpha_{\ell+1}, \dots, \alpha_{L-1}} \mathcal{W}_{\alpha_\ell, \alpha_{\ell+1}}^{\sigma_{\ell+1}} \dots \mathcal{W}_{\alpha_{L-1}}^{\sigma_L} \quad (2.44)$$

Todas las matrices $\mathcal{W}$ están normalizadas a derecha (*right-normalized*).

Arribamos finalmente a una descomposición de la forma

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = \mathcal{U}_{\sigma_1} \dots \mathcal{U}_{\sigma_\ell} \Lambda \mathcal{W}_{\sigma_{\ell+1}} \dots \mathcal{W}_{\sigma_L} \quad (2.45)$$

que contiene a los valores singulares en la unión $(\ell, \ell + 1)$ y puede ser representado gráficamente como se muestra en la Fig. 2.4

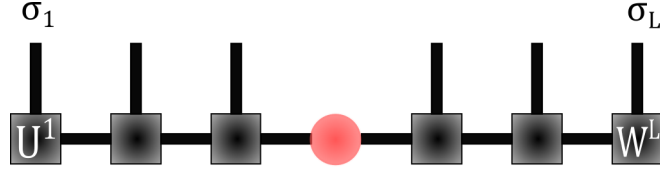


Figura 2.4: Representación gráfica de un MPS en la forma canónica mixta. El círculo del medio representa la matriz diagonal de valores singulares. Las matrices a la izquierda son left-normalized y a la derecha right-normalized.

Esta nueva representación es la descomposición de Schmidt del estado en las particiones A y B del sistema, donde A va desde el sitio 1 al ℓ y B desde el $\ell + 1$ al L . Si introducimos los siguientes vectores

$$|a_\ell\rangle_A = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_\ell} (\mathcal{U}_{\sigma_1} \dots \mathcal{U}_{\sigma_\ell})_{1, a_\ell} |\sigma_1, \dots, \sigma_\ell\rangle \quad (2.46)$$

$$|a_\ell\rangle_B = \sum_{\sigma_{\ell+1}, \dots, \sigma_L} (\mathcal{W}_{\sigma_{\ell+1}} \dots \mathcal{W}_{\sigma_L})_{a_\ell, 1} |\sigma_{\ell+1}, \dots, \sigma_L\rangle \quad (2.47)$$

entonces el estado toma la forma ($\lambda_\alpha = \Lambda_{\alpha, \alpha}$)

$$|\Psi\rangle = \sum_{a_\ell} \lambda_\alpha |a_\ell\rangle_A |a_\ell\rangle_B \quad (2.48)$$

siendo la descomposición de Schmidt formada por estados de A y B , los cuales son respectivamente ortogonales.

Como hemos visto, la dimensión de un MPS crece de manera exponencial, por lo que parecerían no ser útiles computacionalmente. ¿Podemos encontrar un procedimiento para comprimir un MPS con una pérdida mínima de información? Asumamos que tenemos el estado en la forma Eq. 2.48, donde los vectores $\{|a_\ell\rangle_A\}$ y $\{|a_\ell\rangle_B\}$ forman una base ortonormal. Los coeficientes λ_α^2 representan los pesos estadísticos en el operador densidad reducido (*Sección 2.1.3*), luego el truncado más óptimo consiste en retener solo los pares de estados de Schmidt que tengan mayores coeficientes de Schmidt. Si solo podemos permitir matrices de dimensión máxima D y asumimos un orden descendente de los valores singulares, entonces cortamos la dimensión de las columnas de $\mathcal{U}_{\sigma_\ell}$ a D y de igual manera con la dimensión de las filas de $\mathcal{W}_{\sigma_{\ell+1}}$.

La calidad del procedimiento de truncamiento esbozado en el párrafo anterior dependerá de que tan rápido los valores singulares λ_α decaigan con α : si estos valores decaen rápidamente, el peso estadístico de los terminos truncados será

despreciable. En la práctica, solo podemos asegurar que esto último ocurra en estados que satisfagan una Ley de Área, como se vio previamente. En general si deseamos mantener una dimensión del orden de $D \sim 1000$ el error de truncamiento estará en el orden de 10^{-10} . Finalmente, la factibilidad de la representación MPS recae en estas propiedades del entrelazamiento, se dice que los MPS brindan una representación de bajo entrelazamiento (*low-entanglement representation*).

2.2.2. Ejemplos

A continuación se presentan algunos ejemplos concretos de estados en la representación MPS.

(1) Estado de Néel. El estado $|\dots \uparrow \downarrow \dots\rangle$ es un estado producto con una bond dimension $D = 1$ y un espacio de Hilbert local de $d = 2$. La representación MPS en la forma left-canonical está dada por

$$\mathcal{U}^{[2n-1]\uparrow} = \mathcal{U}^{[2n]\downarrow} = 1 \quad \text{y} \quad \mathcal{U}^{[2n-1]\downarrow} = \mathcal{U}^{[2n]\uparrow} = 0 \quad (2.49)$$

para $n = 1, \dots, L/2$. Vemos que para este estado las ‘matrices’ son simples escalares.

(2) Estado dimerizado. Producto de singletes $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \otimes \dots \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ en sitios vecinos, puede ser escrito con matrices de 1×2 en los sitios impares y matrices de 2×1 en los pares.

$$\mathcal{U}^{[2n-1]\uparrow} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{U}^{[2n-1]\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.50)$$

$$\mathcal{U}^{[2n]\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{U}^{[2n]\downarrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

(3) Estado AKLT de spin-1. Nombrado así por Affleck, Kennedy, Lieb y Tasaki, el estado AKLT [1] es el estado fundamental del siguiente Hamiltoniano

$$H = \sum_j \vec{S}_j \vec{S}_{j+1} + \frac{1}{3} (\vec{S}_j \vec{S}_{j+1})^2 = 2 \sum_j \left(P_{j,j+1}^{S=2} - \frac{1}{3} \right) \quad (2.52)$$

donde $\vec{S}$ son operadores de spin $S = 1$ y $P_{j,j+1}^{S=2}$ es un proyector dentro del sector de spin $S = 2$ actuando en los sitios j y $j+1$. Para construir el estado fundamental, notemos que el proyector $P_{j,j+1}^{S=2}$ no contribuye si descomponemos los spines $S = 1$ en cada sitio como dos spines $S = \frac{1}{2}$ y formamos singletes entre spines de sitios vecinos, como se ilustra en la Fig. 2.5. En una cadena con condiciones de contorno

abiertas los spines $S = \frac{1}{2}$ de los extremos no contribuyen a la energía, luego el estado fundamental presenta una cuádruple degeneración.

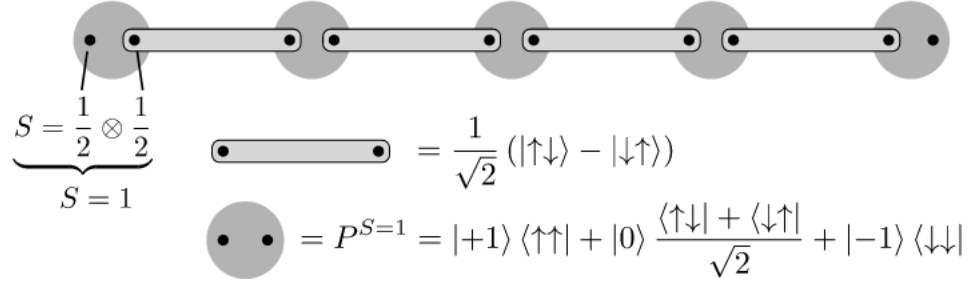


Figura 2.5: Representación diagramática de el estado AKLT. Los sitios $S = 1$ son descompuestos en dos sitios $S = \frac{1}{2}$ que forman singletes entre sitios vecinos. Con condiciones de contorno abiertas, los spines $S = \frac{1}{2}$ a la derecha y a la izquierda son modos libres produciendo que el estado contenga una degeneración cuádruple.

Para los sitios $1 < \ell < L$ las matrices de la representación MPS son las siguientes:

$$\begin{aligned}
 M^{[n]+1} &= \sqrt{\frac{4}{3}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} & M^{[n]0} &= \sqrt{\frac{4}{3}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\
 M^{[n]-1} &= \sqrt{\frac{4}{3}} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.53}$$

Como síntesis de la sección, se listan a continuación las principales propiedades que hacen a los MPS una representación de gran interés práctico.

- Cualquier estado puede ser representado como un MPS.
- Existe una "jerarquía" de los MPS, en el sentido de que estados con bajo entrelazamiento pueden ser representados más eficientemente que los estados con un entrelazamiento mayor. Además, por la Ley de Área, sabemos que estos *low-entanglement states* son los estados fundamentales de los sistemas, muy relevantes en el estudio de los mismo.
- Pueden ser manipulados fácil y eficientemente a la hora de calcular valores de expectación, realizar evoluciones temporales o aplicarles cualquier operador local.
- Emergen de manera natural en el contexto de grupos de renormalización, conectando el marco de referencia del DMRG con el del RG.

- Pueden ser obtenidos eficientemente mediante métodos variacionales como el DMRG.

2.3. Operadores productos de matrices (MPO)

En la sección anterior desarrollamos la representación en producto de matrices para estados cuánticos, en esta sección el objetivo es extender esta representación a operadores [29]. El operador más general posible para una red de L sitios se escribe como

$$\hat{O} = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\sigma'\}} c^{\sigma_1 \dots \sigma_L, \sigma'_1 \dots \sigma'_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1 \dots \sigma'_L| \quad (2.54)$$

donde las variables primadas corresponden al estado en el cual el operador está actuando y las variables no primadas el estado resultante. Reacomodando los índices para agrupar los estados correspondientes al mismo sitio tenemos

$$c^{\sigma_1 \dots \sigma_L, \sigma'_1 \dots \sigma'_L} \rightarrow c^{\sigma_1 \sigma'_1 \dots \sigma_L \sigma'_L} \quad (2.55)$$

Ahora la aproximación de campo medio se lee como

$$c^{\sigma_1 \sigma'_1 \dots \sigma_L \sigma'_L} \rightarrow c^{\sigma_1 \sigma'_1} \dots c^{\sigma_L \sigma'_L} \quad (2.56)$$

Sin embargo, en este caso, esta aproximación se vuelve exacta para muchos operadores. Consideremos al operador $\hat{S}_i^z$ actuando sobre un spin en el sitio i , si aplicamos este operador a nuestra red de L sitios la forma correcta de escribirlo es

$$\hat{S}_i^z \rightarrow \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 \otimes \dots \hat{S}_i^z \otimes \dots \hat{I}_L \quad (2.57)$$

donde los $\hat{I}_l$ son operadores identidad actuando sobre el sitios l . Y los coeficientes de nuestra expansión se leen

$$c^{\sigma_1 \sigma'_1 \dots \sigma_L \sigma'_L} = \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \cdot \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \cdot \dots \cdot (\hat{S}^z)_{\sigma_i, \sigma'_i} \cdot \dots \cdot \delta_{\sigma_L, \sigma'_L} \quad (2.58)$$

Generalizando la notación desarrollada para los MPS, introducimos a los *matrix product operators* (MPO),

$$\hat{O} = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\sigma'\}} M^{\sigma_1 \sigma'_1} M^{\sigma_2 \sigma'_2} \dots M^{\sigma_L \sigma'_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1 \dots \sigma'_L| \quad (2.59)$$

Encontramos que gran parte de los operadores de interés e incluso operadores más complicados como Hamiltonianos pueden ser representados exactamente con una dimensión D pequeña, a diferencia de los MPS donde es necesario realizar una aproximación para representar a los estados eficientemente, en general.

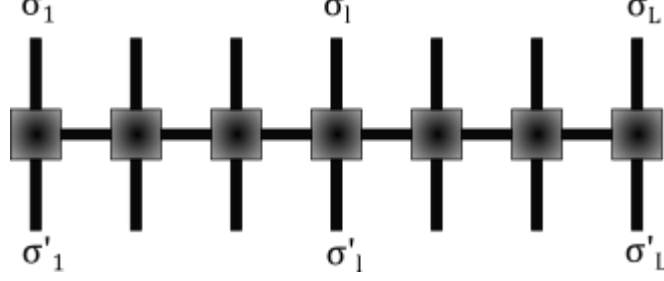


Figura 2.6: Representación gráfica de un MPO. En analogía a un MPS se representa gráficamente a un MPO, ahora con dos patas verticales correspondientes a los estados «entrantes» y «salientes».

Veamos ahora como describimos la acción de un operador $\hat{O}$ sobre un estado $|\Psi\rangle$. Supongamos que el MPS está formado por matrices M^{σ_i} y el MPO por matrices $N^{\sigma_i\sigma'_i}$, el nuevo estado $\hat{O}|\Psi\rangle$ es un MPS con matrices $\tilde{M}^{\sigma_i}$ cuyas entradas son

$$\tilde{M}_{(ab),(a'b')}^{\sigma_i} = \sum_{\sigma'_i} N_{aa'}^{\sigma_i\sigma'_i} M_{bb'}^{\sigma'_i} \quad (2.60)$$

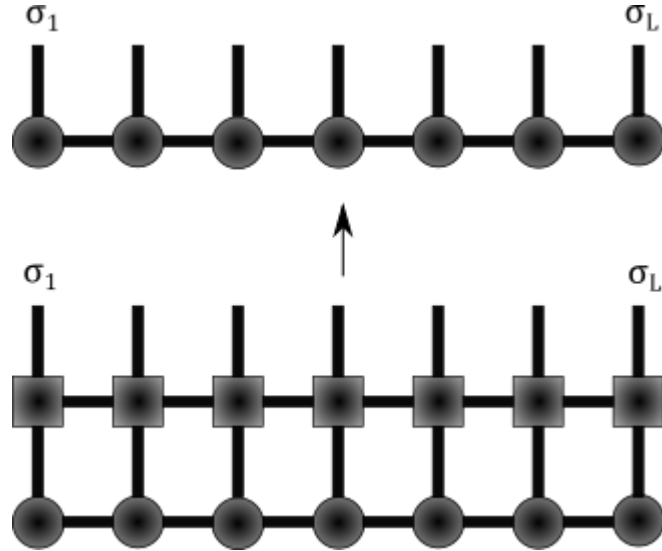


Figura 2.7: Representación gráfica de la acción de un operador sobre un estado.

Estas operaciones pueden ser implementadas de manera muy eficiente. Una observación importante es que la dimensión de las nuevas matrices está dada por el producto de la dimensión de las matrices viejas. Esto puede ser problemático,

principalmente ante la repetida aplicación de operadores sobre un estado dado, por esto último es necesario implementar un «procedimiento de compresión» para evitar el crecimiento no controlado de la dimensión de las matrices.

2.3.1. Representación de un Hamiltoniano como un MPO

Veamos con un ejemplo como se construye un MPO correspondiente a un Hamiltoniano de corto alcance. Como ejemplo tomaremos un modelo de Heisenberg

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^{L-1} \left(\frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \right) + h \sum_{i=1}^L \hat{S}_i^z \quad (2.61)$$

Este consiste de cadenas de operadores del tipo $\hat{I} \otimes \hat{I} \otimes \hat{S}^+ \otimes \hat{S}^- \otimes \hat{I} \dots$. Para simplificar la notación podemos introducir los siguientes operadores escritos como MPOs,

$$\hat{M}^{[i]} = \sum_{\sigma_i, \sigma'_i} M^{\sigma_i, \sigma'_i} |\sigma_i\rangle \langle \sigma'_i| \quad (2.62)$$

luego el Hamiltoniano toma la forma $\hat{H} = \hat{M}^{[1]} \hat{M}^{[2]} \dots \hat{M}^{[L]}$. Las matrices toman la siguiente forma

$$\hat{M}^{[i]} = \begin{bmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^+ & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^- & J\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^+ & \hat{I} \end{bmatrix} \quad (2.63)$$

y para el primer y último sitio

$$\hat{M}^{[1]} = \begin{bmatrix} h\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^- & J\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^+ & \hat{I} \end{bmatrix} \quad \hat{M}^{[L]} = \begin{bmatrix} \hat{I} \\ \hat{S}^+ \\ \hat{S}^z \\ \hat{S}^- \\ h\hat{S}^z \end{bmatrix} \quad (2.64)$$

Podemos identificar $D = 5$ como la dimensión del Hamiltoniano MPO.

2.4. Grupo de renormalización de la matriz densidad (DMRG)

En 1992 Steven R. White [57] introdujo un nuevo algoritmo para el cálculo de estados de baja energía y sus observables en modelos unidimensionales, presentando resultados impresionantemente precisos para las cadenas de Heisenberg antiferromagnéticas de spin 1 y $\frac{1}{2}$. En los 30 años posteriores a la primer publicación el *density matrix renormalization group* (DMRG) ha sido de suma relevancia en el estudio de numerosos sistemas que no habían podido ser abordados con métodos anteriores.

En sistemas de baja dimensionalidad y alta correlación, la intensidad de las interacciones desalienta el uso de métodos analíticos basados en teoría perturbativa debido a la falta de parámetros pequeños. En algunos casos no son capaces de describir estados exóticos como por ejemplo los líquidos de spines. Es por esta razón que en las últimas décadas ha habido un extenso uso de métodos numéricos para resolver problemas en el área de materia condensada, provocando una evolución importante de dichos métodos. La gran mayoría de los métodos numéricos pueden ser agrupados en tres categorías: de diagonalización exacta, variacionales y estocásticos. Los métodos exactos consisten en resolver la ecuación de Schrödinger por fuerza bruta. Los métodos variacionales parten de algún *ansatz* y los métodos estocásticos se basan en un muestreo del espacio de Hilbert utilizando números aleatorios (por ejemplo Monte Carlo cuántico). DMRG (Density Renormalization Group) es un método numérico variacional que se apoya fuertemente en métodos de diagonalización exacta. Originalmente surge como solución al problema propuesto por K. Wilson de una partícula cuántica sin spin en una caja unidimensional. El cálculo de las distintas propiedades de este tipo de sistemas, como por ejemplo la energía del estado fundamental, se dificulta por el crecimiento exponencial del espacio de Hilbert con el tamaño del sistema. Esto provoca que las técnicas de diagonalización exactas estén limitadas a sistemas pequeños aunque se aprovechen todas sus simetrías. Una solución a este problema es la utilización de métodos de Monte Carlo, pero sufre del llamado problema del signo negativo para sistemas fermiónicos o de spines frustrados [50]. En cambio, los métodos NRG (*numerical renormalization group*) y DMRG son técnicas basadas en el truncamiento del espacio de Hilbert y pueden ser utilizados en sistemas más grandes sin el problema del signo negativo. La idea detrás de NRG de K. Wilson [61] consta en diagonalizar exactamente el hamiltoniano de un bloque aislado y luego mantener únicamente los estados de más baja energía truncando todos los demás. En el siguiente paso, se aumenta el tamaño de la red agregando un sitio

al bloque anterior. Con este nuevo bloque, se vuelve a realizar la diagonalización y el truncamiento. S. White se dio cuenta que los estados de más baja energía de un bloque aislado no son necesariamente los mejores para construir un bloque más grande y propuso un nuevo método en donde se utiliza la matriz densidad para describir el sistema (ver Fig. 2.8). El método DMRG es una técnica de gran precisión y eficiencia para sistemas fuertemente correlacionados de baja dimensionalidad y no realiza ningún tipo de suposiciones a priori. Además, aunque su precisión es finita, está totalmente controlada y los resultados que se obtienen son conocidos como «cuasi-exactos». Es por esto que evolucionó para ser aplicado en numerosos campos del conocimiento transformándose en uno de los métodos numéricos dominantes hoy en día.

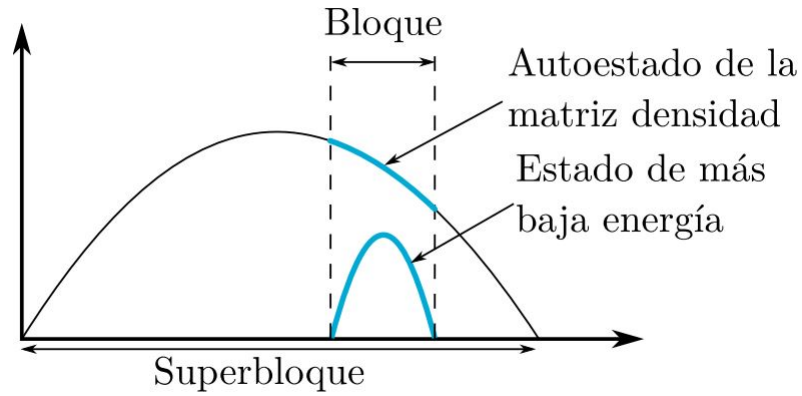


Figura 2.8: Estados pertenecientes a distintos subespacios truncados del espacio de Hilbert completo en el caso de una partícula en una caja unidimensional.

Alrededor del año 2004, cuando el DMRG tenía 12 años de antigüedad, la comprensión mucho mayor de que este método está estrechamente vinculada a una clase especial de estado cuántico, los ya nombrados MPS, permitió la aparición de una nueva generación de algoritmos, que mejoraron drásticamente el alcance de DMRG (por nombrar solo las primeras: [53, 52, 59, 14]). Todas estas extensiones algorítmicas pueden expresarse tanto en el lenguaje DMRG como en el MPS. Sin embargo, en los últimos años, la formulación del DMRG en el lenguaje de los MPS ganó gran popularidad y se ha convertido en un estándar en los trabajos más recientes [43].

A continuación se introduce brevemente el concepto fundamental del método formulado en el lenguaje de los MPS, en el *Anexo A* se presenta la estructura del algoritmo como fuera presentado inicialmente por Steve White [57, 58].

2.4.1. Estructura básica del algoritmo DMRG

Para una dimensión matricial máxima D de un MPS, la mejor aproximación MPS al estado fundamental y su energía está dada por

$$\min \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \iff \min (\langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle) \quad (2.65)$$

donde λ es un multiplicador de Lagrange introducido para forzar la condición de normalización $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, que garantiza el carácter variacional de la energía del estado fundamental E_0 . Si aumentamos D , el espacio de búsqueda crecerá, conteniendo a todos los MPS de una dimensión igual o menor, y la energía aproximada decrecerá monótonamente, alcanzando en la extrapolación $D \rightarrow \infty$ el valor exacto.

Asumiendo que conocemos la representación del Hamiltoniano como un MPO, debemos minimizar la red representada en la Fig. 2.9. Este es un problema multilíneal, ya que el estado $|\psi\rangle$ es un producto de matrices $\mathcal{U}^\sigma$ no conocidas. Una aproximación ya probada para este problema es el método de mínimos cuadrados alternos (*alternating least squares*, ALS), que sigue los siguientes pasos:

1. Comenzar proponiendo un MPS, $\{\mathcal{U}_{\sigma_i}\}$.
2. Elegir un sitio i , $1 \leq i \leq L$, y considerar todas las matrices $\mathcal{U}_{\sigma_j}$ con $j \neq i$ fijas y solo retener $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ como variables. La Eq. 2.65 es entonces cuadrática en $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ y la minimización se vuelve un problema lineal, llevando a una nueva $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ minimizando la energía.
3. Ahora tomar otro sitio como i y repetir el paso 2 hasta que todos los sitios hayan sido visitados con la frecuencia suficiente para que λ no decrezca más de manera significativa. El MPS resultante es la mejor aproximación variacional al estado fundamental y λ la mejor aproximación a la energía.

Elaboremos ahora estos pasos en mayor profundidad. El estado inicial puede ser generado de forma aleatoria o ser propuesto en primera instancia, en general una elección arbitraria del estado inicial no afectará la convergencia del algoritmo, sin embargo en algunos casos puede ocurrir que la convergencia se de hacia un mínimo no global. Para evitar esto último se puede ejecutar el algoritmo partiendo de diversos estados iniciales.

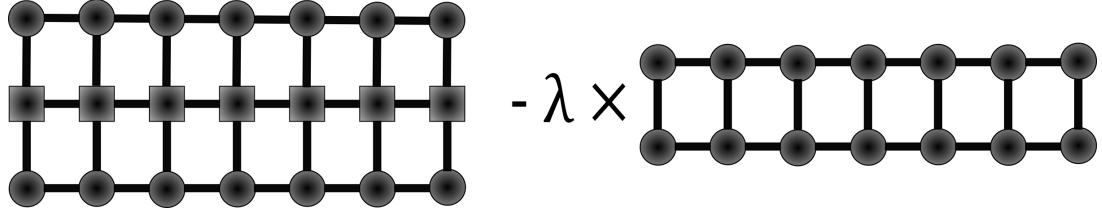


Figura 2.9: Red a ser contraída para extremizar $\langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle$

Para llevar a cabo el paso de la minimización, tomamos la derivada

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{U}_{\sigma_i}^*} \left(\langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle \right) = 0 \quad (2.66)$$

Gráficamente esto corresponde a la Fig. 2.10, donde la matriz con respecto a la cual tomamos la derivada simplemente se elimina porque contribuyó linealmente a la red original. Si ahora contraemos las dos redes restantes, tenemos tres patas libres en cada red y tres patas que se conectan a la matriz desconocida $\mathcal{U}_{\sigma_i}$. Podemos reescribir esto como

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma'_i a'_{i-1} a'_i} H_{\sigma_i a_{i-1} a_i, \sigma'_i a'_{i-1} a'_i} \mathcal{U}_{\sigma'_i a'_{i-1} a'_i} &= \lambda \sum_{\sigma'_i a'_{i-1} a'_i} N_{a_{i-1} a_i, a'_{i-1} a'_i} \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} \mathcal{U}_{\sigma'_i a'_{i-1} a'_i} \\ &\equiv \lambda \sum_{\sigma'_i a'_{i-1} a'_i} N_{\sigma_i a_{i-1} a_i, \sigma'_i a'_{i-1} a'_i} \mathcal{U}_{\sigma'_i a'_{i-1} a'_i}, \end{aligned} \quad (2.67)$$

donde las variables primadas corren sobre las patas que conectan con $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ y las no primadas sobre las patas libres. H y N son las redes contraídas. La ecuación resultante tiene la forma de un problema de autovalores generalizado,

$$H \mathbf{m} = \lambda N \mathbf{m} \quad (2.68)$$

donde las matrices son de dimensión $(dD^2 \times dD^2)$ y el vector $\mathbf{m}$, formado a partir de las matrices $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ contraídas, es de dimensión dD^2 . Como estamos buscando el estado fundamental del sistema, nuestro objetivo es encontrar el menor autovalor de energía λ . En la practica, ya con una dimensión $D \sim 1000$ los métodos de diagonalización exacta se vuelven ineficaces, sin embargo podemos usar métodos como Lanczos que nos permiten encontrar el menor autovalor de energía posible, incluso en sistemas grandes, donde las matrices sean poco densas, una introducción a este método se puede ver en [22].

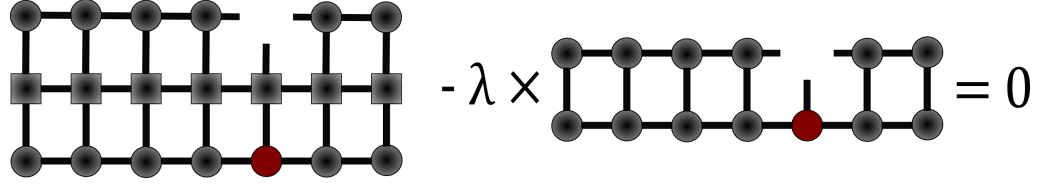


Figura 2.10: Red a ser contraída para extremizar $\langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle$. La variable desconocida $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ se muestra en rojo.

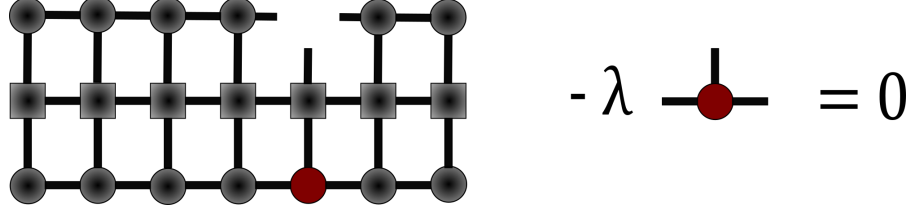


Figura 2.11: Problema de autovalores a ser resuelto para extremizar $\langle \psi | H | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle$. De nuevo, la variable desconocida $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ se muestra en rojo.

La resolución numérica de los problemas de autovalores generalizados pueden tener grandes dificultades si el número de condición de la matriz N se vuelve grande. Sin embargo, si asumimos que todas las matrices de $|\psi\rangle$ a la izquierda de $\mathcal{U}_{\sigma_i}$ están normalizadas a izquierda y todas las matrices a la derecha están normalizadas a derecha, entonces la condición de normalización implica que toda la red a la derecha colapsa quedando únicamente $\mathcal{U}_{\sigma_i}$. Luego $N = I$ y el problema de autovalores generalizado se convierte en un problema usual de autovalores de la forma $H\mathbf{m} = \lambda\mathbf{m}$. Para asegurarnos que esta última condición siempre ocurra debemos tomar nuestro estado inicial en la forma canónica mixta $(\mathcal{U} \dots \mathcal{U} \Lambda \mathcal{W} \dots \mathcal{W})$ y realizar un barrido sistemático a través de la cadena de derecha a izquierda y de izquierda a derecha sucesivamente, realizando la correcta normalización de las matrices en cada iteración. Este procedimiento de barrido (*sweeping*) es exactamente el proceso propuesto por White en 1992.

Para controlar la precisión del algoritmo, podemos monitorear en cada barrido (*sweep*) la variación de la energía (u otro observable),

$$\langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle - \left(\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \right)^2 \quad (2.69)$$

la cual vale 0 en el límite de $D \rightarrow \infty$. Para una situación real tomaremos una cota mínima (*etol*) como condición para asegurar la convergencia del algoritmo.

Capítulo 3

Fases topológicas protegidas por simetrías

Uno de los temas principales en materia condensada es el estudio de las fases y de las transiciones de fases en la materia. Uno de los logros más grandes de la física en el siglo pasado fue el entendimiento y la clasificación de las fases basado en el concepto de las rupturas de simetrías espontáneas (*spontaneous symmetry breaking*). Con este paradigma, desarrollado en primer lugar por Landau [24], una fase es caracterizada de acuerdo a la simetría que es espontáneamente rota en la transición. Por ejemplo, la fase ferromagnética rompe la simetría rotacional de spin ($SU(2)$), aunque las interacciones entre los electrones respetan esta simetría. Otro ejemplo más cotidiano es la transición de un líquido a un sólido, en donde los iones se acomodan en una estructura periódica rompiendo de manera espontánea la simetría traslacional.

En la década de los '80 von Klitzing y colaboradores [21] descubrieron el efecto Hall cuántico (QHE), abriendo las puertas a una nueva noción en el estudio de las transiciones de fases que iba más allá del paradigma de Landau. En el QHE, la conductancia Hall transversal de un gas bidimensional de electrones exhibe una serie de mesetas en función del campo magnético, cuantizadas en un múltiplo entero de e^2/h . La transición entre cada meseta es una transición de segundo orden. Sin embargo, a diferencia de las transiciones de fases continuas descritas por la teoría de Landau, ninguna simetría es rota y ningún parámetro de orden puede ser identificado. Por otro lado, la distinción entre estas fases es topológica [49], esto significa que no se puede ir de manera continua, variando los parámetros del sistema, desde una fase a la otra sin cerrar la brecha de energía en el volumen (*bulk gap*) durante el proceso. Estas nuevas fases, denominadas **fases topológicas**, deberán ser caracterizadas por un invariante topológico, el cual no

se modifica bajo una variación continua de los parámetros del sistema siempre y cuando no ocurra un cierre del bulk gap y una transición a otra fase. Para el QHE la conductividad Hall es un invariante topológico del sistema.

Por otro lado se ha observado que las fases topológicas tienden a ser robustas bajo la acción de perturbaciones ambientales. Esta robustez está asociada a una simetría particular o un grupo de simetrías que ‘protege’ a la fase ante perturbaciones, por este motivo a estos estados de la materia se los denomina **fases topológicas protegidas por simetrías** (fases SPT).

Las fases SPT se encuentran entre las más robustas fases de la naturaleza. Su función de onda de muchos cuerpos no se puede describir con orbitales puramente localizados, y la información que define a estas fases se almacena de manera no local, repartida por todo el sistema. Por lo tanto, sus propiedades físicas están protegidas de perturbaciones locales, como defectos, impurezas u otras imperfecciones materiales. En los últimos años, la búsqueda de fases de SPT ha generado muchos trabajos tanto en el lado teórico como en el experimental.

En este capítulo desarrollaremos las herramientas básicas que nos permiten caracterizar a las distintas fases topológicas de un sistema y estudiaremos las simetrías de mayor interés para nuestro trabajo. Veremos que el espectro de entrelazamiento, en particular su degeneración, juega un rol fundamental en este proceso. Lo desarrollado en estas secciones será luego utilizado en el *Capítulo 4* para describir las fases presentes en un superconductor topológico unidimensional.

3.1. Clases de simetrías

Los Hamiltonianos fermiónicos cuadráticos gapeados pueden ser clasificados en 10 grupos de simetrías, en base a la presencia y/o ausencia de la **simetría de reversión temporal** (*time-reversal symmetry*, TRS), la **simetría hueco-partícula** (*particle-hole symmetry*, PHS) y su combinación la **simetría quiral** (*chiral symmetry*). La simetría de reversión temporal está definida como un operador antiunitario Θ que conmuta con el Hamiltoniano, $[\mathcal{H}, \Theta] = 0$. La simetría hueco-partícula es una simetría antiunitaria cuyo operador Ξ anticonmuta con el Hamiltoniano $\{\mathcal{H}, \Xi\} = 0$. Por último la simetría quiral está representada por un operador unitario formado por el producto $\Pi = \Theta\Xi$, diremos que el sistema posee simetría quiral cuando $\{\mathcal{H}, \Pi\} = 0$.

Esta clasificación no implica la noción de simetrías ordinarias [39], es decir, de operadores unitarios que conmutan con el Hamiltoniano. Consideremos, por ejemplo, rotaciones de spines. La noción de invariancia rotacional de spin se puede

eliminar escribiendo el Hamiltoniano en forma de bloque y centrando la atención en un bloque del mismo. Esta descomposición se puede realizar para cualquier simetría que conmute con el Hamiltoniano. La noción de **clases de simetría**, mencionadas anteriormente, se refiere a las propiedades de estos bloques irreducibles. Las únicas propiedades que los bloques pueden satisfacer son ciertas condiciones que se derivan de las «simetrías extremadamente genéricas» como la inversión del tiempo y conjugación de carga (simetría hueco-partícula). Estas no son simetrías en el sentido anterior, ya que ambas están representadas por operadores antiunitarios.

Es fácil ver que solo existen diez formas posibles en las que un sistema puede responder a operaciones de inversión del tiempo y conjugación de carga. En cuanto a la inversión del tiempo, el Hamiltoniano puede cumplir (i) no ser invariante bajo esta operación, en cuyo caso escribimos $\Theta = 0$ o (ii) puede ser invariante de inversión temporal y la simetría antiunitaria Θ tener cuadrado 1 ($\Theta^2 = 1$), escribimos $\Theta = +1$ o (iii) puede ser invariante y Θ tener cuadrado -1 , en cuyo caso escribimos $\Theta = -1$. Del mismo modo, hay tres formas posibles en las que el Hamiltoniano puede transformar bajo la conjugación de carga. Para estas tres posibilidades escribimos $\Xi = 0, +1, -1$. Por lo tanto, tenemos $3 \times 3 = 9$ comportamientos posibles para un sistema bajo la acción de la inversión temporal y la conjugación de carga. Estos aún no son los diez casos, es necesario considerar el comportamiento del Hamiltoniano bajo el producto $\Pi = \Theta\Xi$. Se puede ver que para 8 de las 9 posibilidades el comportamiento del Hamiltoniano bajo Π está unívocamente determinado. El único caso en el que no es determinado bajo la transformación combinada Π es donde $\Theta = 0$ y $\Xi = 0$. Aquí, Π puede tomar los valores $\Pi = 0$ o $\Pi = 1$. Finalmente, tenemos $(3 \times 3) + 1 = 10$ posibles tipos de comportamiento del Hamiltoniano bajo la acción de las simetrías, los cuales son representados en el Cuadro 3.1.

Simetría				dimensión							
	Θ	Ξ	Π	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

Cuadro 3.1: Clasificación de aisladores topológicos y superconductores topológicos [42, 18]. Las clases de simetría de Hamiltonianos cuadráticos se definen de acuerdo con la simetría de inversión temporal (Θ) la simetría de partícula-hueco (Ξ) y la simetría quiral ($\Pi = \Theta\Xi$). Dentro de cada clase de simetría, y para una dimensión dada d , todos los Hamiltonianos gapeados se pueden dividir en clases equivalentes que forman una estructura de grupo. Dos Hamiltonianos pertenecen a la misma clase de equivalencia si y solo si pueden deformarse suavemente entre sí sin cerrar el gap. Cuando la estructura del grupo está marcada por 0, significa que todos los Hamiltonianos gapeados de esa la clase se pueden deformar suavemente entre sí sin cerrar el gap.

Por ejemplo, la clase A en dos dimensiones ($d = 2$) corresponde al QHE con un invariante topológico $\mathbb{Z}$ que es la conductancia Hall. No posee ninguna de las tres simetrías, por convención esto se representa con un 0 en la tabla. En el *Capítulo 4* estudiaremos sistemas superconductores unidimensionales con fases topológicas que albergan modos borde de Majorana (MBS), estos sistemas pertenecen a la clase DIII poseyendo las 3 simetrías con la TRS con un cuadrado igual a -1 . Esto último tiene como consecuencia el hecho que en la clase DIII los MBSs se presentan en pares degenerados, en concordancia con el teorema de Kramers.

3.1.1. Simetría de inversión temporal

La simetría de inversión temporal ($\Theta : t \rightarrow -t$) está representada por un operador antiunitario, que para un sistema de electrones se escribe como

$\Theta = i\sigma_y \mathcal{K}$, siendo σ_y la segunda matriz de Pauli y $\mathcal{K}$ una conjugación compleja.

Si un Hamiltoniano respeta la simetría de inversión temporal vale la siguiente relación:

$$H = \sigma_y H^* \sigma_y \quad (3.1)$$

Hamiltonianos de este tipo poseen la siguiente propiedad: cada autovalor de energía E_n está doblemente degenerado (degeneración de Kramer). Esta restricción tiene consecuencias importantes en las propiedades topológicas de los sistemas, como se verá más adelante.

Teorema de Kramer:

En un sistema Hamiltoniano formado por un número impar de partículas con spin semientero, si

$$[\mathcal{H}, \Theta] = 0 \quad (3.2)$$

entonces si $|n\rangle$ es autoestado de $\mathcal{H}$ con energía E_n , $\Theta|n\rangle$ también es autoestado con igual energía. Es decir, todos los niveles de energía estarán, al menos, doblemente degenerados. Notemos que en sistemas de spin semientero no es posible que $\Theta|n\rangle$ y $|n\rangle$ sean iguales.

3.1.2. Simetría hueco-partícula

Consideremos un Hamiltoniano de un sistema de electrones superconductor

$$H = \sum_{ij} h_{ij} c_i^\dagger c_j + \Delta_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger + \Delta_{ij}^* c_i c_j \quad (3.3)$$

donde $\{c_i^\dagger\}$ son los operadores de creación en un estado notado con el índice i , que puede incluir momento, spin, orbital atómico etc. h_{ij} es una matriz hermítica describiendo la parte tigh-binding del Hamiltoniano y Δ_{ij} es una matrix antisimétrica que caracteriza al apareamiento entre los electrones. Como este Hamiltoniano es cuadrático, puede ser escrito de la siguiente manera

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} \begin{pmatrix} c_i^\dagger & c_i \end{pmatrix} \mathcal{H}_{ij} \begin{pmatrix} c_j \\ c_j^\dagger \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \text{Tr}(h) \quad , \quad \mathcal{H}_{ij} = \begin{pmatrix} h_{ij} & \Delta_{ij} \\ \Delta_{ji}^* & -h_{ji} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Siendo $\mathcal{H}_{BdG}$ una matriz de dimensión $2N \times 2N$, conocida como el Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes. Este Hamiltoniano actúa sobre funciones de onda cuya primer mitad está compuesta por operadores de creación de electrones y la segunda mitad por operadores de destrucción. Podemos pensar a estos últimos operadores de destrucción como operadores de creación de huecos, por lo que po-

demostramos que en esta representación estamos duplicando los grados de libertad del sistema.

En esta representación el $\mathcal{H}_{BdG}$ posee una simetría extra. Esta simetría intercambia partículas con huecos y está representada por un operador $\Xi = \tau_x \mathcal{K}$, donde la matriz de Pauli τ_x actúa los grados de libertad hueco-partícula y $\mathcal{K}$ es el operador conjugación compleja. Tenemos que

$$\Xi \mathcal{H} \Xi^{-1} = -\mathcal{H} \quad (3.5)$$

Notemos que no realizamos ninguna suposición sobre H en orden de obtener que sea invariante bajo la acción de Ξ , simplemente recuperamos este resultado a partir de la construcción de $\mathcal{H}_{BdG}$. Esto significa que esta simetría no puede ser realmente rota, además tiene cuadrado $+1$ para el caso de electrones, es decir $\Xi^2 = \tau_x \tau_x \mathcal{K} = 1$.

A razón del signo menos en la Ec. 3.5 por cada autovector $\phi_i^\nu = (u_i^\nu, v_i^\nu)^T$ de $\mathcal{H}_{BdG}$ con energía ε_ν existe un autovector con energía $-\varepsilon_\nu$, dado por

$$(\Xi \phi^\nu)_i = \tau^x \begin{pmatrix} u_i^\nu \\ v_i^\nu \end{pmatrix}^* \quad (3.6)$$

Veamos esto último. Los autovectores de $\mathcal{H}_{BdG}$ están relacionados a las excitaciones elementales de H mediante

$$\Gamma_\nu = \sum_i (c_i^\dagger, c_i) \tau^x \begin{pmatrix} u_i^\nu \\ v_i^\nu \end{pmatrix}^* \quad (3.7)$$

como uno puede ver $[H, \Gamma_\nu] = \varepsilon_\nu \Gamma_\nu$. El hermítico conjugado de Γ_ν se obtiene reemplazando $\phi_i^\nu = (u_i^\nu, v_i^\nu)^T$ por su compañero hueco-partícula,

$$\Gamma_\nu = \sum_i (c_i^\dagger, c_i) \tau^x \begin{pmatrix} u_i^\nu \\ v_i^\nu \end{pmatrix}^* \quad (3.8)$$

Esto significa que Γ_ν describe una excitación con energía $-\varepsilon_\nu$. Esta relación se puede escribir de manera general como

$$\Gamma_\varepsilon^\dagger = \Gamma_{-\varepsilon} \quad (3.9)$$

3.2. Representación MPS de fases protegidas por simetrías

Para estudiar las consecuencias de las simetrías de las funciones de onda es útil estudiar cómo estas simetrías se representan en el formalismo MPS [38]. Consideremos una operación de simetría local que es aplicada a todos los sitios de la red,

$$|\tilde{\psi}\rangle = \left[\bigotimes_n u_n(g) \right] |\psi\rangle \quad (3.10)$$

donde $u_n(g)$ actúa sobre el sitio n , siendo g un elemento del grupo de simetría G bajo el cual $|\psi\rangle$ es invariante. Un ejemplo de tal simetría es la $\mathbb{Z}_2 = \otimes_n \sigma_n^x$ del modelo de Ising con campo transversal, Ec. 2.33. En la formulación MPS, la transformación corresponde a contraer la operación de simetría a todas las patas físicas como se muestra en la Fig.3.1 (a). Para que el estado sea invariante, el solapamiento del estado original con el transformado tiene que ser de módulo uno, esto es, $|\langle \tilde{\psi} | \psi \rangle| = 1$. En la referencia [35] se mostró que para un MPS en forma canónica las matrices $\mathcal{U}$ transforman bajo una operación de simetría g como

$$\sum_{j'} u_{jj'}(g) \mathcal{U}_{\sigma_{j'}} = e^{i\theta_g} U^\dagger(g) \mathcal{U}_{\sigma_j} U(g) \quad (3.11)$$

con una representación diagramática como se muestra en la Fig.3.1 (b). Donde $U(g)$ es una matriz unitaria que conmuta con las matrices Λ y $e^{i\theta_g}$ es una fase¹. Está claro que esto es una condición suficiente para que un MPS sea simétrico, también, se puede demostrar que es una condición necesaria. De manera equivalente se puede demostrar que las matrices $U(g)$ forman una representación **lineal** o **proyectiva** D-dimensional del grupo de simetría de la función de onda y $e^{i\theta_g}$ es una representación lineal unidimensional [38]. Las matrices $U(g)$ forman una representación de la operación de simetría en la base de los estados de Schmidt, notemos que para este análisis hemos asumido invariancia traslacional de MPS, sin embargo, podemos estudiar la generalización permitiendo a las matrices $U(g)$ depender del sitio j .

Relaciones similares pueden ser derivadas para simetrías que no son operaciones locales. Para la transformación de **reversión temporal** $\mathcal{U}_{\sigma_j}$ es transformada a su complejo conjugado $(\mathcal{U}_{\sigma_j})^*$ en el lado izquierdo, incluyendo también posibles rotaciones de spin. En el caso de la **simetría de inversión** $\mathcal{U}_{\sigma_j}$ es transformada a su traspuesta $(\mathcal{U}_{\sigma_j})^T$ en el lado derecho de la ecuación Ec. 3.11.

¹Como $U(g)$ conmuta con Λ , conmuta con las matrices densidad reducida ρ_A y ρ_B

Si ahora asumimos que tenemos condiciones de contorno abiertas, entonces la ausencia de una ruptura espontánea de simetría en el volumen no prohíbe que las operaciones de simetrías, para las cuales el bulk permanece invariante, actúen de manera no trivial cerca de los bordes de la cadena. Como el volumen del sistema es invariante y no es afectado por la operación de simetría, podemos escribir de manera formal $\bigotimes_n u_n(g) = U_L(g)U_R(g)$. Estos operadores efectivos U_L y U_R están exponencialmente localizados cerca de los bordes. En el límite termodinámico ($L \rightarrow \infty$) U_L y U_R no poseen superposición y como el Hamiltoniano es local esto significará que U_L y U_R no cambian la energía del estado. Se suele referir a este proceso como fraccionalización de la simetría (*symmetry fractionalization*)

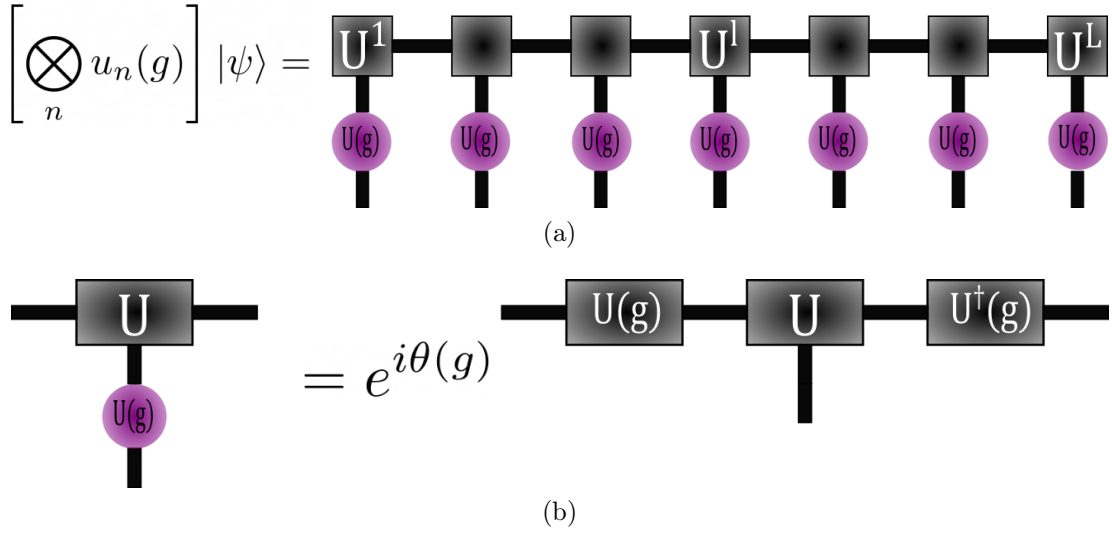


Figura 3.1: (a) Transformación de un MPS bajo la acción de una operación de simetría local g aplicada a todos los sitios. (b) Representación de una operación de simetría en términos de los MPS.

3.2.1. Degeneración en el espectro de entrelazamiento

Las fases topológicas con representaciones proyectivas no triviales tienen necesariamente degeneraciones en el espectro de entrelazamiento. De otra manera, todos los autovalores de la matriz densidad reducida ρ_A o ρ_B de la bipartición del sistema son degenerados.

Para ver esto, asumamos que el estado fundamental está representado por un MPS y es simétrico bajo la acción de un grupo de simetría G . Utilizando la Ec. 3.11, encontramos la representación de la simetría $U(g)$ en términos de los índices auxiliares que conmutan con las matrices densidad reducidas. Si $U(g)$ para $g \in G$ forma una representación proyectiva del grupo de simetría, podemos encontrar un conjunto de elementos no conmutativos tal que $U(g_i)U(g_j)U(g_i)^\dagger U(g_j)^\dagger = e^{i\varphi}$. Las relaciones de conmutación no triviales requieren que las representaciones

irreducibles del grupo tengan dimensión mayor a uno, lo que produce degeneraciones en el espectro de ρ_A (ρ_B).

Como estas degeneraciones en el espectro de entrelazamiento son causadas por el mismo conjunto de simetrías que protege la estabilidad de una fase topológica, la única manera posible de cambiar el grado de degeneración es inducir una transición de fase en el sistema. Luego, el grado de degeneración es un **invariante topológico** que caracteriza a cada fase del sistema. La posibilidad de calcular de manera eficiente el espectro de la matriz densidad reducida mediante técnicas como el DMRG y el carácter fundamental de la degeneración del espectro conllevan a que esta técnica de caracterización haya cobrado una gran popularidad en los últimos años. En el próximo capítulo utilizaremos este concepto para caracterizar las fases topológicas de un nanocable superconductor.

3.3. Ejemplos simples de fases SPT

(1) Estado AKLT de spin-1.

El estado AKLT posee simetría $SO(3)$ y $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$, que es un subgrupo de la primera. Como la representación en MPS de este estado Ec. 2.53 es muy sencilla, podemos extraer directamente la representación proyectiva aplicando los operadores de simetría, encontrando que

$$U(R_x) = \sigma_x, \quad U(R_z) = \sigma_z \quad (3.12)$$

y $\theta = \pi$. La representación de $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ es proyectiva con el factor de fase $U(R_x)U(R_z)U(R_x)^\dagger U(R_z)^\dagger = -1$

(2) Estado producto de spin-1.

Consideremos un estado producto con $S^z = 0$ de la forma $|0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \cdots \otimes |0\rangle$ el cual es invariante bajo la simetría $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ y el MPS transforma trivialmente bajo las rotaciones $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$,

$$U(R_x) = 1, \quad U(R_z) = 1 \quad (3.13)$$

con $U(R_x)U(R_z)U(R_x)^\dagger U(R_z)^\dagger = 1$ y $\theta = 0$.

Estos factores de fase no pueden cambiar a menos que la simetría sea rota o el sistema experimente una transición de fase, por lo tanto en los ejemplos anteriores hemos identificado dos representaciones de diferentes fases SPT.

(3) Fase de Haldane. Se comienza con el siguiente Hamiltoniano de una cadena de spin-1

$$H = J \sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} + B_x \sum_j S_j^x + U_{zz} \sum_j (S_j^z)^2$$

Este modelo es invariante traslacional, invariante ante inversión espacial, ante $e^{-i\pi S^x}$, y ante $e^{-i\pi S^y} \times \text{TR}$. Se sabe que solo la simetría de inversión espacial es suficiente para proteger una fase de Haldane. La fase de Haldane puede identificarse fácilmente mirando el degeneración del espectro de entrelazamiento como se muestra en la Fig. 3.2 obtenida de la referencia [38]. La degeneración par del espectro de entrelazamiento se encuentra presente en toda la fase de Haldane. En el espectro de entrelazamiento de la fase trivial (TRI) que se observa en la Fig. 3.2 presenta niveles no degenerados y niveles con múltiples degeneraciones. Se ha comprobado que las múltiples degeneraciones en el espectro de la fase TRI se pueden romper agregando perturbaciones. En la fase de Haldane, por el otro lado, la doble degeneración de todo el espectro es robusta frente a tales perturbaciones.

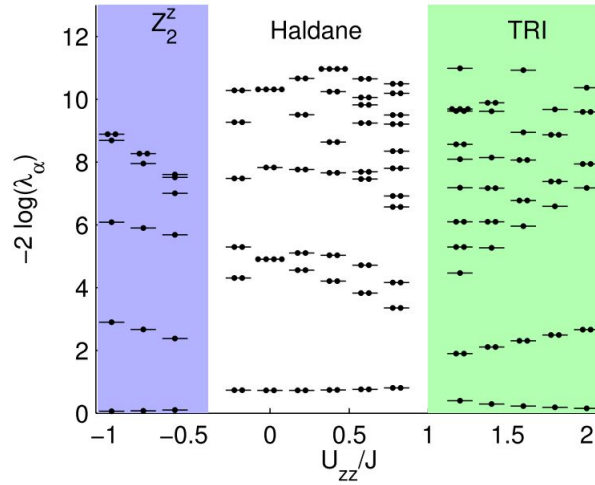


Figura 3.2: Espectro de entrelazamiento del Hamiltoniano H para $B_x = 0$ (se muestra solo la parte más baja del espectro). Los puntos muestran la multiplicidad de los autovalores de Schmidt, la cual es par en toda la fase de Haldane.

Capítulo 4

Cadenas de Kitaev y Nanocables

La búsqueda de nuevas fases de la materia es de las más apasionantes tareas en el área de la materia condensada. En particular, la búsqueda de superconductores topológicos (SC) es de gran relevancia ya que estos albergan fases topológicas protegidas por simetrías fundamentales, fases que a su vez alojan modos cero de Majorana.

Los modos cero de Majorana en **superconductores topológicos** (*topological superconductors*, TSC) han atraído un gran interés en los últimos años debido a sus aplicaciones potenciales en la computación cuántica tolerante a errores. Se predice teóricamente que los modos cero de Majorana son Anyones no abelianos¹. Esta exótica estadística de intercambio permitiría combinar los modos cero de Majorana en qubits, dando pie al desarrollo de la computación cuántica topológica. En estos sistemas la información está topológicamente protegida y almacenada de forma no local, por lo que estos qubits podrían resolver la decoherencia a tiempos cortos que sufren los ordenadores cuánticos actuales. Un modo cero de Majorana se puede ver como el equivalente en materia condensada al fermión de Majorana, una partícula fundamental propuesta originalmente en 1937 por E. Majorana [28] como una solución real a la ecuación de Dirac -por la propiedad de ser solución real los fermiones de Majorana son sus propias antipartículas.

Se ha propuesto que los modos de Majorana aparecen en diferentes sistemas tales como: en el estado $\nu = 5/2$ del efecto de Hall cuántico fraccionario [30],

¹En física, un anyón es un tipo de cuasipartícula que ocurre solo en sistemas bidimensionales, con propiedades mucho menos restringidas que la de los fermiones y bosones. En general, la operación de intercambiar dos partículas idénticas pueden causar un cambio de fase global, que no afecta a los observables. Los anyones son generalmente clasificados como abelianos o no-abelianos (refiriéndose a su comportamiento conmutativo y no conmutativo). Los Anyones abelianos han sido detectados y juegan una función importante en el efecto Hall cuántico fraccionario. Los Anyones no-abelianos no han sido detectados y su búsqueda es una área activa de investigación [60].

en el estado superfluido He-3 [15], en los líquidos de spin fraccionarios [17], en los superconductores topológicos [16, 40] y en las heteroestructuras [8, 27] superconductoras. En este trabajo nos concentraremos en los dos últimos sistemas, estudiando en detalle un modelo para una heteroestructura superconductora unidimensional en la Sección 4.2. Estos sistemas han adquirido una gran popularidad en los últimos años.

Nuestro principal objetivo será caracterizar las fases topológicas del sistema, y para ello haremos uso del DMRG, estudiando la existencias de los modos ceros de Majorana y como evolucionan bajo la acción de un campo magnético y ante la presencia de repulsión Coulombiana.

4.1. Cadenas de Kitaev y fermiones de Majorana

En las siguientes secciones se realiza una introducción a los operadores y fermiones (modos) de Majorana, desde su definición y propiedades hasta la construcción de Hamiltonianos efectivos para cadenas unidimensionales que albergan a estos modos en sus bordes. Se presenta brevemente el modelo propuesto por Kitaev en 2001 [20] el cual es la base conceptual de los modelos que actualmente se utilizan en la búsqueda de estas elusivas quasi-partículas.

4.1.1. Operadores fermiónicos y de Majorana

Partamos de los operadores de creación ($c^\dagger$) y aniquilación (c) para modos fermiónicos sin spin (*spinless fermions*), los cuales sabemos que satisfacen la relación de anticonmutación $c^\dagger c + c c^\dagger = 1$. Estos operadores conectan los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ correspondientes al estado no ocupado sin ninguna partícula y al estado ocupado con una partícula, mediante las reglas $c|0\rangle = 0$, $c^\dagger|0\rangle = |1\rangle$ y $c^\dagger|1\rangle = 0$.

Podemos escribir a nuestro par de operadores fermiónicos de la siguiente forma

$$c^\dagger = \frac{1}{2}(\gamma_1 + i\gamma_2), \quad c = \frac{1}{2}(\gamma_1 - i\gamma_2) \quad (4.1)$$

en donde los γ_i son nuevos operadores conocidos como *operadores de Majorana*. Calculemos el conjugado hermítico de las relaciones anteriores

$$(c^\dagger)^\dagger = c = \frac{1}{2}(\gamma_1^\dagger - i\gamma_2^\dagger), \quad (c)^\dagger = c^\dagger = \frac{1}{2}(\gamma_1^\dagger + i\gamma_2^\dagger), \quad (4.2)$$

Por simple comparación vemos que $\gamma_1 = \gamma_1^\dagger$ y $\gamma_2 = \gamma_2^\dagger$, es decir los operadores de Majorana son hermíticos. Inmediatamente esta propiedad nos dice que no podemos pensar en un único modo de Majorana siendo ‘no ocupado’ o ‘ocupado’

como si lo hacemos con los modos fermiónicos usuales.

Además los operadores de Majorana son operadores de carácter fermiónico, ya que satisfacen las reglas de anticonmutación que definen a los mismos

$$\gamma_i^\dagger \gamma_i + \gamma_i \gamma_i^\dagger = \gamma_i^2 + \gamma_i^2 = 2 \quad (4.3)$$

en donde usamos el hecho de que los γ_i son hermíticos y que $\gamma_i^2 = 1$, esta última propiedad viene de hacer

$$\begin{aligned} \gamma_1^2 &= (c^\dagger + c)^2 \\ &= (c^\dagger + c)(c^\dagger + c) \\ &= (c^\dagger)^2 + c^\dagger c + c c^\dagger + c^2 \\ &= c^\dagger c + c c^\dagger = 1 \end{aligned} \quad (4.4)$$

análogamente para γ_2 . Por último, operadores de Majorana distintos anticonmutan $\{\gamma_1, \gamma_2\} = 0$. Esta última propiedad junto con la Ec. (4.3) nos aseguran que los operadores de Majorana tienen carácter fermiónico, luego los modos de Majorana seguirán una estadística fermiónica. Usar operadores de Majorana u operadores fermiónicos es indistinto dado que existe una transformación «uno a uno» entre ambos, de otra manera, cualquier operador fermiónico puede ser expresado mediante un par de operadores de Majorana. Esto último también significa que los modos de Majorana siempre aparecen de a pares.

Los nuevos operadores γ_i siguen actuando sobre los mismos estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$. Pensemos ahora en un sistema gobernado por el Hamiltoniano $\mathcal{H} = \epsilon c^\dagger c$ en donde ahora los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ son autoestados con una diferencia de energía ϵ . Podemos expresar a este Hamiltoniano con nuestros nuevos operadores de la forma

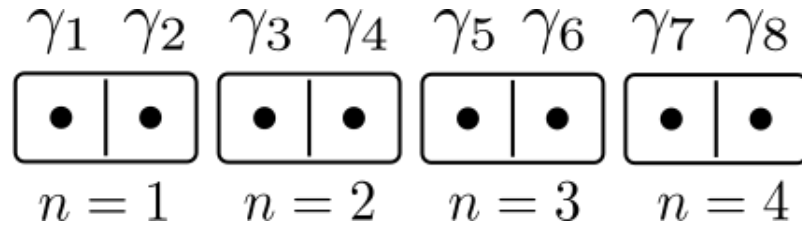
$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \epsilon c^\dagger c \\ &= \frac{\epsilon}{4}(\gamma_1 + i\gamma_2)(\gamma_1 - i\gamma_2) \\ &= \frac{\epsilon}{4}(1 + -i\gamma_1\gamma_2 + i\gamma_2\gamma_1 + 1) \\ &= \frac{\epsilon}{4}(2 - 2i\gamma_1\gamma_2) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Finalmente el Hamiltoniano expresado en términos de los operadores de Majorana es $\mathcal{H} = \frac{1}{2}\epsilon(1 - i\gamma_1\gamma_2)$. Luego de este análisis surge de manera inmediata la pregunta de si es posible, en un sistema de materia condensada, tener un modo de Majorana aislado. La respuesta rápida es no ya que los sistema reales están compuestos por electrones, los cuales no son fermiones de Majorana. Sin em-

bargo, a pesar de lo anterior, veremos que es posible construir un modelo (un Hamiltoniano) en el cual podamos tener a dos Majoranas separados.

4.1.2. Modos de Majorana desapareados

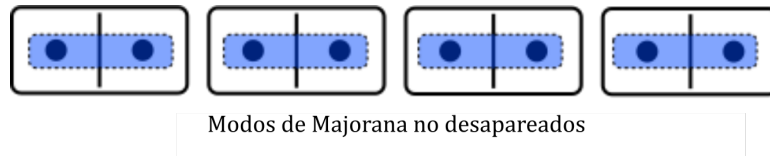
Consideremos una cadena de N sitios, donde cada sitio puede albergar un fermión creado por el operador de creación $c_n^\dagger$ (recordemos que estamos trabajando con fermiones sin spin, por lo tanto no puede haber doble ocupación). De manera equivalente, cada sitios puede albergar dos modos de Majorana γ_{2n-1} y γ_{2n} . Ilustramos esta situación para $N = 4$ en la figura de abajo.



Ahora si apareamos a los Majoranas correspondientes a los sitios n y pensamos que existe un costo de energía μ de que cada sitio esté ocupado, el Hamiltoniano del sistema pasa a ser

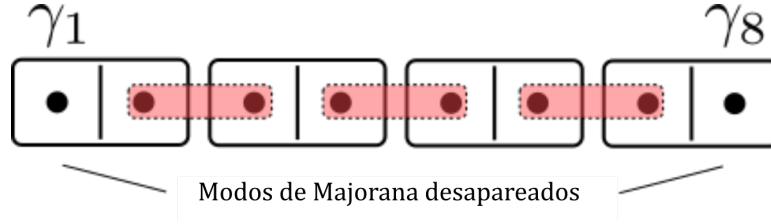
$$\mathcal{H} = \frac{i}{2}\mu \sum_{n=1}^N \gamma_{2n-1}\gamma_{2n} \quad (4.6)$$

Representamos de manera gráfica este apareamiento entre los modos de Majorana en la siguiente imagen.



Todas las excitaciones en este sistema tienen energía $\pm|\mu|/2$ y la cadena tiene un bulk gapeado, es decir una diferencia de energía finita entre el estado fundamental y los estados excitados en el volumen, además no posee estados borde de energía cero (*zero energy edge states*).

El apareamiento anterior no logra separar a los modos de Majorana. Para desaparecer a los mismos tenemos que buscar que un único Majorana quede desapareado en cada borde y que los demás estén todos apareados, tal como se muestra en la siguiente figura.



A cada par formado de esta manera le asignamos una diferencia de energía $2t$ entre el estado ocupado y desocupado, arribando al siguiente Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = it \sum_{n=1}^{N-1} \gamma_{2n+1} \gamma_{2n} \quad (4.7)$$

Vemos de manera directa que los modos de Majorana γ_1 y γ_N no aparecen en $\mathcal{H}$. Esto nos dice que la cadena tendrá dos estados de energía cero localizados en cada borde de la misma. Todos los estados, salvo los de los bordes, tienen una energía $\pm|t|$, independientemente de la longitud de la cadena. Luego, tenemos un sistema donde en su volumen interno las excitaciones tienen un costo finito de energía y estados borde de energía cero que albergan modos de Majorana, a estos mismos se los suele denominar como **Modos cero de Majorana** (*zero Majorana modes*).

4.1.3. Cadena de Kitaev

Ahora vamos a escribir el Hamiltoniano en termino de los operadores fermiónicos usuales haciendo la sustitución $\gamma_{2n-1} = (c_n^\dagger + c_n)$ y $\gamma_{2n} = -i(c_n^\dagger - c_n)$. Encontramos que los dos tipos de apareamiento propuestos anteriormente son límites de un Hamiltoniano tight-binding más general para una cadena superconductora:

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_n c_n^\dagger c_n - t \sum_n (c_{n+1}^\dagger c_n + h.c.) + \Delta \sum_n (c_n c_{n+1} + h.c.) \quad (4.8)$$

En este modelo tenemos tres parámetros: la energía de sitio μ , la energía de salto entre primeros vecinos o *hopping* t y el parámetro de apareamiento o *pairing* superconductor entre electrones Δ . Podemos ver que, arrancando de este Hamiltoniano, el régimen de Majoranas desapareados es el punto en el espacio de parámetros $\Delta = t$ y $\mu = 0$, mientras que el régimen ‘trivial’ de fermiones aislados es el punto $\Delta = t = 0$ y $\mu \neq 0$.

Es posible ver [41] que este modelo alberga una fase de carácter no trivial o topológica para valores de μ distintos de cero, en particular el sistema estará en la fase topológica siempre que $|\mu| < 2t$ para $\Delta = t$. Esto último nos indica que los

modos de Majorana, los cuales están presente en la fase topológica del sistema, son robustos ante la variación de los parámetros y no son un artificio de una elección particular y ‘caprichosa’ de parámetros. Un estudio más detallado de las fases topológicas del sistema se llevará a cabo en la próxima sección, en donde un modelo para fermiones con spin (*spinfull fermions*) inspirado en el modelo presentado en esta sección, es desarrollado y estudiado.

4.2. Nanocables y Modos de Majorana

La superconductividad topológica ha tomado relevancia en la última década desde la aparición de trabajos como [32, 11, 33] en donde se propone hibridizar SCs (superconductores) ordinarios con materiales helicoidales con la ayuda de perturbaciones magnéticas. Con el uso de efectos de proximidad los electrones en una banda helicoidal en la energía de Fermi forman pares de Cooper convencionales, cuya condensación genera un SC del tipo p-wave quirral spinless, esto es un **superconductor topológico con la simetría de inversión temporal rota** (clase D). Señales características tales como picos de conductancia en zero bias, patrones anómalos de Fraunhofer y efectos fraccionarios de Josephson, se han observado en estos sistemas [31].

Más recientemente [62] se propuso una familia completamente distinta de SCs (clase DIII) conocidos como **superconductores topológicos invariantes ante inversión temporal** o por sus siglas en ingles *TRITOPs*. Estos son dispositivos que combinan efectos de proximidad con semiconductores con acoplamiento spin-órbita tipo Rashba (RSs) y SCs con pairings no convencionales. Por debajo de su temperatura de transición, el SC proporciona al RS un potencial de pairing spin-singlete del tipo $s\pm$ -wave. La fase TRITOP es generada cuando el potencial químico se ajusta para hacer que las superficies de Fermi interna y externa sientan el potencial de pairing con signo opuesto. En las fronteras del SC topológico TRI en 1 o 2 dimensiones, un par de Kramer de estados borde de Majorana ligados (MBSs, *Majorana bound states*) emergen como estados localizados a la mitad del gap (*zero modes*).

En este capítulo analizamos como este dispositivo evoluciona bajo la variación de un campo Zeeman y del potencial químico, caracterizando así las transiciones de fase entre las fases TRITOP (clase DIII), la fase topológica superconductora (clase D) y la fase trivial. También analizamos la función de onda de Majorana de los MBSs localizados en los bordes de la cadena y el efecto de la repulsión Culombiana sobre los mismos.

4.2.1. Modelo microscópico

El sistema propuesto en la introducción de este capítulo se puede construir de manera experimental mediante el uso de **estructuras híbridas ferromagnéticas-superconductoras**, las cuales consisten en adatoms (átomos adsorbidos) ferromagnéticos depositados sobre un sustrato superconductor no convencional -i.e. cupratos o superconductores basados en hierro- formando una cadena (ver Fig.4.1). En estas estructuras aparecen estados de Yu-Shiba-Rusinov² [5] en cada impureza ferromagnética. Estados de Yu-Shiba-Rusinov adyacentes pueden hibridizarse y, si existe un número suficiente de impurezas, una banda topológicamente no trivial empieza a surgir. Un gran número de trabajos que estudian estos materiales pueden ser encontrados en la bibliografía, sin embargo, la mayoría se dedica a estudiar estos sistemas sin considerar la interacción Culombiana entre electrones. Cuando dicha interacción es tomada en cuenta la clasificación de los Hamiltonianos en base a sus simetrías globales presentada en el Cuadro 3.1 ya no es válida y no puede asegurarse que los resultados y conclusiones, válidos para el caso sin interacción, sean los mismos. Además, los métodos analíticos utilizados dejan de ser útiles para el caso interactuante y se debe recurrir a métodos numéricos como el DMRG, utilizado en este trabajo. En las siguientes páginas estudiaremos un modelo unidimensional para una heteroestructura magnética-superconductora (*magnetic superconductor heterostructure*, MSH) con un sustrato superconductor no convencional, modelo propuesto en [8], donde incluimos un término H_I de interacción Culombiana (repulsión electrón-electrón).

²En el mundo cuántico los electrones pueden agruparse de maneras sorprendentes, participando en fenómenos como el cotidiano magnetismo, y otro un poco más raro como la superconductividad. Estos dos comportamientos intentan destruirse uno al otro. Las investigaciones centran su esfuerzo en encontrar materiales donde estos dos estados cuánticos coexistan artificialmente, generando un extraño estado llamado Yu-Shiba-Rusinov que podría usarse para fabricar qubits topológicos, claves para los futuros ordenadores cuánticos.

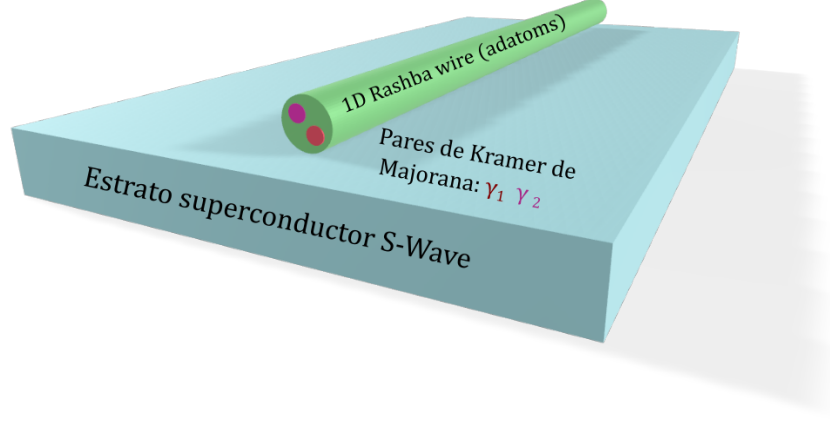


Figura 4.1: Croquis del dispositivos de proximidad propuesto. Una pareja de pares de Kramers de Majorana emerge en los extremos de la cadena en la fase TRITOP. El sustrato se representa como bidimensional aunque en nuestro caso de estudio es unidimensional.

Nuestro objetivo ahora es escribir un modelo efectivo que presente la física descrita anteriormente. El Hamiltoniano debe contener elementos que puedan ser reconocidos de manera sencilla y puedan ser justificados físicamente, para asegurar la viabilidad del modelo para describir un sistema real. Típicamente los elementos necesarios para escribir este Hamiltoniano consisten en: un campo magnético que polarice a los spines (termino Zeeman) y un termino que permita mezclar los multipletes (termino de acople spin-órbita o termino de Rashba) junto con un termino superconductor inducido por proximidad. Veamos en más profundidad el rol que juega cada uno de las piezas de nuestro modelo, en el *Anexo C* se presenta una construcción distinta pero equivalente.

En primer lugar necesitamos generalizar la cadena de Kitaev a fermiones con spin para poder representar a los electrones que existen en la red. La manera más sencilla es añadir el spin de manera trivial, es decir como una simple degeneración en los niveles de energía. Sin embargo, si hacemos esto en el borde de la cadena tendríamos dos majoranas apareados, es decir un fermión regular. Para evitar esto último podemos introducir un campo magnético que separe las bandas de energía volviendo trivial a una de las especies de spin regresando así al caso de

la cadena de Kitaev. Este campo magnético estará generado por los adatoms los cuales consideramos que se comportan como impurezas clásicas con un orden ferromagnético puro.

Por otro lado vimos que la construcción del modelo de Kitaev involucra términos de pairing superconductor los cuales incorporan la simetría hueco-partícula. Para la construcción de este modelo Crawford propone usar un pairing no convencional del tipo $s_{\pm}$ -wave inducido por un SC de alta temperatura (cuprato o SC basado en hierro).

Nuestro superconductor tiene un pairing tipo s , esto significa que los electrones se aparean en singletes, luego el campo Zeeman, al beneficiar enérgicamente a una proyección particular del spin, evitaría que los electrones se apareen. Debemos entonces romper la conservación del spin y permitir así la formación de los pares de Cooper. Una forma podría ser aplicar un campo no homogéneo pero esto puede traer varias complicaciones y descartar la viabilidad práctica del modelo. Otra manera, la cual es la adoptada, es la de usar el efecto de acople spin-órbita. Con esta interacción garantizamos que el spin no sea un buen número cuántico y que las diferentes especies de spin se puedan aparear y generar el deseado pairing $s_{\pm}$ -wave. En principio este término elimina la necesidad del campo Zeeman, sin embargo lo retendremos para poder romper la simetría TR.

Pongamos ahora todos los ingredientes juntos para construir el modelo que estudiaremos en las siguientes secciones, los parámetros a tener en cuenta son:

- Una amplitud de hopping t que permite la movilidad de los electrones por la red.
- Un potencial químico μ , que establece la densidad electrónica en el cable.
- El gap superconductor inducido Δ para que la simetría hueco-partícula entre en juego.
- El acople spin-órbita α que rompe la conservación del spin.
- Un campo Zeeman J que rompe la simetría de inversión temporal.

Además, incluimos una interacción de Hubbard U para evaluar como se comporta el sistema bajo interacción Coulombiana entre electrones.

Para el dispositivo propuesto se construye un modelo con los ingredientes ya nombrados, representado por un Hamiltoniano unidimensional efectivo escrito en

lenguaje de segunda cuantización, el cual presenta la siguiente forma:

$$H = H_0 + H_I \quad (4.9)$$

$$H_0 = \sum_j \left[\left(t \mathbf{c}_j^\dagger \mathbf{c}_{j+1} - \frac{\mu}{2} \mathbf{c}_j^\dagger \mathbf{c}_j + \Delta c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j+1,\downarrow}^\dagger + i\alpha \mathbf{c}_j^\dagger \sigma_2 \mathbf{c}_{j+1} + h.c. \right) + J \mathbf{c}_j^\dagger \sigma_3 \mathbf{c}_j \right] \quad (4.10)$$

$$H_I = U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow} \quad (4.11)$$

En la definición anterior, $\mathbf{c}_j^\dagger = (c_{j,\uparrow}^\dagger, c_{j,\downarrow}^\dagger)$ es un spinor de los operadores de creación fermiónicos en el sitio j con proyección de spin $\uparrow, \downarrow$ y σ_α son las matrices de Pauli. t es la amplitud de hopping a primeros vecinos; μ el potencial químico; α el acople spin-órbita en la dirección σ_y del termino de Rashba; Δ la amplitud del pairing superconductor a primeros vecinos (s_{100} -wave) inducida por el efecto de proximidad; J la intensidad de la interacción Zeeman en el eje z producida por los momentos magnéticos de los adatoms y U la repulsión electrón-electrón en el sitio j .

Estudiemos el volumen del sistema para el caso sin interacción ($U = 0$), imponemos condiciones de contorno periódicas y escribimos el Hamiltoniano en el formalismo de Bogoliubov-de Gennes en el espacio de los momentos

$$H = \frac{1}{2} \sum_k \psi_k^\dagger \mathcal{H}_k \psi_k \quad (4.12)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_k = & [2t \cos k - \mu] \tau_3 \otimes \sigma_0 - 2\alpha \sin k \tau_0 \otimes \sigma_2 \\ & + J \tau_3 \otimes \sigma_3 + \Delta \cos k \tau_1 \otimes \sigma_1 \end{aligned} \quad (4.13)$$

o en forma matricial explícita,

$$\mathcal{H}_k = \begin{bmatrix} J - \mu + 2t \cos k & 2i\alpha \sin k & 0 & \Delta \cos k \\ -2i\alpha \sin k & -J - \mu + 2t \cos k & \Delta \cos k & 0 \\ 0 & \Delta \cos k & -J + \mu - 2t \cos k & 2i\alpha \sin k \\ \Delta \cos k & 0 & -2i\alpha \sin k & J + \mu - 2t \cos k \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

Donde en Ec. 4.12 $\psi_k = (c_{k,\uparrow}, c_{k,\downarrow}, c_{k,\uparrow}^\dagger, c_{k,\downarrow}^\dagger)^T$ es el spinor de Nambu para los operadores de creación y destrucción para momento k y spin $\uparrow, \downarrow$. $\sigma_{0,1,2,3}$ ($\tau_{0,1,2,3}$) son las matrices de Pauli, incluyendo a la identidad, actuando sobre un electrón (hueco). Diagonalizando el Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes encontramos

la siguiente relación de dispersión

$$E(k) = \pm \sqrt{J^2 + \Delta_k^2 + \varepsilon_k^2 + \alpha_k^2 \pm 2\sqrt{J^2(\Delta_k^2 + \varepsilon_k^2) + \varepsilon_k^2 \alpha_k^2}} \quad (4.15)$$

con las definiciones

$$\varepsilon_k = 2t \cos k - \mu \quad (4.16)$$

$$\alpha_k = 2\alpha |\sin k| \quad (4.17)$$

$$\Delta_k = \Delta \cos k \quad (4.18)$$

Elegimos para los parámetros del modelo los mismos valores propuestos en [8], siendo $\alpha = 0.8/t$, $\Delta = 1.2/t$ valores fijos y J , μ parámetros libres que exploraremos en un rango de $[-4/t, 4/t]$.

A continuación graficamos las relaciones de dispersión de las cuasipartículas³ para distintos valores de μ y J . Observamos como el gap se abre y se cierra en distintos puntos del espacio de parámetros indicando una transición de fase topológica entre un fase trivial y una no-trivial.

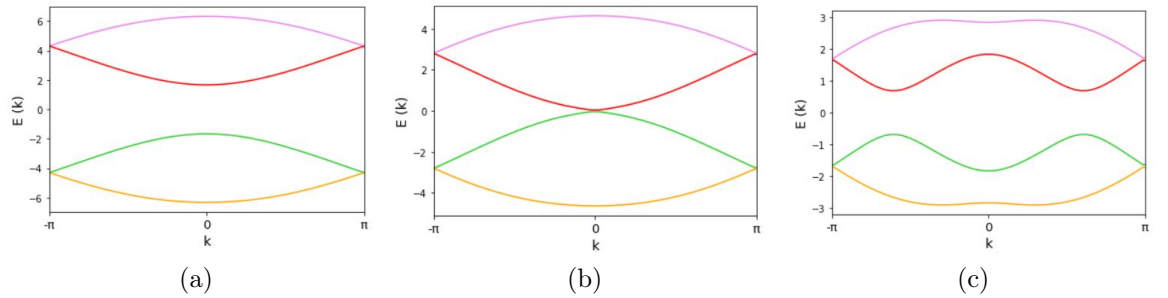


Figura 4.2: Relación de dispersión para las cuasipartículas Ec. 4.15. (a) Para $\mu = 0$, $J = 4$ (fase trivial). (b) Cierre del gap entre bandas para $\mu = 0$, $J \approx 2.3$ (transición de fase). (c) Fase topológica con $\mu = 0$, $J \approx 0.5$.

³Relación de dispersión interactiva: <https://n9.cl/w3hud>

4.3. Resultados

Para generar los resultados expuestos en esta sección desarrollamos códigos en el lenguaje Julia⁴ haciendo uso de la librería ITensor⁵ [10] que implementa de manera eficiente cálculos con MPS y MPO. Además posee implementaciones para el algoritmo DMRG y TEBD.

4.3.1. Diagrama de fases topológicas

Para caracterizar las diferentes fases topológicas del sistema pueden emplearse varios métodos, por ejemplo: en [56] los autores utilizan funciones de correlación de los bordes, por otro lado en [8] se calcula el Pfaffiano del Hamiltoniano el cual está vinculado a un invariante topológico del sistema, como último ejemplo, en [47] se emplean tres métodos complementarios basados en análisis numéricos siendo estos: determinación de la diferencia de energía entre los sectores de paridad, cálculo de la función de onda de Majorana y grado de degeneración del espectro de entrelazamiento. Nuestro trabajo toma como enfoque estos últimos enfoques en donde, mediante el cálculo por DMRG del estado fundamental del sistema, podemos acceder al espectro de entrelazamiento de la matriz densidad reducida del mismo. Luego, las fases topológicas estarán caracterizadas por el grado de degeneración de los autovalores de la matriz densidad reducida como fue mostrado en el *Capítulo 3*.

A continuación se exhiben los diagramas de fases topológicas encontrados para diferentes valores de repulsión Culombiana U .

⁴<https://julialang.org/>

⁵<https://itensor.org/>

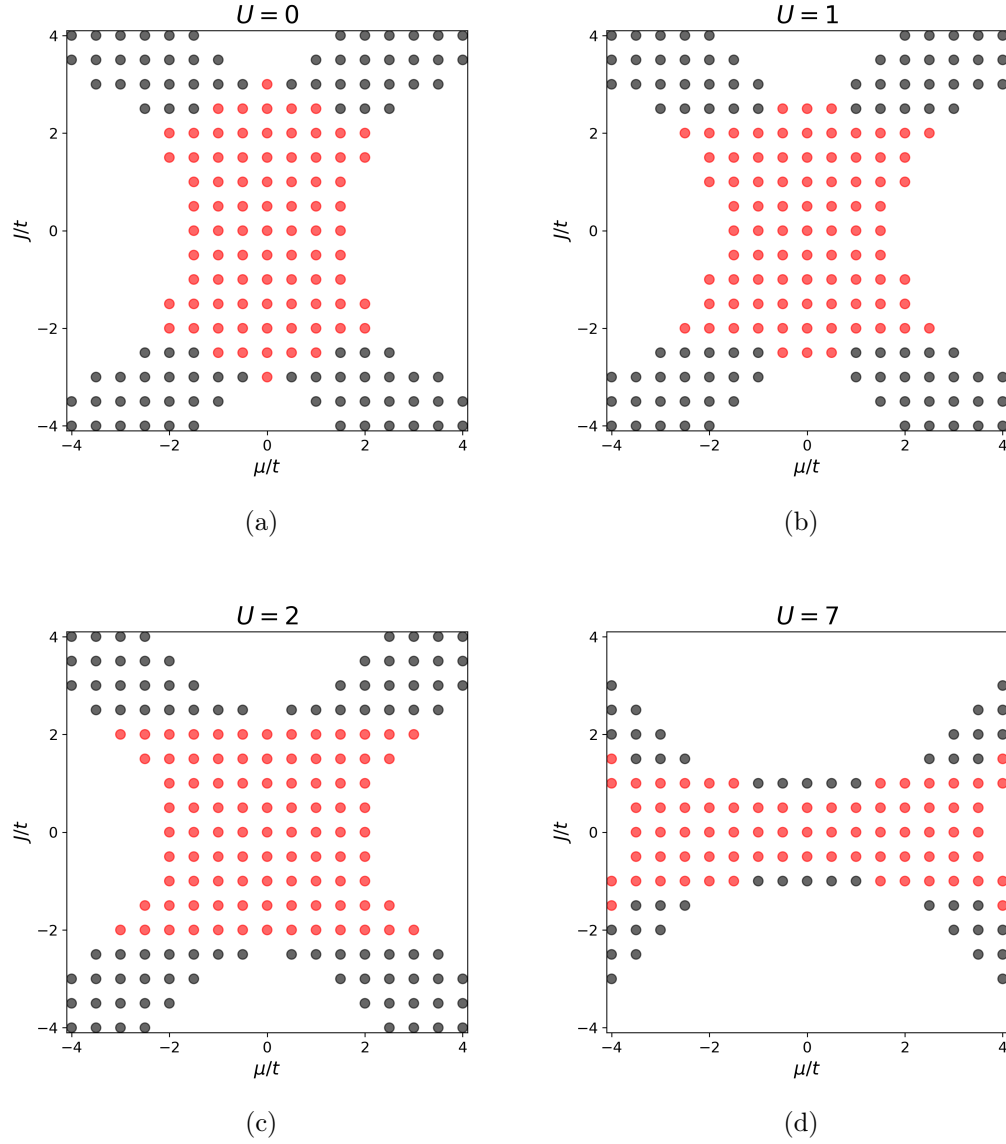


Figura 4.3: Diagramas de fases obtenido mediante DMRG calculando la degeneración del espectro de entrelazamiento. Los puntos de color rojo (deg=4) representan a la fase TRITOP, el color negro (deg=2) a la fase SC topológico y el color blanco (deg=1) a la fase trivial. Para estos cálculos se tomaron como parámetros del DMRG $D_{max} = 50$, $etol = 10^{-6}$ para una red de $L = 400$ sitios con $t = 1$, $\alpha = 0.8$ y $\Delta = 1.2$. Para los casos con $U \neq 0$ el potencial químico fue renormalizado como $\mu \rightarrow \mu - U/2$.

Encontramos que se manifiestan las 3 fases nombradas al principio de este capítulo y están en concordancia con lo encontrado por Crawford utilizando un método de caracterización distinto (ver Fig. 11 de [8]). En el centro de los diagramas encontramos la fase TRI TSC o TRITOP representada por una degeneración de orden cuatro (color rojo) en el espectro de entrelazamiento. Como fue dicho, esta fase alberga dos pares de Kramer de MBS localizados en cada extremo de la

cadena los cuales están protegidos por la simetría de inversión temporal. Cuando aumentamos el campo Zeeman, para algunos valores de μ , se induce una transición a una nueva fase topológica caracterizada por una degeneración doble (color negro) en el espectro de entrelazamiento. Esta fase, perteneciente a clase D, es la llamada SC topológico con la simetría de inversión temporal rota (o simplemente SC topológico, TSC). A diferencia de la fase TRITOP en esta fase la cadena contiene un único modo de Majorana en cada extremo. Por último la fase de color blanco es la fase trivial caracterizada por no tener degeneración en el espectro de entrelazamiento. Para inducir una transición de fase desde una de las dos fases topológicas a la fase trivial se debe cerrar el gap existente en la relación de dispersión, esto se observa en la Fig. 4.2 (b).

Podemos concluir varias cuestiones del estudio de los diagramas de fases. En primer lugar observamos que las dos fases topológicas son robustas ante la variación de los parámetros, es decir presentan un área finita en el espacio de los parámetros. Además aunque a campo $J \neq 0$ el sistema rompe la simetría de inversión temporal la fase TSC TRI se mantiene, mostrando así su robustez ante perturbaciones. Zhang-Kane-Mele [62] concluyeron en su trabajo que, a pesar de mantenerse la fase TRITOP, los MBS no están protegidos a $J \neq 0$, sin embargo Crawford [8] concluye que estos modos son estables ante perturbaciones incluso a J finito, siempre que se mantenga la fase TRITOP. Nuestros estudios van en consonancia con esta segunda conclusión.

Por otro lado, vemos que preñiendo la interacción entre los electrones las fases anteriormente mencionadas se mantienen, e incluso se agrandan para U no muy grandes, ‘achatanose’ a medida que la intensidad de la repulsión coulombiana U aumenta.

Otros diagramas de fases para pairing en sitio convencional (s_{000}) y una combinación del último con el pairing a primeros vecinos ($s_{000} + s_{100}$) son exhibidos en el *Anexo D*.

4.3.2. Función de onda de Majorana

Estudiamos ahora la función de onda de los modos borde de Majorana. Sean $|0\rangle$ y $|1\rangle$ los estados fundamentales del sistema correspondientes a los sectores de paridad par e impar. En la fase topológica estos estados son degenerados y pueden ser relacionados con los operadores de Majorana $\gamma_{a,b}$ de acuerdo a

$$|1\rangle = e^{i\theta}\gamma_a|0\rangle = ie^{i\theta}\gamma_b|0\rangle \quad (4.19)$$

Donde θ está relacionado con un factor de fase global para $|0\rangle$ y $|1\rangle$, por lo que siempre puede ser absorbido por uno de estos dos estados. Asumamos la siguiente expansión para $\gamma_{\alpha=a,b}$ en los operadores c y $c^\dagger$

$$\gamma_\alpha = \sum_j \sum_{\uparrow, \downarrow} \left(\phi_{js}^{(\alpha)} c_{js} + h.c. \right) \quad (4.20)$$

donde $\phi^{(\alpha)}$ es la función de onda correspondiente al modo de Majorana γ_α . La componente ϕ_{js}^α está dada por el anticonmutador $\{c_{is}^\dagger, \gamma_\alpha\}$, mediante la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \{c_{is'}^\dagger, \gamma_\alpha\} &= c_{i,s'}^\dagger \sum_{j,s} \left(\phi_{js}^{(\alpha)} c_{js} + h.c. \right) + \sum_{j,s} \left(\phi_{js}^{(\alpha)} c_{js} + h.c. \right) c_{i,s'}^\dagger \\ &= \sum_{j,s} \left(\phi_{js}^{(\alpha)} c_{is'}^\dagger c_{js} + \phi_{js}^{*(\alpha)} c_{is'}^\dagger c_{js}^\dagger + \phi_{js}^{(\alpha)} c_{js} c_{is'}^\dagger + \phi_{js}^{*(\alpha)} c_{js}^\dagger c_{is'}^\dagger \right) \\ &= \sum_{j,s} \left(\phi_{js}^{(\alpha)} \overbrace{\{c_{is'}^\dagger, c_{js}\}}^{\delta_{i,j} \delta_{s,s'}} + \phi_{js}^{*(\alpha)} \underbrace{\{c_{is'}^\dagger, c_{js}^\dagger\}}_{=0} \right) \\ &= \phi_{is}^{(\alpha)} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Utilizando el resultado anterior y la relación Ec. 4.19, se puede demostrar que

$$\phi_{is}^{(a)} = e^{i\theta} \langle 1 | c_{is}^\dagger | 0 \rangle + e^{-i\theta} \langle 0 | c_{is}^\dagger | 1 \rangle \quad (4.22)$$

$$\phi_{is}^{(b)} = ie^{i\theta} \langle 1 | c_{is}^\dagger | 0 \rangle - ie^{-i\theta} \langle 0 | c_{is}^\dagger | 1 \rangle \quad (4.23)$$

Para calcular las funciones de onda de Majorana desarrolladas en esta sección realizamos dos corridas de DMRG para obtener el estado fundamental en el sector de paridad par e impar ($|0\rangle$, $|1\rangle$), luego se computaron los elementos de matriz $\langle 1 | c_{is}^\dagger | 0 \rangle$ y $\langle 0 | c_{is}^\dagger | 1 \rangle$ para cada sitio i y proyección del spin s . Por último calculamos la distribución de probabilidad $p_j^{(\alpha)}$ tomando el modulo al cuadrado y sumando sobre cada proyección del spin, $p_j^\alpha = \sum_s |\phi_{js}^{(\alpha)}|^2$. Estos cálculos fueron realizados en una red de $L = 400$ sitios con $J = 0.5$, $\mu = 0$ y $U = 0$, con una tolerancia en la energía de $\varepsilon = 10^{-9}$ y con $D = 400$ como el número máximo del valores singulares mantenidos en la SVD.

Como puede verse en la Fig. 4.4, la función de onda de Majorana para $\gamma_{a,b}$ se localiza fuertemente en los bordes de la cadena, decayendo rápidamente en el bulk. Esto es un claro indicador de la presencia de los modos borde de Majorana en el estado fundamental del nanocable.

Los mismos cálculos se realizan para un valor de $J = 4.5$ y $\mu = 0$, punto del diagrama de fases fuera de la fase topológica (fase trivial), y con los mismos parámetros que en el caso anterior. En esta ocasión los modos de Majorana se deslocalizan de los bordes ocupando el bulk de la red. La densidad de probabilidad siempre debe valer uno, $\sum_j p_j^{(\alpha)} = 1$, además fuera de la fase topológica no tenemos modos en los bordes, i.e. la distribución de probabilidad debe anularse en los bordes pero mantener un valor finito en el centro de la red, luego la forma de la densidad de probabilidad será una especie de función Gaussiana centrada en la mitad de la cadena como puede verse en la Fig. 4.5.

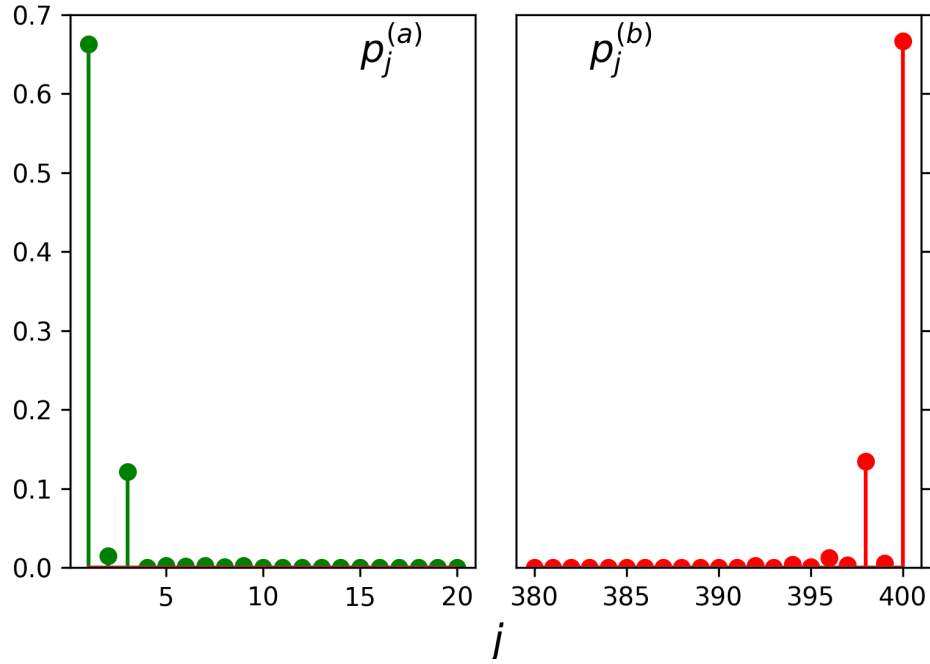


Figura 4.4: Distribución de probabilidad $p_j^{(\alpha)} = \sum_s |\phi_{js}^{(\alpha)}|^2$ de la función de onda del modo borde de Majorana $\phi^{(a)}$ (panel izquierdo) y $\phi^{(b)}$ (panel derecho) para una cadena de 400 sitios con $\alpha = 0.8$, $\Delta = 1.2$, $U = 0$, $J = 0.5$ y $\mu = 0$. Para estos parámetros el sistema se encuentra en la fase topológica TRI TSC (ver Fig. 4.3 (a)), entonces $\phi^{(a,b)}$ son finitas solo cerca de uno de los bordes del sistema y decaen exponencialmente en el bulk.

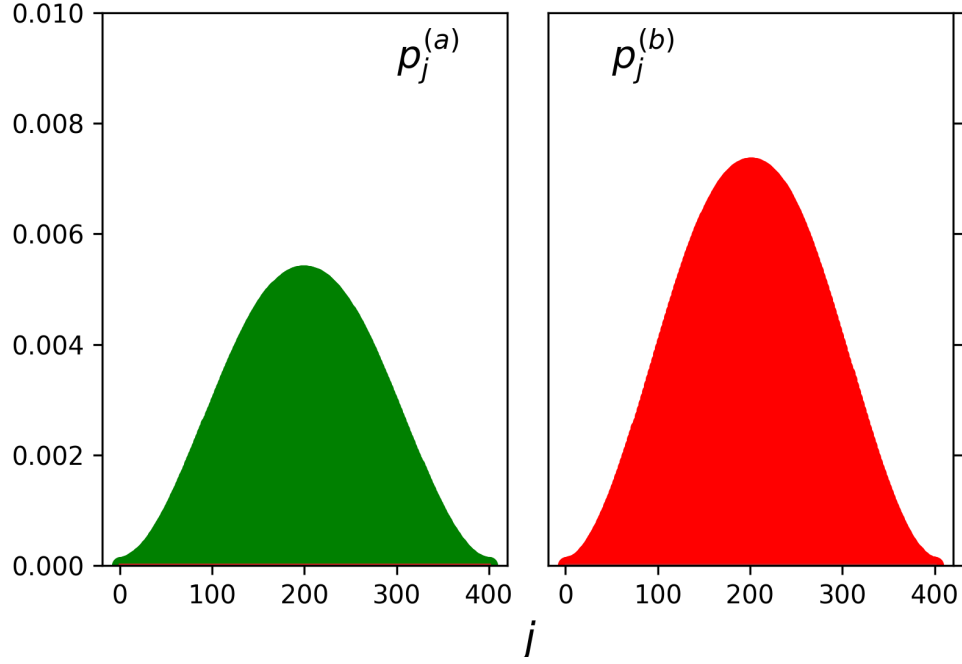


Figura 4.5: Distribución de probabilidad $p_j^{(\alpha)} = \sum_s |\phi_{js}^{(\alpha)}|^2$ de la función de onda del modo borde de Majorana $\phi^{(a)}$ (panel izquierdo) y $\phi^{(b)}$ (panel derecho) para una cadena de 400 sitios con $\alpha = 0.8$, $\Delta = 1.2$, $U = 0$, $J = 4$ y $\mu = 0$. Para estos parámetros el sistema se encuentra en la fase trivial (ver Fig. 4.3 (a)), entonces $\phi^{(a,b)}$ son no nulas únicamente en el bulk y exponencialmente hacia los extremos de la cadena. La discrepancia entre la altura de los picos es debida a que no se consiguió la precisión necesaria por cuestiones computacionales.

En la Ec. 4.20 asumimos que la relación entre los operadores de Majorana con los operadores fermiones $c_{js}^\dagger$ y c_{js} es lineal. Esta suposición es solamente válida en el límite no interactuante, entonces no hay ninguna razón por la cual no deberían aparecer términos de mayor orden en la expansión. Sin embargo, se puede ver empíricamente [47] que las correcciones son muy pequeñas. Calculando la normalización de ϕ_a y ϕ_b se encuentran errores del orden del 1 %, sugiriendo que la descomposición planteada es adecuada. En la Fig. 4.6 se grafica la función de onda de Majorana para el caso con interacción con $U = 0.5$.

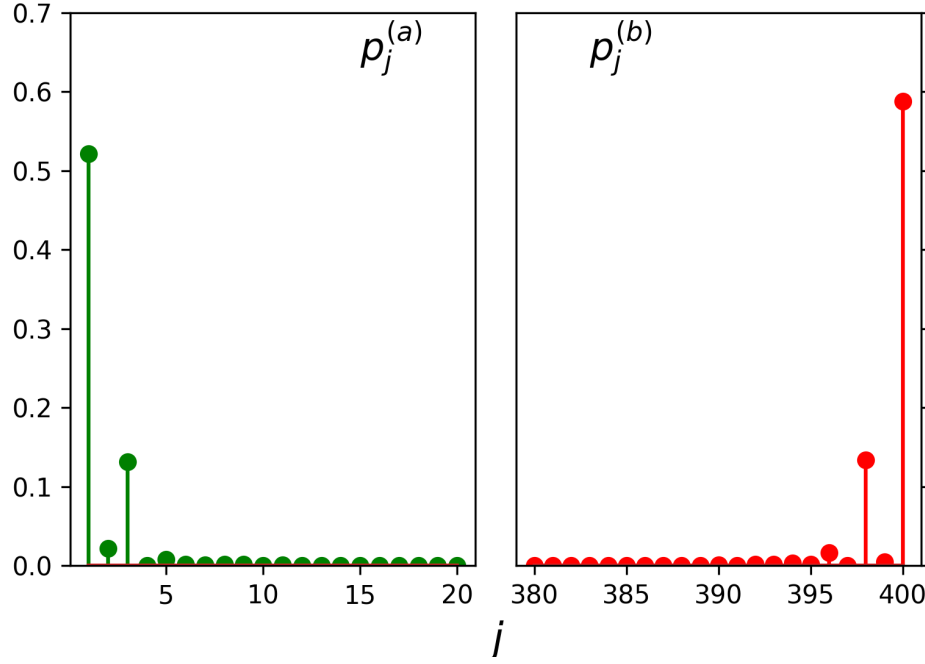


Figura 4.6: Distribución de probabilidad $p_j^{(\alpha)} = \sum_s |\phi_{js}^{(\alpha)}|^2$ de la función de onda del modo borde de Majorana $\phi^{(a)}$ (panel izquierdo) y $\phi^{(b)}$ (panel derecho) para una cadena de 400 sitios con $\alpha = 0.8$, $\Delta = 1.2$, $U = 0.5$, $J = 0.5$ y $\mu = 0$. Para estos parámetros el sistema se encuentra en la fase topológica, entonces $\phi^{(a,b)}$ son finitas solo cerca de uno de los bordes del sistema y decaen exponencialmente en el bulk.

4.3.3. Apagado adiabático de la unión central

La múltiple degeneración en el espectro de entrelazamiento nos ha permitido diferenciar las 3 fases topológicas existentes en nuestro modelo. Por otro lado, dado que el espectro de entrelazamiento es una propiedad altamente no local del sistema, podemos esperar que tenga alguna consecuencia física sobre el mismo.

Si apagamos de forma adiabática el bond o unión central de la cadena las simetrías del Hamiltoniano continuaran conservando la múltiple degeneración en el espectro de entrelazamiento, siempre y cuando no se induzca una transición de fase mediante una variación de los parámetros. Si el sistema empieza en la fase TRI TSC (topológica) y las simetrías de esta fase se preservan en el proceso, al finalizar el apagado de las interacciones del bond central el valor de la entropía de entrelazamiento será $S = \ln 4$ ($S = \ln 2$), permitiendo que siga existiendo una correlación física entre ambas mitades. Esto ocurre porque el espectro de entrelazamiento mantiene su cuádruple (doble) degeneración haciéndose nulos todos los autovalores salvo los cuatro (dos) primeros, adquiriendo el sistema la mínima entropía posible. Por otro lado, si el sistema empieza este proceso desde

la fase trivial, el estado final no poseerá ningún grado de correlación entre ambas mitades de la cadena, siendo así $S = 0$.

Para simular el apagado adiabático del bond central, empezamos obteniendo el estado fundamental del sistema en cada una de las fases mediante DMRG para una red de $L = 32$ sitios. Luego evolucionamos este estado en el tiempo, mediante el algoritmo TEBD (ver *Anexo B*), decreciendo la amplitud de los parámetros en la unión central de la cadena de acuerdo a la ley $t_{weak} = t(1 - \tau\Gamma)$ (igual para α y Δ) donde $\Gamma = 1/\tau_{total}$ y τ es el tiempo. A cada paso de tiempo Δ_τ calculamos la entropía de entrelazamiento de von Neumann en el bond central. Para obtener los resultados mostrados en la Fig. 4.7 tomamos como parámetros para el algoritmo TEBD $\tau_{total} = 5/t$, $\Delta_\tau = 0.1$ y $err = 10^{-8}$, donde err es el error de compresión y para el DMRG $D = 50$ y $etol = 10^{-6}$.

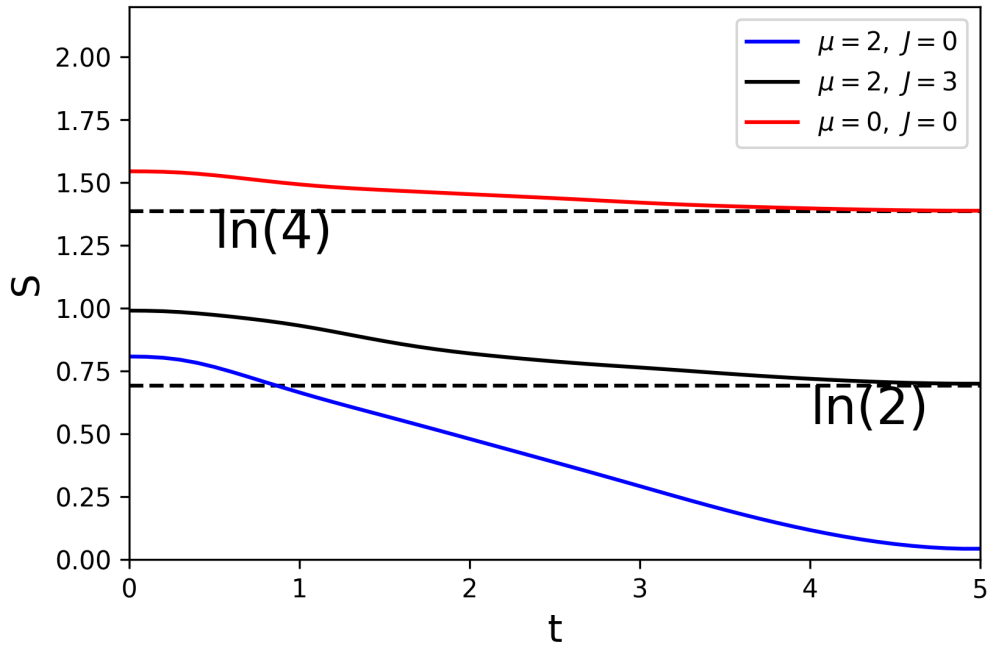


Figura 4.7: Evolución de la entropía de entrelazamiento en el bond central de la cadena a medida que se realiza un apagado adiabático de los acoplamientos correspondientes al mismo. La curva roja corresponde a un sistema en la fase TRI TSC con $\mu = 0$, $J = 0$, la curva negra a la fase topológica ($\mu = 2$, $J = 3$) y la azul a un sistema en la fase trivial con $\mu = 2$, $J = 0$. Los demás parámetros del Hamiltoniano son los mismo para los tres casos ($t = 1$, $\alpha = 0.8$, $\Delta = 1.2$ y $U = 0$).

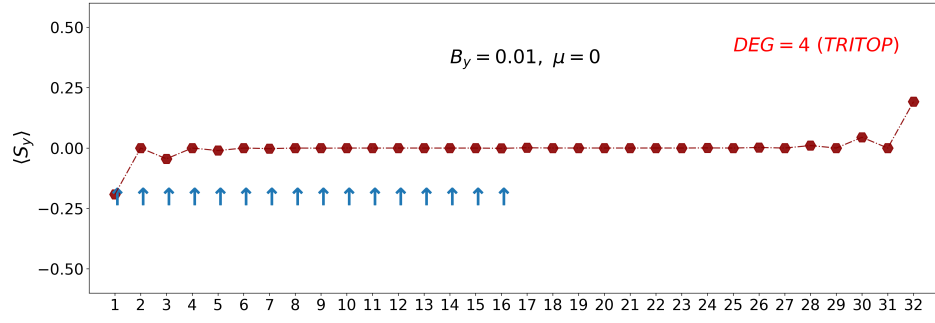
No deja de llamar la atención el hecho de que la entropía de entrelazamiento S no se vuelva nula, para los estados pertenecientes a fases no triviales, luego de que ocurra el apagado de las interacciones en la unión central. Esto es un claro

indicativo de la no localidad de la función de onda que caracteriza al estado fundamental de estos sistemas. A pesar de la bisección experimentada por la cadena, sus mitades continúan correlacionadas, compartiendo así información sin importar que tan ‘alejadas’ puedan encontrarse una de la otra. Este comportamiento es el mismo que el descrito en el *Capítulo 2* para un singlete, pero ahora en un sistema de muchos cuerpos, lo cual enaltece lo «fantasmagórico» de este fenómeno, como fuera descrito por Einstein [9] en los inicios de la mecánica cuántica.

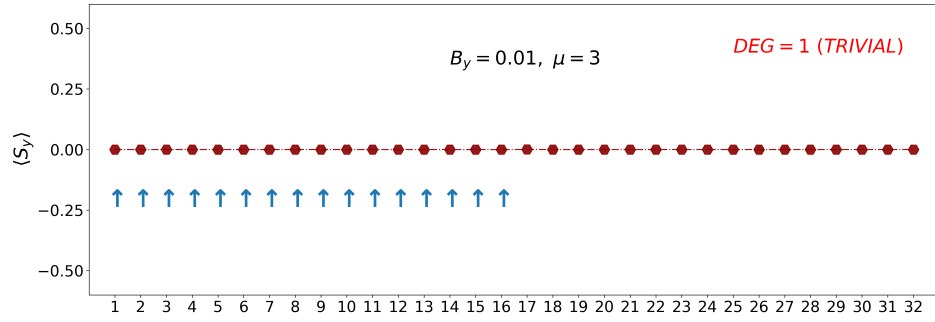
4.3.4. Fraccionalización del spin

En [62], Zhang-Kane-Mele encontraron que un par de MBSs en un extremo de la cadena forman dos estados con $\sigma_y = \tau_y = \pm 1$ mientras que el otro par en el extremo opuesto forma dos estados con $\sigma_y = -\tau_y = \pm 1$. Entonces, un campo Zeeman en la dirección x o z solo acopla estados con proyecciones σ_y opuestas y extremos opuestos, cuya superposición de la función de onda decae exponencialmente en la longitud del SC. En consecuencia, ninguno de los pares de Majorana puede adquirir energía desde su estado de energía cero hasta que sea inducida una transición de fase. Sin embargo, un pequeño campo Zeeman B_y en la dirección del acople spin-órbita puede dividir los dos estados de energía cero con paridad fermiónica opuesta en cada extremo induciendo así una transición a la fase trivial. El campo σ_y también cierra el gap del SC.

Si el campo B_y es aplicado solo en la mitad de la cadena los autores de [2, 3] mostraron que ocurre un splitting Zeeman en cada borde de la misma, apareciendo así excitaciones con spin fraccionalizado $S_y = \pm 1/4$ localizados en cada extremo de la cadena. Esto es una clara evidencia del entrelazamiento entre los modos localizados en bordes opuestos. Utilizando las mismas técnicas de las secciones pasadas obtuvimos el valor medio de la proyección del spin en el eje y para el modelo en estudio junto con un campo Zeeman σ_y aplicado en la mitad de la cadena. En las Fig. 4.8 se observa la fraccionalización del spin en cada borde cuando el sistema está en la fase TRITOP y la ausencia de este fenómeno cuando se encuentra en la fase trivial.



(a)



(b)

Figura 4.8: Proyección del spin en la dirección y en cada sitio de la cadena de $L = 32$ sitios para el modelo estudiado más un termino de campo Zeeman aplicado en la mitad de la cadena (flechas azules) con dirección y , y modulo B_y para (a) la fase topológica TRITOP con $\mu = 0$ y $J = 0$ (b) la fase trivial con $\mu = 3$ y $J = 0$. Parámetros usados para el calculo con DMRG $D_{max} = 300$, $etol = 10^{-6}$.

Las respuestas magnéticas mencionadas en los párrafos anteriores pueden ser usadas como una “*smoking gun*” (una evidencia clara) de la fraccionalización del spin y de la existencia de MBSs en técnicas de microscopia túnel [3].

Capítulo 5

Comentarios, Conclusiones y Perspectivas

En este trabajo fuimos capaces de caracterizar y estudiar las diversas fases topológicas de un superconductor topológico unidimensional en el espacio de los parámetros μ (potencial químico) y J (campo Zeeman). Para esto hicimos uso de herramientas numéricas como el DMRG (grupo de renormalización de la matriz densidad) y TEDB (evolución temporal por diezmado de bloques), mediante las cuales, en primer lugar, calculamos la degeneración del espectro de entrelazamiento de la matriz densidad reducida del sistema, invariante topológico que nos permitió caracterizar a las fases del sistema. Luego nos dedicamos a obtener la función de onda de Majorana, mostrando como aparecen estos elusivos fermiones en cada extremo del SC en la fase topológica no trivial.

Mediante la evolución temporal del estado fundamental de nuestro sistema fuimos capaces de observar como varía la entropía de entrelazamiento entre las dos mitades de la cadena a medida que apagamos adiabáticamente la unión entre ambas partes de la misma. Encontramos que si el estado empezaba su evolución temporal desde una fase topológica no trivial, al finalizar la misma, la entropía de entrelazamiento era no nula. Por otro lado, si el estado inicial se encontraba en la fase trivial la entropía iba a cero durante la evolución del estado en el tiempo.

En último lugar estudiamos como se comporta el sistema bajo la acción de un campo magnético, encontrando, como se muestra en la bibliografía, que al aplicar un campo B_y en la mitad de la cadena aparecen excitaciones fraccionarias de spin $S = 1/4$. Este último estudio junto con la evolución temporal de la entropía de entrelazamiento, nombrada en el párrafo anterior, pueden usarse como indicadores para la confirmación experimental de la existencia de las fases topológicas y de los modos de Majorana en los superconductores topológicos. Dicha confirma-

ción aún permanece esquivada y controversial [63] por las grandes complicaciones experimentales que conlleva caracterizar a estos sistemas.

Como perspectiva a futuro se propone extender el modelo propuesto por Crawford y estudiado en este trabajo a uno en donde las impurezas magnéticas sean tratadas como cuánticas -no más como clásicas- e interactúen mediante una interacción Kondo con el SC. Inmediatamente nuevas preguntas surgen de esta propuesta, ¿Se sostiene la fase topológica si las impurezas son cuánticas? ¿Donde se albergan los modos de Majorana en este sistema que ya no es más unidimensional? ¿Cómo cambian las propiedades del sistema si existe interacción entre las impurezas de Kondo? Esperamos abordar estas y más cuestiones haciendo uso de las herramientas, técnicas y habilidades desarrolladas y obtenidas en el presente trabajo.

Bibliografía

- [1] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. In *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models*, pages 249–252. Springer, 2004.
- [2] A. A. Aligia and L. Arrachea. Entangled end states with fractionalized spin projection in a time-reversal-invariant topological superconducting wire. *Phys. Rev. B*, 98:174507, Nov 2018.
- [3] A. A. Aligia and A. Camjayi. Exact analytical solution of a time-reversal-invariant topological superconducting wire. *Physical Review B*, 100(11):115413, 2019.
- [4] P. W. Anderson. More is different: broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of science. *Science*, 177(4047):393–396, 1972.
- [5] A. V. Balatsky, I. Vekhter, and J.-X. Zhu. Impurity-induced states in conventional and unconventional superconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 78:373–433, May 2006.
- [6] R. J. Baxter. Dimers on a rectangular lattice. *Journal of Mathematical Physics*, 9(4):650–654, 1968.
- [7] P. Calabrese and J. Cardy. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of statistical mechanics: theory and experiment*, 2004(06):P06002, 2004.
- [8] D. Crawford, E. Mascot, D. K. Morr, and S. Rachel. High-temperature majorana fermions in magnet-superconductor hybrid systems. *Physical Review B*, 101(17):174510, 2020.
- [9] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical review*, 47(10):777, 1935.

- [10] M. Fishman, S. R. White, and E. M. Stoudenmire. The ITensor software library for tensor network calculations, 2020.
- [11] L. Fu and C. L. Kane. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 100:096407, Mar 2008.
- [12] Z.-C. Gu. Fractionalized time reversal, parity, and charge conjugation symmetry in a topological superconductor: a possible origin of three generations of neutrinos and mass mixing. *Physical Review Research*, 2(3):033290, 2020.
- [13] M. B. Hastings. An area law for one-dimensional quantum systems. *Journal of statistical mechanics: theory and experiment*, 2007(08):P08024, 2007.
- [14] J.-W. Huo, W. Chen, U. Schollwöck, M. Troyer, and F.-C. Zhang. Dipolar dynamics for interacting ultracold fermions in a trapped optical lattice. *Physical Review A*, 86(3):033611, 2012.
- [15] D. A. Ivanov. Non-abelian statistics of half-quantum vortices in p -wave superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 86:268–271, Jan 2001.
- [16] C. Kallin and J. Berlinsky. Chiral superconductors. *Reports on Progress in Physics*, 79(5):054502, 2016.
- [17] A. Kitaev. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Annals of Physics*, 321(1):2–111, 2006. January Special Issue.
- [18] A. Kitaev. Periodic table for topological insulators and superconductors. In *AIP conference proceedings*, volume 1134, pages 22–30. American Institute of Physics, 2009.
- [19] A. Kitaev and J. Preskill. Topological entanglement entropy. *Physical review letters*, 96(11):110404, 2006.
- [20] A. Y. Kitaev. Unpaired majorana fermions in quantum wires. *Physics-uspekhi*, 44(10S):131, 2001.
- [21] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45:494–497, Aug 1980.
- [22] E. Koch. Exact diagonalization and lanczos method - cond-mat.de. <https://www.cond-mat.de/events/correl19/manuscripts/koch.pdf>, 2019.
- [23] M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770, 2007.

- [24] L. Landau. The theory of phase transitions. *Nature*, 138(3498):840–841, 1936.
- [25] M. Levin and X.-G. Wen. Detecting topological order in a ground state wave function. *Physical review letters*, 96(11):110405, 2006.
- [26] E. H. Lieb and D. W. Robinson. The finite group velocity of quantum spin systems. In *Statistical mechanics*, pages 425–431. Springer, 1972.
- [27] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma. Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures. *Phys. Rev. Lett.*, 105:077001, Aug 2010.
- [28] E. Majorana. Teoria simmetrica dell’elettrone e del positrone. *Il Nuovo Cimento (1924-1942)*, 14(4):171–184, 1937.
- [29] I. P. McCulloch. From density-matrix renormalization group to matrix product states. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2007(10):P10014, 2007.
- [30] G. Moore and N. Read. Nonabelions in the fractional quantum hall effect. *Nuclear Physics B*, 360(2):362–396, 1991.
- [31] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. Plissard, E. P. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven. Signatures of majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. *Science*, 336(6084):1003–1007, 2012.
- [32] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Rev. Mod. Phys.*, 80:1083–1159, Sep 2008.
- [33] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen. Helical liquids and majorana bound states in quantum wires. *Phys. Rev. Lett.*, 105:177002, Oct 2010.
- [34] O. Pankratov, S. Pakhomov, and B. Volkov. Supersymmetry in heterojunctions: Band-inverting contact on the basis of pb1xsnxte and hg1xcdxte. *Solid state communications*, 61(2):93–96, 1987.
- [35] D. Pérez-García, M. M. Wolf, M. Sanz, F. Verstraete, and J. I. Cirac. String order and symmetries in quantum spin lattices. *Physical review letters*, 100(16):167202, 2008.
- [36] F. Pollmann. Entanglement in many-body systems - cond-mat.de. <https://www.cond-mat.de/events/correl20/manuscripts/pollmann.pdf>, 2020.

- [37] F. Pollmann, S. Mukerjee, A. M. Turner, and J. E. Moore. Theory of finite-entanglement scaling at one-dimensional quantum critical points. *Physical review letters*, 102(25):255701, 2009.
- [38] F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa. Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension. *Physical review b*, 81(6):064439, 2010.
- [39] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. Ludwig. Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy. *New Journal of Physics*, 12(6):065010, 2010.
- [40] M. Sato and Y. Ando. Topological superconductors: a review. *Reports on Progress in Physics*, 80(7):076501, 2017.
- [41] J. Sau. Bulk-edge correspondence in the kitaev chain — topology in condensed matter - topocondmat.org. https://topocondmat.org/w1_topointro/1D.html, 2021.
- [42] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Phys. Rev. B*, 78:195125, Nov 2008.
- [43] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of physics*, 326(1):96–192, 2011.
- [44] U. Schollwöck. Dmrg: Ground states, time evolution, and spectral functions - cond-mat.de. <https://www.cond-mat.de/events/correl13/manuscripts/schollwoeck.pdf>, 2013.
- [45] M. R. Shegelski. Triplet versus singlet entangled states in teaching the einstein–podolsky–rosen paradox. *European Journal of Physics*, 34(3):773, 2013.
- [46] A. M. Steane. Efficient fault-tolerant quantum computing. *Nature*, 399(6732):124–126, 1999.
- [47] E. Stoudenmire, J. Alicea, O. A. Starykh, and M. P. Fisher. Interaction effects in topological superconducting wires supporting majorana fermions. *Physical Review B*, 84(1):014503, 2011.
- [48] L. Tagliacozzo, T. R. De Oliveira, S. Iblisdir, and J. Latorre. Scaling of entanglement support for matrix product states. *Physical review b*, 78(2):024410, 2008.

- [49] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, Aug 1982.
- [50] M. Troyer and U.-J. Wiese. Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum monte carlo simulations. *Physical review letters*, 94(17):170201, 2005.
- [51] F. Verstraete, J. J. Garcia-Ripoll, and J. I. Cirac. Matrix product density operators: Simulation of finite-temperature and dissipative systems. *Physical review letters*, 93(20):207204, 2004.
- [52] F. Verstraete, D. Porras, and J. I. Cirac. Density matrix renormalization group and periodic boundary conditions: A quantum information perspective. *Physical review letters*, 93(22):227205, 2004.
- [53] G. Vidal. Efficient simulation of one-dimensional quantum many-body systems. *Physical review letters*, 93(4):040502, 2004.
- [54] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev. Entanglement in quantum critical phenomena. *Physical review letters*, 90(22):227902, 2003.
- [55] B. Volkov and O. Pankratov. Two-dimensional massless electrons in an inverted contact. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 42:178, 1985.
- [56] Y. Wang, J.-J. Miao, H.-K. Jin, and S. Chen. Characterization of topological phases of dimerized kitaev chain via edge correlation functions. *Physical Review B*, 96(20):205428, 2017.
- [57] S. R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical review letters*, 69(19):2863, 1992.
- [58] S. R. White. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B*, 48:10345–10356, Oct 1993.
- [59] S. R. White and A. E. Feiguin. Real-time evolution using the density matrix renormalization group. *Physical review letters*, 93(7):076401, 2004.
- [60] F. Wilczek. Quantum mechanics of fractional-spin particles. *Phys. Rev. Lett.*, 49:957–959, Oct 1982.
- [61] K. G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Reviews of modern physics*, 47(4):773, 1975.

-
- [62] F. Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele. Time-reversal-invariant topological superconductivity and majorana kramers pairs. *Phys. Rev. Lett.*, 111:056402, Aug 2013.
- [63] H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic, D. Xu, J. A. Logan, G. Wang, N. Van Loo, J. D. Bommer, M. W. De Moor, D. Car, et al. Retracted article: Quantized majorana conductance. *Nature*, 556(7699):74–79, 2018.

Anexos

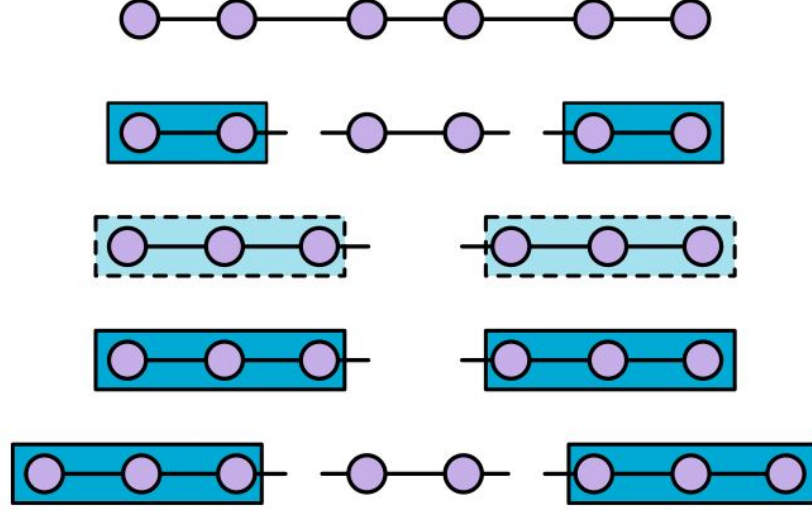
Anexo A

Algoritmo DMRG: Formulación original

Aunque los detalles del procedimiento dependen fuertemente de la implementación particular, la formulación básica del DMRG empieza con el algoritmo infinito o warmup seguido del algoritmo finito o sweeping. La idea principal detrás del warmup es hacer crecer ambos bloques agregando un sitio por vez hasta una cantidad de estados D en el cual se comenzará a truncar la base aplicando los conceptos del *Capítulo 2*. Cuando se alcance el tamaño deseado se continuará con el sweeping, el cual itera el proceso sobre el sistema completo hasta alcanzar la convergencia.

. Algoritmo Infinito: *Warmup*

El sistema, que se considera 1D, comienza con una pequeña cadena de N sitios. Esta cadena se divide en una parte izquierda, otra derecha y dos sitios entre ellas. Para describir el proceso se utiliza la Fig. A.1

Figura A.1: Crecimiento de los bloques durante el *warmup*

En esta figura, se notan dos tipos de objetos: bloques (pueden ser grandes, con muchos sitios, o pequeños, con un solo sitio) y los operadores de link entre ellos que serán llamados ganchos. Ambos estarán representados por ciertos operadores.

Cuando la cantidad de sitios es menor que D (máxima cantidad de estados con la que se trabaja) se agregan sitios a ambos bloques, sin truncar, diagonalizando exactamente. Ahora, cuando los bloques sean lo suficientemente grandes y se superen los D estados, entonces se inicia el proceso de truncamiento del espacio de Hilbert con la matriz densidad:

1. Usando los operadores de bloques y ganchos se compone una matriz efectiva que represente el Hamiltoniano del superbloque (H_{SB})
2. Se encuentra el estado fundamental ($|\psi_0\rangle$) de este superbloque utilizando algún método de diagonalización exacta, por ejemplo, el método de Lanczos.
3. Con ese estado se definen las matrices densidad para las dos mitades del sistema. Si el sistema es simétrico bajo reflexión, solamente necesitamos una de ellas.
4. Se obtiene el espectro completo de dichas matrices y se retienen los D autovalores más grandes (con sus respectivos autovectores).
5. Usando las matrices que se utilizaron para rotar las matrices densidad originales, se rota el Hamiltoniano y los operadores involucrados en la interacción entre bloques (ganchos).
6. Se agrega un nuevo sitio a cada bloque obteniendo un nuevo Hamiltoniano que vuelve a ser de dimensión mayor que D y se reiteran todos los pasos

involucrados con el truncamiento.

Después de este proceso el sistema ha incrementado el número de sitios: $N \rightarrow N + 2$. El proceso se detendrá cuando se alcance el tamaño deseado.

. Algoritmo finito: *Sweeping*

El warmup posee la desventaja de que la función de onda del estado fundamental del superbloque es diferente en cada iteración debido a que cambia el número de sitios. Esto puede introducir problemas en la convergencia y disponer de un algoritmo en el cual el tamaño del sistema sea siempre el mismo es de gran utilidad en algunos problemas. Por esto, para que el DMRG alcance una buena precisión, se lo combina con el algoritmo infinito o sweeping. Durante el warmup se deben almacenar todos los operadores y Hamiltonianos de ambos bloques junto con las matrices necesarias para rotarlas. Cuando el sistema alcance el tamaño deseado se comenzará con los sweeps. A continuación se describe un sweep de izquierda a derecha:

1. Se agrega un sitio al bloque izquierdo con la misma idea que en el warmup. Como se mantiene el número total de sitios, el bloque derecho debe achicarse. Para representar este bloque se utilizan los operadores almacenados del warmup o del sweep anterior.
2. Ahora se diagonaliza el nuevo Hamiltoniano de los dos bloques combinados, H_{SB} , de la misma forma que en el warmup.
3. Se calcula la matriz densidad del bloque izquierdo.
4. Se obtiene el espectro completo de dicha matriz y se retienen los m autovalores más grandes (con sus respectivos autovectores).
5. Usando las matrices que se utilizaron para rotar las matrices densidad originales, rota el Hamiltoniano y los operadores del bloque izquierdo involucrados en la interacción entre bloques (ganchos).

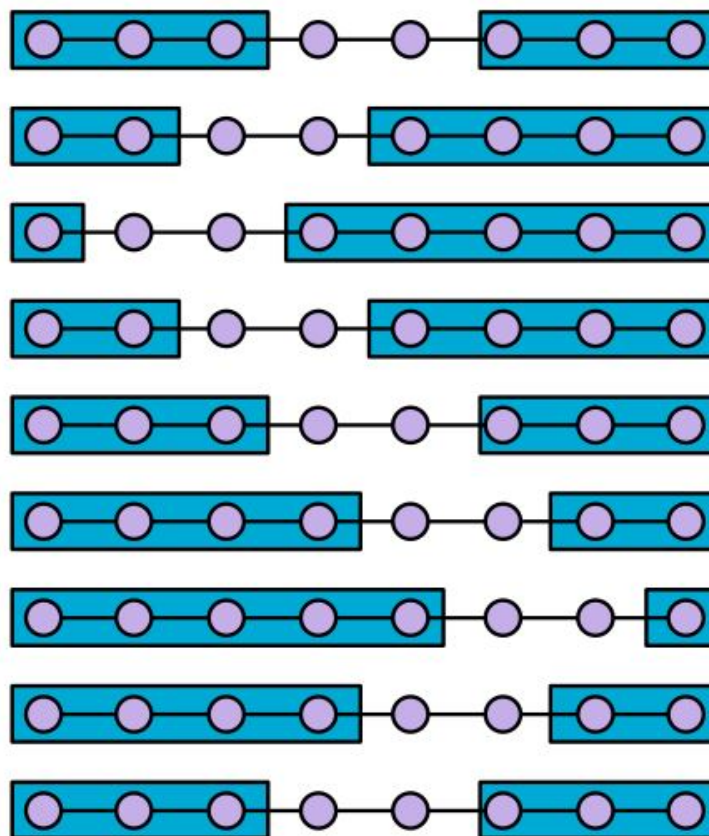


Figura A.2: Esquema de un *sweep*: durante el *sweeping* un bloque crece y el otro se achica

Este proceso continúa, creciendo el bloque izquierdo y disminuyendo el derecho. Luego se invierte el sentido comenzando a modificar el derecho y utilizando el bloque izquierdo del último sweep. Alcanzado el punto inicial, se dice que se completó un barrido o sweep. Las energías convergen usualmente en unos pocos sweeps hasta la precisión deseada. Esta parte del algoritmo funciona de una manera similar que un bucle autoconsistente, donde las interacciones van mejorando la solución.

Anexo B

Algoritmo TEBD

En esta sección se introduce el concepto general del algoritmo TEBD [44] (*time evolution block decimation*). Vamos a restringir nuestra atención a Hamiltonianos independientes del tiempo $\hat{H}$; los Hamiltonianos dependientes del tiempo pueden modelarse mediante una secuencia de Hamiltonianos que cambia después de cada paso de tiempo pequeño.

Supongamos que tenemos un estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ en la forma MPS, dicho estado se puede construir a mano (en casos simples, como un estado Néel) o se puede obtener mediante algún otro cálculo de MPS, por ejemplo calculando el estado fundamental de algún Hamiltoniano mediante DMRG. En el caso de evolución coherente, el estado en el tiempo t está dado por

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle \quad (\text{B.1})$$

Si logramos escribir a $e^{-i\hat{H}t}$ como un MPO, el problema se resolvería dentro del marco de este formalismo, ya que al aplicar un MPO a un MPS se obtiene un nuevo MPS. Hay varios problemas con esta idea: (i) no se sabe cómo hacer esto exactamente de manera eficiente en una computadora clásica, y mucho menos en una hoja de papel; (ii) normalmente nos interesa la evolución completa, es decir, el estado durante una secuencia completa de tiempos; (iii) si la dimensión del MPO resultante es demasiado grande, el MPS resultante no será manejable numéricamente. Si bien los problemas (i) y (ii) pueden resolverse con cierto costo en precisión, veremos que (iii) es un problema fundamental.

El primero y más popular enfoque consiste en «trotterizar» la evolución del tiempo. Supongamos que queremos calcular $|\Psi(t)\rangle$ para tiempos $t \in [0, T]$. Entonces dividimos la longitud del intervalo T en $N \rightarrow \infty$ pasos de tiempo $\tau \rightarrow 0$ con $N\tau = T$. En la práctica numérica, τ será, por supuesto, finito (por ejemplo

$\tau = 0.01$) cuando una escala de tiempo típica del problema es 1. Supongamos también que nuestro hamiltoniano consta solo de términos a primeros vecinos, como $S_i \cdot S_{i+1}$ en el modelo de Heisenberg o el término de hopping $\sum_{\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i+1\sigma} + \text{h.c.})$ en el modelo de Hubbard. Entonces podemos dividir el Hamiltoniano en términos de primeros vecinos, $\hat{H} = \sum_{i=1}^{L-1} \hat{h}_i$, donde en el caso del modelo de Heisenberg $\hat{h}_i = \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1}$. Términos *onsite* como la interacción Culombiana se ‘distribuyen’ entre los dos $\hat{h}$ que comparten un sitio y se cuenta solo la mitad, por ejemplo $U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ se escriben como $U/2 \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ tanto en $\hat{h}_{i-1}$ como en $\hat{h}_i$.

Podemos entonces reescribir al operador evolución temporal como

$$e^{-i\hat{H}T} = \prod_{i=1}^N e^{-i\hat{H}\tau} = \prod_{k=1}^N e^{-i\sum_{i=1}^{L-1} \hat{h}_i\tau} \stackrel{!}{=} \prod_{k=1}^N \prod_{i=1}^{L-1} e^{-i\hat{h}_i\tau} \quad (\text{B.2})$$

No solo ahora tenemos acceso a todos los tiempos $\tau, 2\tau, \dots, N\tau$, sino que ahora solo tenemos que calcular la evolución temporal (infinitesimal) en dos sitios, $e^{-i\hat{h}_i\tau}$. Esta es una matriz de dimensión $(d^2 \times d^2)$ obtenida diagonalizando la representación matricial H_i de $\hat{h}_i$ de dimensión $(d^2 \times d^2)$ y exponenciandola.

$$H_i = U \Lambda U^{\dagger} \Rightarrow e^{-iH_i\tau} = U e^{-i\Lambda\tau} U^{\dagger} = U \cdot \text{diag}(e^{-i\lambda_1\tau}, e^{-i\lambda_2\tau}, \dots) \cdot U^{\dagger} \quad (\text{B.3})$$

Estas operaciones se pueden implementar fácilmente utilizando rutinas comunes de diagonalización y multiplicación de matrices. Sin embargo, como indica el signo de exclamación en la última identidad en Ec. B.2. Esta factorización no es valida, debido a la fórmula de Glauber y la no conmutatividad de los operadores cuánticos en general,

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \quad (\text{B.4})$$

Cuando los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ no conmuten la exponencial de la suma no podrá ser factorizada. Sin embargo, los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ escalan con τ mientras que el conmutador $[\hat{A}, \hat{B}]$ lo hace con τ^2 . Entonces, en el límite $\tau \rightarrow 0$, la factorización se vuelve exacta y para τ finito el error de la misma será de orden τ^2 . Esta descomposición del operador de evolución temporal, en donde aproximamos $e^{\hat{A}+\hat{B}} \approx e^{\hat{A}} e^{\hat{B}}$ se llama **descomposición de Trotter** de primer orden, porque después de $N = T/\tau$ pasos de tiempo, el error acumulado será de orden τ . Descomposiciones de orden superior pueden ser planteadas, siendo las de orden τ^4 las más usada.

Para desarrollar el método nos centraremos en la descomposición a orden lineal en τ . Como los operadores de evolución temporal $\hat{h}_i$ conmutan entre ellos sino comparten ningún sitio -recordar que estamos con interacciones solo a primeros

vecinos-, es conveniente separar al Hamiltoniano entre uniones pares e impares

$$\hat{H} = \hat{H}_{par} + \hat{H}_{impar} \quad \hat{H}_{par} = \sum_i \hat{h}_{2i} \quad \hat{H}_{impar} = \sum_i \hat{h}_{2i-1} \quad (\text{B.5})$$

y escribir la evolución temporal como

$$e^{-i\hat{H}T} = e^{-i\hat{H}_{even} \tau} e^{-i\hat{H}_{odd} \tau}; \quad e^{-i\hat{H}_{even} \tau} = \prod_i e^{-i\hat{h}_{2i} \tau}, \quad e^{-i\hat{H}_{odd} \tau} = \prod_i e^{-i\hat{h}_{2i-1} \tau} \quad (\text{B.6})$$

Suponiendo que conocemos los operadores de evolución temporal de dos sitios en su forma MPO dos sitios, podemos representar de manera gráfica el MPO descompuesto en Trotter para la evolución temporal global como se muestra en la Fig. B.1.

El MPO asociado al operador evolución temporal de dos sitios se puede derivar fácilmente mediante el procedimiento de descomposición SVD desarrollado para los MPS. Es fácil calcular $U^{\sigma_1\sigma_2, \sigma'_1\sigma'_2} = \langle \sigma_1\sigma_2 | e^{-i\hat{h}_i\tau} | \sigma'_1\sigma'_2 \rangle$. Luego procedemos reorganizando los índices y realizando una SVD de la forma

$$U^{\sigma_1\sigma_2, \sigma'_1\sigma'_2} = \bar{U}_{\sigma_1\sigma'_1, \sigma_2\sigma'_2} \stackrel{SVD}{=} \sum_b W_{\sigma_1\sigma'_1, b} S_{b,b} W_{b, \sigma_2\sigma'_2} = \sum_b M_{1,b}^{\sigma_1\sigma'_1} M_{b,1}^{\sigma_2\sigma'_2} \quad (\text{B.7})$$

que es un MPO donde los escalares $\sqrt{S_{b,b}}$ fueron absorbidos en las matrices izquierdas y derechas. Como la matriz original es de dimensión $(d^2 \times d^2)$, la dimensión del MPO es $D_W = d^2$; más precisamente, las matrices para los bonds impares tienen dimensiones $(1 \times d^2)$, $(d^2 \times 1)$, $(1 \times d^2), \dots$ y viceversa para los bonds pares. Después de un paso de Trotter, las dimensiones de las matrices del MPS habrán crecido un factor d^2 . Esto significa que después de cada paso de tiempo, tendremos que **comprimir** el MPS. De manera sencilla el algoritmo de evolución temporal presenta las siguientes etapas:

1. Aplicamos el paso infinitesimal de tiempo de Trotter en forma de MPO a un MPS para obtener $|\Psi(t)\rangle \rightarrow |\Psi(t + \tau)\rangle$
2. Comprimimos $|\Psi(t + \tau)\rangle$
3. Continuamos con el siguiente paso de tiempo

En principio, parece que este procedimiento podría continuar para siempre. El error de descomposición de Trotter, que es $\mathcal{O}(\tau^2)$ por cada paso de tiempo, se acumulará como $\tau/t \mathcal{O}(\tau^2)$, por lo que crecerá linealmente en el tiempo. Este error se puede hacer arbitrariamente pequeño tomando $t \rightarrow \infty$, o de forma más eficientemente, usando descomposiciones de Trotter de orden superior donde el

error escala como $\mathcal{O}(\tau^3)$ o incluso $\mathcal{O}(\tau^5)$ en los enfoques más utilizados. Sin embargo, el problema principal radica en la compresión. Por el teorema de Lieb-Robinson [26], se observa que el entrelazamiento en una evolución temporal de un estado cuántico crece linealmente con el tiempo, $S(t) < S(O) + \nu t$, donde ν es una constante y el límite lineal se cumple en quenches globales del Hamiltoniano. Un operador densidad reducido de dimensión D puede codificar como máximo el entrelazamiento $S = \ln D$, por lo que si queremos seguir manteniendo la misma precisión en el estado $|\Psi(t)\rangle$ que en el estado $|\Psi(t + \tau)\rangle$ tendremos que aumentar el tamaño de las matrices en el MPS, en el peor de los casos, exponencialmente a medida que pasa el tiempo. Por lo tanto, las simulaciones de evolución temporal alcanzarán el régimen exponencial después de algún tiempo. Por el momento no se ha encontrado una solución para este problema pero, por otro lado, en muchas situaciones de interés ν es lo suficientemente pequeño como para que se logren realizar evoluciones temporales que muestran física interesante.

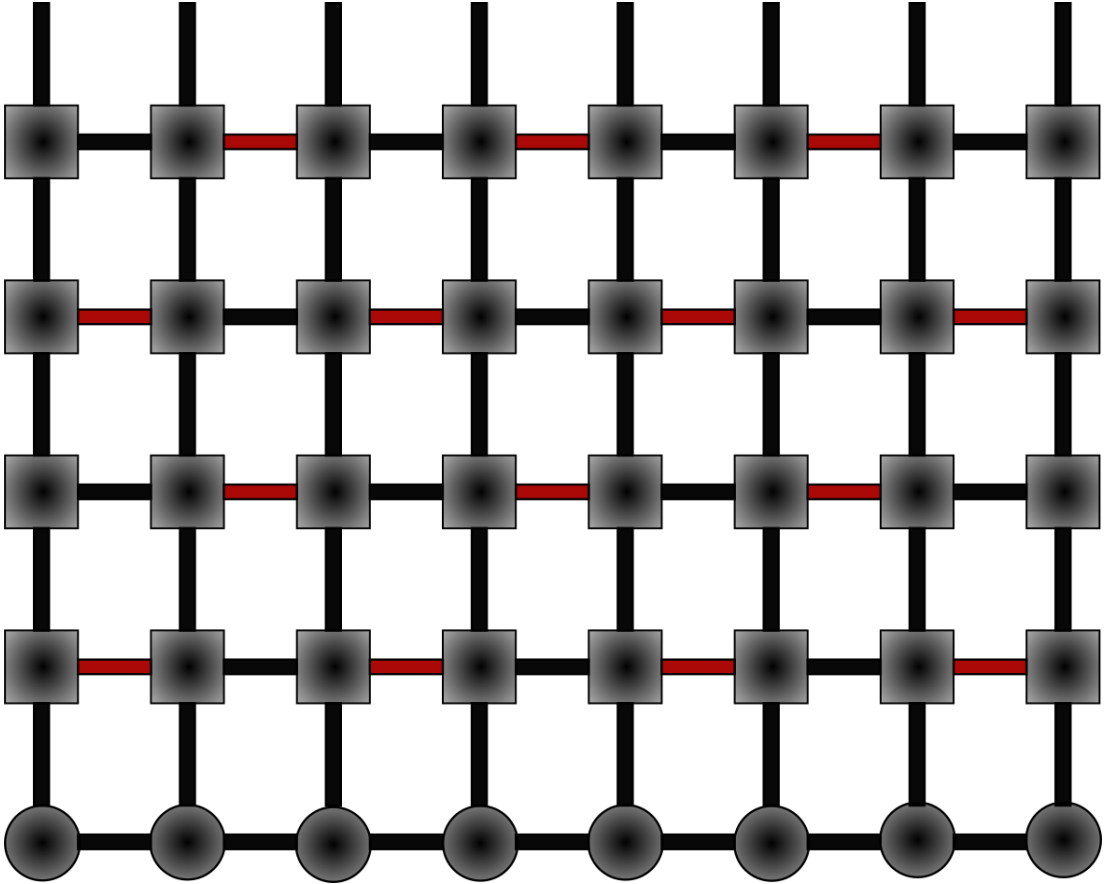


Figura B.1: Representación MPO del operador de evolución temporal trotterizado $e^{-i\hat{H}t}$. Cada segunda línea corresponde a una evolución temporal infinitesimal del enlace impar o enlace par.

Anexo C

Generalización de la cadena de Kitaev a fermiones con spin

Nos interesa ahora generalizar el modelo de la cadena de Kitaev para el caso de fermiones con spin (electrones). El modelo más simple que describe a un **superconductor topológico** (TSC) [12] está formado por dos copias de la cadena de Kitaev con especies de spines opuestos, como puede ser visto en la Fig. C.1 y descrito por el siguiente Hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^L \sum_{\sigma} i\sigma \gamma'_{i,\sigma} \gamma_{i+1,\sigma} \quad (\text{C.1})$$

Los operadores de Majorana satisfacen las relaciones

$$\{\gamma_{i,\sigma}, \gamma'_{i',\sigma'}\} = 0 \quad \{\gamma_{i,\sigma}, \gamma_{i',\sigma'}\} = 2\delta_{ii'}\delta_{\sigma\sigma'} \quad (\text{C.2})$$

y en términos de los operadores fermiónicos

$$c_{i,\uparrow} = \frac{1}{2}(\gamma_{i,\uparrow} + i\gamma'_{i,\uparrow}) \quad c_{i,\downarrow} = \frac{1}{2}(\gamma_{i,\downarrow} - i\gamma'_{i,\downarrow}) \quad (\text{C.3})$$

Podemos reescribir el Hamiltoniano anterior como

$$H = \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma} - c_{i,\sigma}^{\dagger})(c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^{\dagger}) \quad (\text{C.4})$$

A pesar de la simpleza del Hamiltoniano C.4 este describe la física que nos interesa estudiar en este trabajo, conteniendo una fase topológica superconductora (fase TSC) caracterizada por modos cero de Majorana en los bordes de la cadena. La fase topológica es estable ya que la simetría TRI la protege, decimos que el

Hamiltoniano C.4 describe una **fase superconductora topológica protegida por la simetría de inversión temporal** (TRI TSC). Como podemos ver de la Fig. C.1, en cada borde de la cadena tenemos dos modos de Majorana desapareados, es decir, el doble de modos que en la cadena de Kitaev para fermiones sin spin estudiada anteriormente.

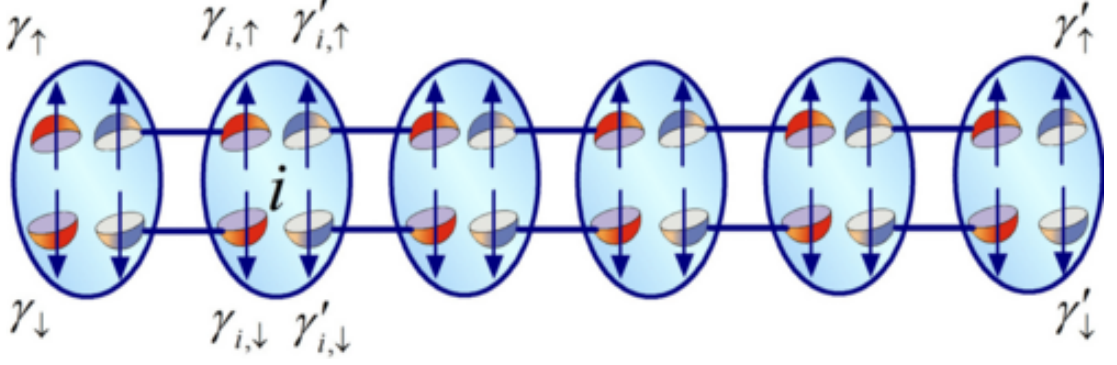


Figura C.1: Superconductor topológico unidimensional construido mediante la copia de dos cadenas de Kitaev con especies de spin opuestas. Notamos que cada sitio físico consiste en cuatro modos de Majorana. Los modos desapareados en los bordes de la cadena se convierten en modos cero protegidos por la simetría de inversión temporal.

Anexo D

Diagramas de fases topológicos complementarios

Presentamos ahora otros diagramas de fases calculados para pairings superconductores s -wave (s_{000}) y para $s_{000} + s_{100}$. Observamos en las Fig. D.1 (a y b) como al combinar el pairing isotrópico s_{000} con el extendido s_{100} la simetría $\mu \rightarrow -\mu$ se rompe. Mientras que si solo tenemos pairing isotrópico s_{000} la fase TRITOP (TRI TSC) no se presenta en el diagrama de fases, como se muestra en las Fig. D.1 (c y d).

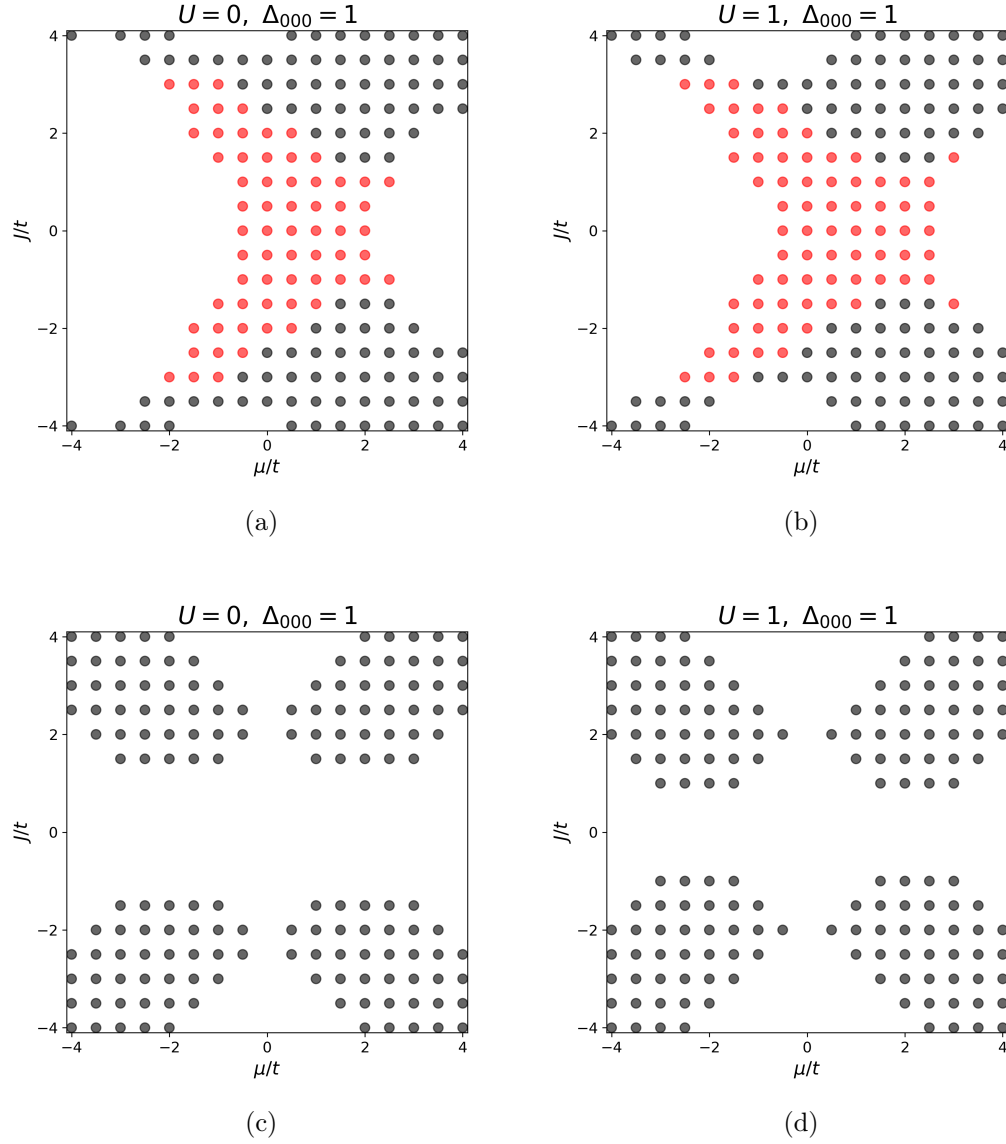


Figura D.1: Diagramas de fases obtenido mediante DMRG calculando la degeneración del espectro de entrelazamiento. Los puntos de color rojo ($\text{deg}=4$) representan a la fase TRITOP, el color negro ($\text{deg}=2$) a la fase SC topológico y el color blanco ($\text{deg}=1$) a la fase trivial. Para estos cálculos se tomaron como parámetros del DMRG $D_{\max} = 50$, $\text{etol} = 10^{-6}$ para una red de $L = 400$ sitios con $t = 1$, $\alpha = 0.8$, pairing onsite $\Delta_{100} = 1$ y $\Delta = 1.2$ (Fig. a y b) o $\Delta = 0$ (Fig. c y d). Para los casos con $U \neq 0$ el potencial químico fue renormalizado como $\mu \rightarrow \mu - U/2$