



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGIA

ESTUDIO DE ENTRELAZAMIENTO Y DISCORDIA CUÁNTICA EN EL MODELO DE AISLANTE TOPOLÓGICO DE KITAEV CON PAREDES INFINITAS EN LA FRONTERA.

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
JOSÉ LUIS MEZA CABAÑAS

TUTOR PRINCIPAL:
DR. FERNANDO ROJAS ÍÑIGUEZ
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTOR:
DR. ERNESTO COTA ARAIZA
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTOR:
DR. JOSÉ IGNACIO JIMÉNEZ MIER Y TERÁN
FACULTAD DE CIENCIAS

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., JUNIO 2023



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A mi Familia.

Agradecimientos

El proceso de este trabajo ha sido arduo, cansado, con momentos alegres y a veces de incertidumbre, pero sobre todo se ha sentido demasiado largo. Por esta razón es que quiero ser lo más conciso posible. Primero agradecer a mi asesor el Dr. Fernando Rojas, quien con mucha pasión y calidad humana me ha acompañado en esta travesía. Por todas las enseñanzas en la física y en la vida, le agradezco mucho. Pese a todas las trabas que se antepusieron, quiero agradecerle también por inspirarme a hacer física, gracias por contagiarme con su pasión y dedicación. Gracias por su perseverancia y paciencia, gracias por no perder la fe en que terminaríamos lo que comenzamos. Al Dr. José Ignacio Jiménez y el Dr. Ernesto Cota por ser parte de mi comité tutor y apoyarme en todo el proceso.

Quiero agradecerle a mi familia por su puesto, pues son la gran fortaleza que me ha seguido impulsando incluso en los momentos más difíciles. A mi madre Rosario, por siempre creer en mi, a mi padre José Luis, por darme siempre las palabras de aliento en el momento preciso y a mi hermano Isaac, por acompañarme en los ratos más caprichosos.

Agradecerle a Valeria, quien a través de su infinita sabiduría ayudó a construir en mi alguien con más temple, alguien con más profundidad y entereza. Has sido parte fundamental en lograr concluir este proceso, gracias.

Mi segunda familia, mi hermana del alma Arodi, cómplice y confidente. No me alcanzan las palabras para agradecer todo el apoyo que me has brindado, ya sea de manera altruista o por cariño, Suri, gracias. Mi mejor amiga Daniela, gracias por tu compañía, que sin ti no habría encontrado lugares en donde escribir este trabajo, sin mencionar la ayuda que me fue jugar con Oni e Inko en los ratos más lúgubres. Gracias por creer en mi.

Quisiera también agradecer a mi mejor amigo Emiliano, por prestarme siempre un hombro donde recargarme y su valiosa atenta escucha. Las noches de aventuras y de recordar otras cuantas. A mi amigo Víctor, por siempre mostrarme que las pasiones son el motor de la vida, nada ni nadie puede quitarte la voluntad. A mi amiga Isabel, porque sin ti perdería la cabeza y no recordaría nunca llegar a las cosas importantes, por todo tu apoyo y tu amistad. A mi amiga Araceli, pues pese a tanto tiempo aún me regalas tu amistad, espero conservarla por mucho tiempo más.

Quedan muchos otros nombres que mencionar, fantasmas incluso, también otros que olvido, pero a esas personas que de alguna u otra manera ayudaron a concretar este trabajo, se los agradezco.

Resumen

Esta tesis comienza con una introducción a las motivaciones del estudio de los aislantes topológicos como herramientas para el cómputo cuántico y a su vez de como la teoría de información y metrología cuántica son áreas activas en el estudio de sistemas cuánticos, tratando de caracterizarlos a través de sus correlaciones. Estudiando la no clasicidad de los sistemas y la no separabilidad de los mismos, es decir el entrelazamiento cuántico. Más aún, se expone como la cantidad de información cuántica en el sistema puede venir no solo del entrelazamiento y con ayuda de la información cuántica de Fisher, que es una medida de tipo discordia, nos permite acceder a esa cantidad de información mas allá del entrelazamiento.

Se expone un marco teórico discutiendo las fases topológicas donde se revisa la Fase de Berry y el *Winding Number*, así como las definiciones del Número de Schmidt que cuantifica el entrelazamiento de un sistema y de la Información Cuántica de Fisher. Se introduce la teoría de Respuesta Lineal, construyendo la susceptibilidad generalizada que nos permite observar la respuesta de un sistema cuántico al ejercer una perturbación.

Luego se exponen los principales modelos de aislantes topológicos: el modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH), Su-Schrieffer-Heeger-Extendido (SSH-E) y el modelo de Kitaev. Se demuestra en este trabajo la equivalencia de estos dos últimos modelos, el de SSH-E y el de Kitaev. En las siguientes secciones se calcula el *Winding Number* de los modelos SSH-E y de Kitaev, se describe su estructura de bandas y su topología.

En el capítulo siguiente se plantea el modelo de Kitaev con condiciones de frontera de paredes infinitas (cdpi), se estudia el Hamiltoniano en el espacio de momento y se procede a encontrar sus eigenfunciones. Debido a las condiciones de frontera se encuentra una ecuación trascendental que restringe los valores del número de onda. Se encontraron expresiones analíticas para el número de Schmidt del modelo de Kitaev cdpi como función de la fase y el tamaño del sistema. También se hallaron expresiones analíticas para el tensor de susceptibilidad lineal a partir de los elementos de matriz de los operadores de Pauli en la eigenbase del sistema. Este tensor es la susceptibilidad pseudoespín-pseudoespín de cada sitio del modelo.

Se generalizó el resultado de Philipp Hauke, et.al [1] donde utilizan un indicador de información tipo Fisher, sin embargo, en este trabajo de tesis se generalizó encontrando un cuantificador de información tipo Fisher, caracterizando cuantitativamente la discordia, a diferencia del trabajo en la literatura que solo es una caracterización cualitativa.

Por último se halla una relación explícita entre el tensor de susceptibilidad lineal y el cuantificador tipo Fisher, esto lo que permite es la medición de la discordia a través de la susceptibilidad que en el ámbito experimental es algo que se puede medir. Dando así una herramienta para la cuantificación de información no clásica en sistemas cuánticos. En el antepenúltimo capítulo se exponen todos los resultados gráficamente, esto haciendo uso de las expresiones analíticas encontradas y de cálculo numérico realizado en Python. Por último, se presentan las conclusiones y trabajo a futuro de la investigación realizada.

Índice general

1. Introducción	11
1.1. Motivación y Antecedentes	11
2. Marco Teórico	13
2.1. Fases topológicas y Correlaciones Cuánticas	13
2.1.1. Fase de Berry y número de Winding	13
2.1.2. Número de Schmidt	16
2.1.3. Teoría de respuesta lineal	18
2.1.4. Información de Fisher y Discordia Cuántica	21
2.2. Aislantes topológicos	23
2.2.1. Simetría inversión temporal	23
2.2.2. Simetría Quiral	24
2.2.3. Simetría hueco-partícula	25
2.2.4. Modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH)	26
2.2.5. SSH Bulto	26
2.2.6. Estados de borde del modelo SSH	27
2.2.7. Evolución de estados de borde	29
2.2.8. Densidad de estados	29
2.3. Modelos topológicos mas allá del SSH	31
2.3.1. Modelo de Kitaev	31
2.3.2. Modelo Su-Schrieffer-Heeger Extendido (SSH-E)	32
2.4. Equivalencia del Modelo de Kitaev con SSH-E	33
2.5. Fases topológicas del modelo de Kitaev y SSH-Extendido	34
2.5.1. Fases topológicas del modelo de Kitaev	34
2.5.2. Fases topológicas del modelo SSH-Extendido	36
3. Modelación	39
3.1. Modelo de Aislante Topológico de Kitaev con Condiciones de Frontera de Paredes Infinitas.	39
3.1.1. Transiciones permitidas	40
3.2. Número de Schmidt	41
3.3. Densidad de estados	44
3.4. Susceptibilidad y Discordia cuántica tipo Fisher	48
3.4.1. Susceptibilidad	48
3.5. Cuantificador tipo Fisher, Discordia Cuántica y su relación con la Susceptibilidad	51
4. Resultados	53
4.1. Energía, estructura de bandas	53
4.2. Número de Schmidt	53
4.3. Susceptibilidad lineal	57
4.4. Discordia tipo Fisher	58
5. Conclusiones y Trabajo a Futuro	65
A. Identidades trigonométricas	67

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación y Antecedentes

Las tecnologías cuánticas son el hito contemporáneo en cuanto a investigación científica se refiere. Sus inmensas aplicaciones y consecuencias, son actualmente protagonistas de una de las carreras tecnológicas más impresionantes. Empresas transnacionales, así como gobiernos de todo el mundo están comprometidas al desarrollo en conjunto de esas nuevas tecnologías [2, 3, 4].

La promesa de estas tecnologías es ser la siguiente revolución tecnológica, es por esto que los esfuerzos para avanzar en este terreno son visibles en todos los extractos de la comunidad científica y de la industria. Las vertientes que se desprenden de esta revolución van desde la investigación en ciencia básica que buscan desentrañar los misterios más fundamentales de la mecánica cuántica (e.g. el entrelazamiento cuántico) hasta los esfuerzos para aplicar los conocimientos adquiridos en el terreno de la computación. En las últimas décadas hemos sido testigos del cambio tan radical que el uso de la computación ha provocado en la sociedad actual, la computación cuántica es la puerta a una revolución equivalente. Entre los diversos sistemas utilizados para la creación de una computadora cuántica, los más significativos se encuentran en sistemas de átomos fríos, óptica cuántica y estado sólido. Este último será nuestro principal objeto de estudio, pues aquí yacen los aislantes topológicos.

En el contexto del estado sólido, los modos cero de Majorana pueden almacenar información cuántica no localmente, así como estar protegidos de ruido, es por estas razones que son propuestos como los bloques fundamentales para el cómputo cuántico topológico [5, 6]. Su caracterización se realiza desde un punto de vista geométrico en el contexto de la topología. El conocer sus fases topológicas nos sirve como herramienta para caracterizarles, además de que la manipulación de estas fases es la herramienta para realizar cómputo. Cabe mencionar que este tipo de ideas han sido estudiadas también para cualquier sistema fermiónico que albergue estados con energía cero [7]. Las fases topológicas más comúnmente utilizadas son la fase de Berry y el número de Winding (*Winding number*) [8]. Sin embargo, una generalización para sistemas mixtos térmicos se encuentran la fase de Uhlman [9] y de Zak [10]. La fase topológica es una manifestación global de las interacciones en el sistema cuántico que no provienen de ningún contexto clásico, son inherentes a que el sistema sea cuántico.

Por otro lado, la caracterización de correlaciones cuánticas de los sistemas es un nicho de investigación en la teoría de información y metrología. En sistemas cuánticos se ha estudiado el entrelazamiento, las correlaciones clásicas y las correlaciones cuánticas. Para el entrelazamiento se tiene al número de Schmidt como una medida de la no separabilidad del sistema [11]. Para las correlaciones clásicas, tenemos la información mutua y la entropía [12]. Ahora bien, para las correlaciones cuánticas recientemente se ha utilizado la discordia, propuesta por Olliver y Zurek [13] y Henderson y Vedral [14] para estudiar las correlaciones más allá del entrelazamiento. Permiten medir las correlaciones que provienen de un sistema cuántico totalmente separable [15]. Se ha propuesto el uso de la información de sesgo (Skew Information) y la Incertidumbre Cuántica Local (Local Quantum Information- LQU) [16]. Estas son utilizadas en sistemas bipartitos de la forma $\mathcal{C}^2 \times \mathcal{C}^d$, en este tipo de sistemas se ha utilizado también la Información Local Cuántica de Fisher (LQFI) para sistemas de espines termalizados [17]. Tanto la LQU como la información

de Fisher están íntimamente relacionadas en su uso para la estimación de parámetros de los sistemas cuánticos.

Los aislantes topológicos son los protagonistas en la línea de la computación cuántica topológica. El modelo básico para estudiar los aislantes topológicos es el modelo de Su-Schrieffer-Heeger [8], este presenta tanto fases topológicas como estados entrelazados y correlaciones cuánticas. Sin embargo para poder ir más allá y encontrar estados que permitan el cómputo cuántico como lo son los estados de Majorana necesitamos estudiar uno más general.

En este trabajo estudiamos las fases topológicas y las correlaciones tipo discordia de un modelo de aislante topológico superconductor, estudiamos el Modelo de Kitaev en una dimensión, también conocido como cadena de Kitaev [18]. Este se estudia en el esquema de una sola partícula, es decir con un solo electrón en el sistema. Además, buscamos estudiar el sistema más realista al constreñirlo con paredes infinitas a la frontera y considerarlo termalizado. Nos interesa observar tanto las fases topológicas como las correlaciones cuánticas del sistema y su relación. Esto nos ayudará a entender de mejor manera a estas dos propiedades que parecen ajenas pero que surgen de las interacciones de los sistemas cuánticos.

La tesis consta de cinco capítulos que se describen brevemente a continuación:

- Capítulo 1: Contiene una breve introducción y motivación para estudiar las fases topológicas presentes en los aislantes topológicos desde el paradigma del cómputo cuántico, así como la construcción de indicadores o cuantificadores de la cantidad de información no clásica de un sistema. Contiene un breve resumen de cada uno de los capítulos en la tesis.
- Capítulo 2: En este capítulo se revisan los conceptos de Fase de Berry, número de Winding, número de Schmidt, teoría de respuesta lineal y la información de Fisher. Se revisa el concepto de aislante topológico, así como las simetrías que poseen estos sistemas. Simetría de inversión temporal, Simetría Quiral y la Simetría hueco-partícula. Se recapitula el modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) y se describen sus funciones de onda, su espectro de energías y sus fases topológicas. También se hace una descripción del modelo de Kitaev y el modelo de Su-Schrieffer-Heeger-Extendido (SSH-E). El capítulo termina exponiendo las fases topológicas del modelo de Kitaev y del SSH-E, así como la equivalencia de estos dos modelos.
- Capítulo 3: Se plantea el problema del modelo de Kitaev con condiciones a la frontera con paredes infinitas, se encuentran sus eigenestados y sus eigenenergías. También se estudian las transiciones permitidas en el sistema. Para el modelo de Kitaev con condiciones a la frontera se muestra el cálculo para el número de Schmidt de forma analítica, encontrando una relación entre el tamaño del sistema y la fase del mismo. Se calcula el tensor de susceptibilidad en el régimen de teoría de respuesta lineal y se construye un cuantificador tipo Fisher para el sistema que nos brinda información de la cantidad de información no clásica del sistema. Se estudia la densidad de estados del sistema. El capítulo termina exponiendo la relación explícita y analítica que se tiene entre el tensor de susceptibilidad lineal con el cuantificador tipo Fisher, generalizando investigación en la literatura.
- Capítulo 4: En este capítulo se exponen los resultados del análisis numérico de los cálculos analíticos del capítulo anterior. Se muestran gráficas del cambio en función de los parámetros del sistema de el número de Schmidt, la susceptibilidad magnética y la del cuantificador tipo Fisher para el sistema térmico.
- Capítulo 5: Contiene las conclusiones y el trabajo a futuro de la investigación realizada en esta tesis.

Capítulo 2

Marco Teórico

2.1. Fases topológicas y Correlaciones Cuánticas

2.1.1. Fase de Berry y número de Winding

La geometría es el estudio de invariantes o propiedades que se conservan al realizarse isometrías, es decir, transformaciones que preservan distancias y ángulos. Por ejemplo, sabemos que si tenemos un triángulo isósceles este permanecerá siendo un triángulo isósceles a pesar de escalarlo o rotarlo. Por otro lado, la topología estudia invariantes que surgen de transformaciones más generales, de transformaciones continuas. Es por esto que la topología en tiempos recientes se ha convertido en una de las herramientas más recurridas en la descripción de sistemas cuánticos ya que su generalidad permite su uso en sistemas tan abstractos como lo son los de la mecánica cuántica. Hemos discutido como podemos modificar los Hamiltonianos al ser dependientes de un conjunto de parámetros. Así es como observamos las simetrías que poseen o no estos. A través de modificar los parámetros podemos realizar las transformaciones. Gracias a esto se han encontrado invariantes topológicas que se preservan en el sistema y solo cambian al haber una transición de fase.

Fase de Berry

A nosotros nos interesa estudiar la geometría del espacio de Hilbert, mejor dicho su topología. Pues es este espacio donde se encuentran nuestros Hamiltonianos. Consideremos un conjunto de parámetros que varían en el tiempo $\vec{R} = (R_1, R_2, \dots, R_D)$, tenemos entonces que nuestro Hamiltoniano lo podemos parametrizar a partir de ellos [8]

$$H(t) = H(\vec{R}(t)), \quad (2.1)$$

donde D es la dimensión del espacio de parámetros, diferente a la dimensión de nuestro sistema físico, es decir que \vec{R} se puede ver como un punto en el espacio de parámetros. Entonces para cada conjunto de parámetros tenemos un conjunto de eigenestados ortonormales:

$$H(\vec{R}) \left| n(\vec{R}) \right\rangle = E_n(\vec{R}) \left| n(\vec{R}) \right\rangle, \quad (2.2)$$

por el teorema adiabático podemos hacer evolucionar el sistema lo suficientemente lento para que el estado inicial del sistema

$$\left| \Psi_n(t=0) \right\rangle = \left| n(\vec{R}(t=0)) \right\rangle \quad (2.3)$$

siga siendo el mismo y que no haya saltos en el sistema. Sin embargo, al ocurrir una evolución, para que esta tenga sentido en el marco teórico de la mecánica cuántica, esta debe ser una evolución o transformación unitaria. Es decir que a lo más que pudo haber cambiado el sistema, es haber obtenido una fase

$$\left| \Psi_n(t) \right\rangle = C_n(t) \left| n(\vec{R}(t)) \right\rangle, \quad (2.4)$$

si el Hamiltoniano es independiente del tiempo esa fase sería:

$$C_n = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E_n(t)\right\}, \quad (2.5)$$

si el Hamiltoniano es dependiente del tiempo, entonces la fase se generaliza como:

$$C_n = \exp\{i\gamma_n(t)\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')\right\}. \quad (2.6)$$

Pongamos esto en la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(\vec{R}(t)) |\Psi_n(t)\rangle, \quad (2.7)$$

si realizamos el producto interno con $\langle \Psi_n(t) |$, obtenemos que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \gamma_n(t) = i \left\langle n(\vec{R}(t)) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n(\vec{R}(t)) \right\rangle, \quad (2.8)$$

con

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t dt' \left\langle n(\vec{R}(t')) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n(\vec{R}(t')) \right\rangle. \quad (2.9)$$

Si hacemos un cambio de variable, pues $\vec{R}(t)$ es dependiente del tiempo, podemos hacer esta integral a través de la curva C que se dibuja en el espacio paramétrico, es decir:

$$\gamma_n(t) = \int_C \vec{A}^n(\vec{R}) \cdot d\vec{R},$$

donde

$$\vec{A}^n(\vec{R}) = i \left\langle n(\vec{R}) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \right| n(\vec{R}) \right\rangle \quad (2.10)$$

y a \vec{A}^n se le conoce como la conexión de Berry. Hay que notar que $\vec{A}^n(\vec{R})$ es dependiente de norma, es decir que nosotros podemos escoger una fase arbitraria para los eigenestados del sistema

$$\left| n(\vec{R}) \right\rangle \rightarrow e^{i\zeta(\vec{R})} \left| n(\vec{R}) \right\rangle, \quad (2.11)$$

entonces tendríamos que

$$A^n(\vec{R}) \rightarrow A^n(\vec{R}) - \partial_{\vec{R}} \zeta(\vec{R}), \quad (2.12)$$

lo que en consecuencia resultaría que la fase se transforme en:

$$\gamma_n \rightarrow \gamma_n + \zeta(\vec{R}(t=0)) - \zeta(\vec{R}(t_{final})). \quad (2.13)$$

Entonces la fase dependería de la norma arbitraria que escogimos, eso significa que esta no tiene significado físico. Pero fue en 1984 que Berry hizo una observación brillante, si la trayectoria es cerrada es decir $\vec{R}(t=0) = \vec{R}(t_{final})$, esto provoca que la dependencia con la norma desaparezca. Por lo tanto una evolución en una trayectoria cerrada tendría significado físico,

$$\gamma_n = \oint A^n(\vec{R}) \cdot d\vec{R}. \quad (2.14)$$

A esta integral se le conoce como la Fase de Berry [19]. Al hacer la analogía con electromagnetismo, podemos notar que $A^n(\vec{R})$ se puede ver como un vector potencial, entonces debe haber un campo que origina este vector potencial. A este campo se le conoce como la curvatura de Berry.

$$w_{\mu\nu}^n(\vec{R}) = \delta_{R_\mu} A_\nu^n(\vec{R}) - \delta_{R_\nu} A_\mu^n(\vec{R}), \quad (2.15)$$

este es un tensor antisimétrico de rango 2, en el espacio de parámetros. Podemos utilizar el teorema de Stokes para pasar de una integral de línea a una de superficie, donde la trayectoria que se recorre en el espacio de parámetros será la frontera de la superficie. Por lo tanto:

$$\gamma_n = \oint_{\delta S} \vec{A}^n(\vec{R}) \cdot d\vec{R} = \frac{1}{2} \int_S dR_\mu \wedge dR_\nu w_{\mu\nu}^n(\vec{R}), \quad (2.16)$$

pero siguiendo con la analogía al electromagnetismo, también podemos escribir ese campo 'magnético' como el rotacional del vector potencial, es decir:

$$\vec{b}^n = \nabla_{\vec{R}} \times \vec{A}^n = i \left\langle \nabla_{Rn}(\vec{R}) \right| \times \left| \nabla_{Rn}(\vec{R}) \right\rangle, \quad (2.17)$$

por lo tanto tenemos lo que se le conoce como el flujo de Berry:

$$\gamma_n = \int_S \vec{b}^n \cdot dS. \quad (2.18)$$

Ahora apliquemos estas definiciones a un sistema de dos niveles genérico. Para un sistema de dos niveles, podemos escribir el Hamiltoniano como $H = \vec{d} \cdot \vec{\sigma}$. Si cambiamos a coordenadas cilíndricas tenemos que:

$$h = (h_x, h_y, h_z) = h(\sin(\theta) \cos(\phi), \sin(\theta) \sin(\phi), \cos(\theta)), \quad (2.19)$$

entonces los eigenestados de H estarán dados por:

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\phi} \\ -\cos(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}, \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) e^{-i\phi} \\ \sin(\frac{\theta}{2}) \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Podemos calcular la conexión y la curvatura de Berry para el estado $|-\rangle$:

$$A_\theta = \langle - | i\partial_\theta | - \rangle = 0 \quad (2.21)$$

$$A_\phi = \langle - | i\partial_\phi | - \rangle = \sin^2(\theta/2) \quad (2.22)$$

$$w_{\theta\phi} = \partial_\theta A_\phi - \partial_\phi A_\theta = \frac{1}{2} \sin(\theta). \quad (2.23)$$

Por tanto la fase de Berry será:

$$\gamma = \int w_{\theta\phi} d\theta d\phi = \frac{1}{2} \int \sin(\theta) d\theta d\phi = \frac{1}{2} \Omega_S. \quad (2.24)$$

Esto nos dice que la fase de Berry será el ángulo sólido que encierre la curva en la superficie. Como observación, si esta superficie estuviera restringida al plano $X - Y$, dependería totalmente del ángulo θ . Por ejemplo, si la curva fuera el círculo unitario, la fase de Berry, dividida entre π , contaría el número de vueltas que se le da al origen. Esto es el *Winding Number* que discutiremos a continuación.

Winding Number

Recordemos que para un sistema de dos niveles, en el espacio de momentos tenemos la descomposición: $H(k) = \vec{d} \cdot \vec{\sigma}$ [8].

Nosotros podemos entonces aplicar como operador de simetría quiral a σ_z , y recordando que $\sigma_z = \sigma_z^\dagger$ esto es:

$$\sigma_z H \sigma_z = d_x \sigma_z \sigma_x \sigma_z + d_y \sigma_z \sigma_y \sigma_z + d_z \sigma_z \sigma_z \sigma_z. \quad (2.25)$$

Utilizando las propiedades de las matrices de Pauli $\sigma_i^2 = 1$ y $\{\sigma_i, \sigma_j\}_+ = 2\delta_{ij}$, tenemos que:

$$\sigma_z H \sigma_z = -d_x \sigma_x - d_y \sigma_y + d_z \sigma_z, \quad (2.26)$$

entonces:

$$\sigma_z H \sigma_z = -H \iff d_z = 0. \quad (2.27)$$

Esto tiene una implicación muy importante, ya que si el sistema posee simetría quiral será simplificado a vivir en el plano $d_x - d_y$. Esto también se ve manifestado en la forma fuera de la diagonal de la representación matricial del sistema

$$H = \begin{pmatrix} 0 & d_x - id_y \\ d_x + id_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

En sistemas como estos, entonces se puede definir una invariante topológica ν llamada *Winding Number* [8]. Esta se define como:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\hat{d}(k) \times \frac{d}{dk} \hat{d}(k) \right)_z dk \quad (2.29)$$

con $\hat{d}(k) = \frac{\vec{d}}{|\vec{d}|}$. Esto también se puede escribir en términos del logaritmo complejo como:

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \log(h(k)). \quad (2.30)$$

El *Winding Number* intuitivamente se puede entender como el número de veces que le da vuelta al origen la trayectoria que dibuja $\vec{d}(k)$ en el espacio perimétrico. Es por esto que para un sistema de dos niveles con simetría quiral, el *Winding number* y la fase de Berry son equivalentes salvo por un factor de π .

2.1.2. Número de Schmidt

Uno de los fenómenos mas intrincados de la naturaleza, es el entrelazamiento el cuál se hizo presente al estudiar la mecánica cuántica. Este surge de la no separabilidad de los sistemas. Saber si un sistema es separable o no, es una pregunta que ha dado lugar a un campo muy fructífero de investigación. Desde el punto de vista algebraico, hasta el punto de vista geométrico ha sido visitado para entender este problema [12].

Para un sistema bipartito $H = H_A \otimes H_B$ con eigenestados Ψ_{AB} se dice que es separable si se puede escribir de la forma:

$$|\Psi_{AB}\rangle = |\Psi_A\rangle |\Psi_B\rangle \quad (2.31)$$

Tomemos por ejemplo un sistema de dos qubits:

$$|\Psi_A\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad |\Psi_B\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle. \quad (2.32)$$

Entonces si hacemos el producto tendremos un estado

$$|\Psi_A\rangle |\Psi_B\rangle = |\Psi_{AB}\rangle = \alpha^2 |0,0\rangle + \alpha\beta |0,1\rangle + \beta\alpha |1,0\rangle + \beta^2 |1,1\rangle. \quad (2.33)$$

El estado $|\Psi_{AB}\rangle$ es separable pues lo podemos escribir de la forma (2.31), pero si escogemos un estado como:

$$|\Psi_{AB}\rangle = \alpha^2 |0,0\rangle + \beta^2 |1,1\rangle, \quad (2.34)$$

si quisiéramos llevarlo a una forma separable tendríamos que escoger $\alpha = 0$ o $\beta = 0$. Pero en principio los escogimos distintos de cero. Lo que nos dice que no podemos escribirlo de forma separable, el estado (2.34) es un estado entrelazado.

Una herramienta que se puede utilizar para caracterizar el grado de entrelazamiento, es decir si un estado es separable o no, es el denominado número de Schmidt. Para entenderlo primero hablemos de la descomposición de Schmidt.

Descomposición de Schmidt

Sea un sistema bipartito con $H = H_A \otimes H_B$. Con dimensiones $\dim(H_A) = a$ y $\dim(H_B) = b$. Con $|\Psi_{AB}\rangle$ una estado puro del sistema, tal que la matriz de densidad del estado es $\rho = |\Psi_{AB}\rangle \langle \Psi_{AB}|$. Así como la matrices de densidad reducidas son $\rho_A = \text{tr}_B(\rho)$ y $\rho_B = \text{tr}_A(\rho)$. Entonces:

- El estado $|\Psi_{AB}\rangle$ se puede escribir como una descomposición de Schmidt

$$|\Psi_{AB}\rangle = \sum_{n=1}^k \sqrt{p_n} |w_n, v_n\rangle$$

con $p_n > 0$ donde $k = \min(a, b)$. Aquí v_n y w_n son los eigenestados de ρ_A y ρ_B respectivamente. Y están unívocamente determinados.

- De lo anterior se concluye que ρ_A y ρ_B comparten los mismos eigenvalores p_n .

Que exista esta descomposición nos permite escribir de manera separable cualquier sistema, por ello el entrelazamiento del sistema esta embebido en los coeficientes p_n , llamados coeficientes de Schmidt. Así como $k = \min(a, b)$ se le conoce como el rango de Schmidt¹, ya que nos dice cuantos coeficientes p_n son distintos de cero. Si el rango de Schmidt es igual a 1, decimos entonces que el sistema se puede escribir de la forma (2.31) y es entonces separable. Si el rango de Schmidt es distinto de 1 el estado tiene entrelazamiento. Esto es análogo a decir que $\text{tr}(\rho_A^2) = \text{tr}(\rho_B^2) = 1$.

Definimos entonces el número de Schmidt K como:

$$K = \frac{1}{\sum_n^k p_n^2} = \frac{1}{\text{tr}(\rho_{A/B}^2)}. \quad (2.35)$$

Este es un indicador de entrelazamiento que fue propuesto por Grobe et. al y es utilizado con frecuencia como medición de entrelazamiento en sistemas de muchas partículas [20, 21, 22]. Para $K = 1$ nos dice que el sistema es completamente separable, mientras mayor sea el número de Schmidt, mayor será el entrelazamiento. Veamos el caso para un sistema de dos niveles. Para cualquier sistema de dos dimensiones podemos descomponerlo en los generadores del espacio $SU(2)$, nos referimos a las matrices de Pauli, es decir para cualesquiera matriz de densidad de dos dimensiones se puede escribir como:

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathcal{I} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}), \quad (2.36)$$

dónde \vec{r} es el vector de Bloch que se define como $r_i = \text{tr}(\sigma_i \rho)$, es decir que cada entrada del vector de Bloch es el valor esperado de las matrices de Pauli. Luego si elevamos al cuadrado la matriz de densidad, tendremos que:

$$\rho^2 = \frac{1}{4}(\mathcal{I} + 2\vec{r} \cdot \vec{\sigma} + (\vec{r} \cdot \vec{\sigma})^2). \quad (2.37)$$

Si calculamos la traza al cuadrado de la matriz de densidad y sabiendo que las matrices de Pauli cumplen que $\text{tr}(\sigma_i) = 0$, $\text{tr}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}$ y que $\sigma_i^2 = \mathcal{I}$ para $i, j = x, y, z$, tendremos

$$\text{tr}(\rho^2) = \frac{1}{4}(\text{tr}(\mathcal{I}) + \text{tr}(2(r_x \sigma_x + r_y \sigma_y + r_z \sigma_z)) + \text{tr}(\sum_{i,j} r_i r_j \sigma_i \sigma_j)), \quad (2.38)$$

como r_i es un número real, el segundo termino de la ecuación anterior es cero, en el tercer miembro de la ecuación solo sobreviven los términos cuadráticos, por lo tanto:

$$\text{tr}(\rho^2) = \frac{1}{2}(1 + |\vec{r}|^2). \quad (2.39)$$

Entonces la traza del cuadrado de la matriz de densidad nos queda en términos de la magnitud del vector de Bloch. Si sustituimos esto en la definición del número de Schmidt (2.35) tenemos que:

$$K = \frac{2}{1 + |\vec{r}|^2}. \quad (2.40)$$

Esto nos permite visualizar propiedades del sistema dado el vector de Bloch. Por ejemplo, si el vector de Bloch del estado tiene magnitud 1, el número de Schmidt valdrá 1, por lo tanto será separable. Mientras que la magnitud del vector de Bloch es 0, el sistema tendrá número de Schmidt 2, que es el valor máximo que puede alcanzar, pues \vec{r} esta normalizado. Esto nos dice que en la representación de la esfera de Bloch, los estados separables viven en la superficie de la esfera, mientras que los estados máximamente entrelazados se encontrarán en el origen y todos los demás estados posibles no separables vivirán dentro de la esfera. En general para estados puros el máximo de entrelazamiento, es decir el máximo del número de Schmidt sera la dimensión del sistema, en este caso la dimensión es 2.

¹En la literatura al rango de Schmidt también se le puede encontrar como el número de Schmidt, sin embargo en esta tesis llamaremos número de Schmidt a lo definido en (2.35).

2.1.3. Teoría de respuesta lineal

La teoría de respuesta lineal nos permite observar la respuesta que tiene un sistema al salir del equilibrio bajo una pequeña perturbación. Esto a través de funciones de correlación que dependen de variables dinámicas [23].

Consideremos un sistema en equilibrio térmico que es perturbado por un campo externo $a(t)$. Esta perturbación será:

$$H_1(t) = -a(t)A, \quad (2.41)$$

donde el campo externo $a(t)$ esta acoplado a una cantidad física conjugada A . Si por ejemplo, $a(t)$ fuera un campo magnético, la cantidad conjugada sería la magnetización.

Estamos interesados en ver la respuesta de cierta cantidad física B , cuyo promedio en el equilibrio es $\langle B \rangle$. Nos preguntamos si sacamos de equilibrio al sistema al aplicar un campo $a(t)$ ¿cómo responderá B ? Es decir queremos saber como:

$$\delta \langle B(t) \rangle_a = \langle B(t) \rangle_a - \langle B \rangle. \quad (2.42)$$

Si suponemos que B esta centrado, es decir que su promedio es cero $\langle B \rangle = 0$, entonces

$$\delta \langle B(t) \rangle_a = \langle B(t) \rangle_a, \quad (2.43)$$

a orden lineal, esto se puede escribir como:

$$\langle B(t) \rangle_a = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\chi}_{BA}(t, t') a(t') dt', \quad (2.44)$$

donde $\tilde{\chi}_{BA}(t, t')$ se le conoce como función de respuesta lineal y es importante notar que solo depende de parámetros y propiedades del sistema sin perturbar. Podemos notar que (2.44) tiene la forma de una convolución. Si escogemos una perturbación con forma de delta tendríamos que $a(t) = a\delta(t)$, por lo tanto:

$$\langle B(t) \rangle_a = a\tilde{\chi}_{BA}(t), \quad (2.45)$$

a la función de respuesta $\tilde{\chi}$ se le conoce como respuesta de impulso o función de green retardada [23].

Podemos calcular la respuesta lineal de una cantidad física conjugada consigo misma, es decir calcular $\tilde{\chi}_{AA}$, denotaremos esta autoconjugación simplemente como $\tilde{\chi}(t)$.

Respuesta Lineal de una perturbación armónica.

Supongamos que la perturbación a una cantidad física A , esta dada por un campo armónico $a(t) = \text{Re}[ae^{-i\omega t}]$ entonces:

$$\langle A(t) \rangle_a = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\chi}(t-t') \text{Re}[ae^{i\omega t'}] dt', \quad (2.46)$$

definimos $\tau = t - t'$, como $\tilde{\chi}(t-t')$ es real y $\tau > 0$ podemos escribir lo anterior como:

$$\langle A(t) \rangle_a = \text{Re}[ae^{-i\omega t} \int_0^{\infty} \tilde{\chi}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau]. \quad (2.47)$$

Esto nos sugiere hablar de transformadas de Fourier y de hecho se define como la Susceptibilidad Generalizada $\chi(\omega)$ como la transformada de Fourier de $\tilde{\chi}(t)$:

$$\chi(\omega) = \int_0^{\infty} \tilde{\chi}(t) e^{i\omega t} dt, \quad (2.48)$$

entonces el resultado es:

$$\langle A(t) \rangle_a = \text{Re}[ae^{-i\omega t} \chi(\omega)], \quad (2.49)$$

si escribimos explícitamente la parte real e imaginaria de $\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$, podemos escribir lo siguiente:

$$\langle A(t) \rangle_a = a[\chi'(\omega) \cos(\omega t) + \chi''(\omega) \sin(\omega t)], \quad (2.50)$$

a $\chi'(\omega) \cos(\omega t)$ representa la respuesta en fase, mientras que $\chi''(\omega) \sin(\omega t)$ representa la respuesta fuera de fase. Notemos que si utilizamos las propiedades de la transformada de Fourier en (2.46) podemos escribirla como:

$$\langle A(\omega) \rangle_a = a(\omega)\chi(\omega), \quad (2.51)$$

donde $a(\omega)$ es la transformada de Fourier de $a(t)$ y $A(\omega)$ lo es de $A(t)$.

La forma en que definimos la susceptibilidad generalizada tiene un fallo, ya que no siempre existirá la transformada de Fourier de la función $\tilde{\chi}(t)$, esta podría divergir. Es por esto que se define como una distribución, esta es el límite de una sucesión de funciones $\chi\omega + i\epsilon$, donde:

$$\chi(\omega + i\epsilon) = \int_0^{\infty} \tilde{\chi}(t)e^{i\omega t}e^{-\epsilon t} dt, \quad (2.52)$$

con $\epsilon > 0$, entonces formalmente:

$$\chi(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \chi(\omega + i\epsilon) \quad (2.53)$$

Teoría de Respuesta Generalizada

Ahora discutamos sobre esta teoría aplicada a sistemas mas generales. Para lograr esto trabajaremos con la herramienta del operador de densidad $\rho(t)$, esta evoluciona con la ecuación de Liouville-von Neumann:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i\mathcal{L}\rho(t), \quad (2.54)$$

donde \mathcal{L} es el operador de Liouville asociado al Hamiltoniano del sistema. Nos gustaría obtener la solución a primer orden de la ecuación anterior ante una perturbación con la condición inicial $\rho(t_0)$.

La evolución del sistema esta regido por $\mathcal{L}h$, este lo podemos escribir en dos partes, la parte no perturbada y la perturbación como sigue:

$$L = L_0 + L_1, \quad (2.55)$$

donde cada parte corresponde al Hamiltoniano escrito como:

$$H = H_0 + H_1, \quad (2.56)$$

donde \mathcal{L}_0 corresponde a H_0 y \mathcal{L}_1 a H_1 . Por otro lado podemos escribir al operador de densidad como la parte sin perturbación y la parte perturbada:

$$\rho(t) = \rho_0 + \delta\rho(t). \quad (2.57)$$

Entonces utilizando las ecuaciones (2.54) y (2.55) y la forma que acabamos de escribir para $\rho(t)$, obtenemos que:

$$\frac{d\rho_0}{dt} + \frac{d\delta\rho}{dt} = -i(\mathcal{L}_0\rho_0 + \mathcal{L}_0\delta\rho + \mathcal{L}_1\rho_0 + \mathcal{L}_1\delta\rho), \quad (2.58)$$

como la condición inicial es fija $\frac{d\rho_0}{dt}$ y $\mathcal{L}_0\rho_0$ son cero y además el término $\mathcal{L}_1\delta\rho$ sería un término de orden mayor así que lo despreciamos, quedando entonces:

$$\frac{d\delta\rho}{dt} = -i(\mathcal{L}_0\delta\rho + \mathcal{L}_1\rho_0), \quad (2.59)$$

con condición inicial $\delta\rho(t_0) = 0$.

Si suponemos que $\delta\rho(t) = e^{-i\mathcal{L}_0 t}F(t)$, utilizando esto en la ecuación anterior, la evolución para F sería:

$$\frac{dF(t)}{dt} = -ie^{i\mathcal{L}_0 t} \mathcal{L}_1 \rho_0, \quad (2.60)$$

poniendo esto en nuestra suposición de $\delta\rho(t)$ tendríamos que:

$$\delta\rho(t) = -i \int_{t_0}^t e^{-i\mathcal{L}_0(t-t')} \mathcal{L}_1 \rho_0 dt'. \quad (2.61)$$

Ahora vale la pena recordar la definición del operador de Liouville que es:

$$\mathcal{L}\rho = \frac{1}{\hbar} [H, \rho], \quad (2.62)$$

aplicando esto a la ecuación (2.61) tendríamos que:

$$\delta\rho(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{-i\mathcal{L}_0(t-t')} [H_1, \rho_0] dt'. \quad (2.63)$$

Ahora si sabemos que la perturbación tiene la forma $H_1 = -a(t)A$ entonces:

$$\delta\rho(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t a(t') [A^I(t' - t), \rho_0] dt', \quad (2.64)$$

donde A^I es el operador A en el esquema de interacción, es decir $A^I(t) = e^{\mathcal{L}_0 t} A = e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar}$. Para que esto tenga sentido tomamos el límite cuando $t_0 \rightarrow -\infty$. Concluyendo que:

$$\delta\rho(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') [A^I(t' - t), \rho_0] dt'. \quad (2.65)$$

Nos sigue interesando la perturbación H_1 y su efecto en un operador B , precisamente en la evolución temporal del promedio fuera del equilibrio, esto es $\langle B(t) \rangle_a$. Esto en el esquema del operador de densidad se escribe como:

$$\langle B(t) \rangle_a = Tr(\rho(t)B), \quad (2.66)$$

si $\rho = \rho_0 + \rho_1$ y suponemos que $\langle B \rangle = Tr(\rho_0 B) = 0$ por simplicidad, entonces:

$$\langle B(t) \rangle_a = Tr(\delta\rho(t)B), \quad (2.67)$$

usando (2.65) llegamos a que:

$$\langle B(t) \rangle_a = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') Tr([A^I(t' - t), \rho_0]B) dt', \quad (2.68)$$

usando la invarianza de la traza ante permutaciones cíclicas de los operadores, podemos escribir esto como:

$$\langle B(t) \rangle_a = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') Tr([B, A^I(t' - t)]\rho_0) dt', \quad (2.69)$$

esto a su vez aprovechando una vez mas la invarianza de la traza y la definición de valor esperado se puede escribir como:

$$\langle B(t) \rangle_a = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') \langle [B^I(t' - t), A] \rangle dt' \quad (2.70)$$

de aquí podemos identificar que:

$$\tilde{\chi}_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [B(t), A] \rangle, \quad (2.71)$$

donde $\Theta(t)$ es la función de Heaviside, esta ecuación se le conoce como la fórmula de Kubo para $\tilde{\chi}_{BA}$.

Ahora veremos que si tenemos de forma explicita una base de eigenestados para H_0 podemos escribir explícitamente en términos de los elementos de matriz de los operadores. Sea $|\phi\rangle_n$ la base de eigenestados con eigenenergías ϵ_n . Como $[H_0, \rho_0] = 0$, es decir conmutan, comparten

la misma base de eigenestados, entonces al escribir explícitamente el valor esperado en (2.71) tenemos que:

$$\tilde{\chi}_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \sum_n \langle \phi_n | [B(t), A] \rho_0 | \phi_n \rangle. \quad (2.72)$$

Definimos $\Pi_n = \langle \phi_n | \rho_0 | \phi_n \rangle$, que son las poblaciones en equilibrio. Entonces:

$$\tilde{\chi}_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \sum_{n,q} \Pi_n (B_{nq} A_{qn} e^{i\omega_{nq}t} - A_{nq} B_{qn} e^{i\omega_{qn}t}), \quad (2.73)$$

con $\omega_{nq} = \frac{\epsilon_n - \epsilon_q}{\hbar}$, si invertimos los índices en el segundo término entonces podemos escribir lo anterior como:

$$\tilde{\chi}_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \sum_{nq} (\Pi_n - \Pi_q) B_{nq} A_{qn} e^{i\omega_{nq}t} \quad (2.74)$$

Sistema en equilibrio térmico

Si quisiéramos aplicar estas herramientas a un sistema en equilibrio térmico con temperatura T , ahora hablaríamos de ρ_0 siendo el operador de densidad canónico, y para el estado $|\phi_n\rangle$ tenemos que:

$$\Pi_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta \epsilon_n}, \quad (2.75)$$

con $\beta = \frac{1}{k_B T}$ y Z la función de partición canónica

$$Z = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i}. \quad (2.76)$$

Recordemos que la definición de la susceptibilidad generalizada esta dada como la transformada de Fourier de $\tilde{\chi}_{BA}(T)$, entonces aplicando la transformada de Fourier a la ecuación de Kubo (2.71):

$$\langle B(w) \rangle_a = \chi_{BA}(\omega) a(w). \quad (2.77)$$

También recordemos que para tener una definición mas precisa y que siempre este definida la susceptibilidad generalizada tomamos $\chi(\omega + i\varepsilon)$ tendiendo $\varepsilon \rightarrow 0^+$, es decir:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \chi(\omega + i\varepsilon) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty \tilde{\chi}_{BA}(t) e^{i\omega t} e^{-\varepsilon t} dt, \quad (2.78)$$

aplicando esto en (2.74) y realizando las transformada de la exponencial tendríamos que:

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,q} (\Pi_n - \Pi_q) B_{nq} A_{qn} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega_{qn} - \omega - i\varepsilon}. \quad (2.79)$$

Si dejamos un punto fijo en el semiplano superior complejo, podemos hacer la transformada de Fourier-Laplace $\chi_{BA}(z)$, entonces tendríamos que:

$$\chi_{BA}(z) = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,q} (\Pi_n - \Pi_q) B_{nq} A_{qn} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega_{qn} - z} \quad (2.80)$$

2.1.4. Información de Fisher y Discordia Cuántica

La metrología cuántica en nuestro contexto se interesa en el estudio de las propiedades que hacen cuánticos a los sistemas. Para realizar experimentos o pruebas se siguen tres pasos, el primero es preparar un sistema de prueba, este es el estado inicial. Después, se realiza una perturbación o interacción al estado de prueba. Por último, se hace una medición al estado resultante. Es en el primer paso en donde se busca investigar cómo las correlaciones no clásicas presentes en el sistema tienen efectos en dos protocolos metrologógicos[24].

Buscamos obtener información de un parámetro θ en el sistema, que en general es inaccesible, entonces utilizamos un estimador u observable $\hat{\theta}$. Las mediciones x realizadas tendrán una distribución de probabilidad $p_\theta(x)$. Nos gustaría entonces que nuestro estimador no tuviera sesgo, es decir que el promedio de las diferencias entre el parámetro y el estimador sean cero. A su vez, la calidad del estimador es cuantificada por la varianza del mismo. Para encontrar entonces el mejor estimador $\hat{\theta}_{mejor}$, será aquel que maximice la función de verosimilitud definida como: $\ln(l(\theta|x))$, donde $l(\hat{\theta}|x) \equiv p_\theta(x)$. Entonces la información de θ estará cuantificada por la razón de cambio de la función de máxima verosimilitud. Al segundo momento de la derivada de máxima verosimilitud se le conoce como Información de Fisher:

$$F(\theta) = \int \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log p(x, \theta) \right)^2 p(x, \theta) dx. \quad (2.81)$$

Existe una cota inferior para la varianza de nuestro estimador llamada cota de Cramér-Rao:

$$V(p_\theta, \hat{\theta}) \geq \frac{1}{nF(\theta)}, \quad (2.82)$$

donde n es el número de repeticiones de las mediciones.

Para el caso de un sistema cuántico tenemos la matriz de densidad parametrizada ρ_θ , si este parámetro es el de una evolución unitaria $U_\theta = e^{-iH\theta}$, nuestro estimador será el valor de medición de un operador positivo denotado por Π_x que denota el resultado de una medición x . Entonces $p_\theta(x) = \text{tr}(\rho_\theta \Pi_x)$. Entonces la expresión de la información de Fisher toma la forma:

$$F(\rho_\theta) = \int dx \frac{1}{\text{tr}(\rho_\theta \Pi_x)} (\text{tr}(\partial_\theta \rho_\theta \Pi_x))^2. \quad (2.83)$$

Sin embargo, se puede demostrar que el mejor estimador estará dado para una medición bajo la eigenbase de la derivada logarítmica simétrica L , que se define mediante $\frac{\partial}{\partial \theta} \rho_\theta = \frac{1}{2}(\rho_\theta L + L \rho_\theta)$. Así entonces la Información de Fisher Cuántica estará dada por:

$$\mathcal{F}(\rho, H) \equiv \text{tr}[\rho L^2]. \quad (2.84)$$

Si utilizamos una eigen base $|k\rangle$, tal que $\rho = \sum p_k |k\rangle \langle k|$ la Información de Fisher cuántica toma la forma:

$$\mathcal{F}(\rho, H) = 4 \sum_{k < l} \frac{(p_k - p_l)^2}{p_k + p_l} |\langle k | H | l \rangle|^2. \quad (2.85)$$

Davide Girolami, Tommaso Tufarelli, y Gerardo Adesso propusieron una forma de realizar mediciones de una forma mas realista en el contexto de óptica cuántica [16]. Para esto se utiliza un esquema de interferometría, es decir que se utiliza un sistema bipartito AB, con matriz de densidad ρ_{AB} , donde la perturbación unitaria se le realiza a uno de los subsistemas mediante un cambio de fase $U_A = e^{-iH_A^\Lambda}$, donde Λ es el espectro del Hamiltoniano. La matriz de densidad resultante será $\rho_{AB, \theta} = (U_A^\Lambda \otimes \mathbb{I}_B) \rho_{AB_0} (U_A^\Lambda \otimes \mathbb{I}_B)^\dagger$. Ahora el estimador óptimo será aquel que sature la cota de Crámer-Rao y la calidad de ese estimador estará cuantificada por:

$$\mathcal{P}_A^\Lambda(\rho_{AB}) \equiv \frac{1}{4} \min_{H_A} \mathcal{F}(\rho_{AB}, H_A^\Lambda), \quad (2.86)$$

esta cantidad se conoce como poder interferométrico y la minimización es en todos los Hamiltonianos con espectro Λ . El poder interferométrico también sirve como medida de las correlaciones no clásicas del sistema. Cuando se le restringe a un sistema $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^d$, entonces el Hamiltoniano tendrá la forma $H = H_A \otimes \mathcal{I}_B$, teniendo que para el subsistema A se puede escribir su Hamiltoniano como $H_A = \mathbf{n} \cdot \sigma$ con espectro $\Lambda = \{1, -1\}$. Entonces el poder interferométrico será el eigenvalor mínimo de la matriz de 3×3 denotada como W_{AB} .

$$\mathcal{P}_A^\Lambda(\rho_{AB}) = \lambda_{\min}(W_{AB}). \quad (2.87)$$

La matriz W_{AB} esta dada para una base $\rho_{AB} = \sum p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ como:

$$(W_{AB})_{mn} = \frac{1}{2} \sum_{i, j: p_i + p_j \neq 0} \frac{(p_i - p_j)^2}{p_i + p_j} \langle \psi_i | \sigma_{mA} \otimes \mathbb{I}_B | \psi_j \rangle_{AB} \langle \psi_j | \sigma_{mA} \otimes \mathbb{I}_B | \psi_i \rangle_{AB}. \quad (2.88)$$

Sin embargo, en la literatura podemos encontrar que el poder interferométrico se utiliza como un medidor de correlaciones cuánticas. Suhno Kim, et al. [15], realizan una revisión acerca de como utilizar la información de Fisher para medir las correlaciones cuánticas en un sistema. Parten de la ecuación (2.85) y se demuestra que en efecto la información de Fisher es una métrica para las correlaciones cuánticas. Para estados puros, esta medición es el entrelazamiento. Pero debemos saber que la discordia cuántica mide todas las correlaciones cuánticas incluso más allá del entrelazamiento, es decir puede no ser cero, aún para estados mixtos separables. Si el sistema es separable en dos subsistemas a) Clásico-Cuántico, b) Cuántico-Clásico y c) Cuántico-Cuántico, esto estará reflejado en la discordia. Cabe destacar que para un estado puro, la discordia se convierte en el número de Schmidt, una medida solamente de entrelazamiento.

De nueva cuenta en el artículo de Suh Kim, et al. se demuestra que la información cuántica de Fisher esta relacionada con la discordia cuántica si se realiza una optimización entre todas las posibles bases ortonormales de uno de los subsistemas. Esto precisamente da lugar a que mediante la optimización de la información de Fisher se pueda definir un cuantificador de correlaciones cuánticas tipo Fisher como:

$$\mathcal{F}_A(\rho^{AB}) = \lambda_{\min}(W_{AB}). \quad (2.89)$$

La cuál contendrá no solo las correlaciones cuánticas debidas al entrelazamiento sino será una medida tipo discordia donde se capturen las correlaciones cuánticas mas allá del entrelazamiento.

2.2. Aislantes topológicos

En física de materia condensada, se les conoce como estados topológicos de la materia a sistemas que son descritos a través de propiedades o invariantes topológicas como lo son la fase de Berry y la correspondencia bulto-borde. Dentro de estos estados se encuentran los aislantes topológicos. Estos son materiales que tienen un brecha (gap) de energía en el grueso de su composición como cualquier aislante convencional. Sin embargo, estos materiales poseen estados en las orillas o en la superficie que están protegidos debido a las interacciones espín-orbita, la simetría de Inversión Temporal y la simetría Quiral. En los superconductores este gap de energía da lugar a que las orillas alberguen fermiones de Majorana quienes juegan un papel muy importante en la promesa de la computación cuántica topológica [25].

La idea de estudiar topológicamente estos estados surge de la idea del teorema adiabático. Intuitivamente este teorema nos dice que podemos mover o alterar un estado de una manera lenta y suave, de tal forma que éste no cambie o brinque a otro estado. Esto se le conoce como una evolución adiabática. El concepto de poder mover o transportar un estado sin alterarlo, da lugar a transiciones de fase que no están relacionadas con cambios de estado tradicionales, sino a transiciones de alguna otra propiedad como podrían ser las propiedades topológicas que posee el sistema. Este movimiento da lugar a la idea de evolucionar un Hamiltoniano a lo que se le denomina transporte paralelo, que discutiremos un poco mas adelante [26].

2.2.1. Simetría inversión temporal

Se dice que un Hamiltoniano \hat{H} posee cierta simetría dado un operador unitario \hat{U} si:

$$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger = \hat{H}. \quad (2.90)$$

La simetría temporal $U = \mathcal{T}$ se entiende como la capacidad de poder revertir la dirección del tiempo y que el sistema permanezca inalterado. Sin embargo, hay observables en la mecánica cuántica que no tienen esa simetría, por ejemplo, para el operador de momento p , $\mathcal{T}p\mathcal{T}^{-1} = -p$. Ocurre lo mismo para el momento angular l , pero para el operador de posición x no ocurre, este ultimo no es simétrico bajo inversión temporal.

Definamos el operador de conjugación \mathbf{K} como:

$$\mathbf{K}f(r) = f(r)^*\mathbf{K} \quad \text{con} \quad \mathbf{K}^2 = 1, \quad (2.91)$$

para cualquier función $f(r)$ compleja. Con este operador podemos aplicarla a la ecuación de Schrödinger.

$$\mathbf{K}i\partial_t|\Psi\rangle = \mathbf{K}\partial_t\mathbf{K}\mathbf{K}|\Psi^*\rangle = -i\partial_t = \mathbf{K}H\mathbf{K}\mathbf{K}|\Psi\rangle = H^*|\Psi^*\rangle. \quad (2.92)$$

Esto nos deja ver una cosa, si fuéramos a invertir el tiempo una de las cosas que debería cambiar es el momento. Lo cual tiene sentido pues si la partícula iba en una dirección, esperaríamos que al invertir el tiempo pareciera que va en la dirección contraria. Es decir que $i\partial_t \rightarrow -i\partial_t$. De hecho para Hamiltonianos reales, es decir $H^* = H$ el operador de inversión temporal es justo \mathbf{K} .

Para un Hamiltoniano en el espacio de momentos k , el operador de inversión temporal actúa de la siguiente manera

$$\mathcal{T}H(k)\mathcal{T}^{-1} = H(-k). \quad (2.93)$$

La simetría de inversión temporal tiene dos posibilidades que $\mathcal{T}^2 = 1$ o $\mathcal{T}^2 = -1$. Esto ocurre de esta manera pues intuitivamente quisiéramos que al aplicar el operador de inversión temporal dos veces nos regresara al mismo estado salvo por una fase. Comprobemos esto:

$$T^2 = \alpha \mathcal{I} \quad \text{con} \quad \alpha = e^{i\phi}, \quad (2.94)$$

si escribimos esto en forma antiunitaria veremos que:

$$\mathcal{T}^2 = U\mathbf{K}U\mathbf{K} = U\mathbf{K}KU^* = UU^* = \alpha \mathcal{I} \quad (2.95)$$

$$\therefore U = \alpha U^T. \quad (2.96)$$

De la ultima igualdad podemos concluir que los valores de α solo pueden ser ± 1 . Por lo tanto $\mathcal{T}^2 = \pm 1$

Supongamos que tenemos un sistema con espín, si aplicamos la inversión temporal sería como hacer una rotación de π al espín al rededor de un eje. Escojamos el eje y para esa rotación, entonces el operador de simetría temporal tendría la siguiente forma:

$$\mathcal{T} = e^{-i\frac{\pi}{2}\sigma_y}\mathbf{K}. \quad (2.97)$$

Utilizando la expansión en serie de la exponencial para operadores, esto sería:

$$\mathcal{T} = -i\sigma_y\mathbf{K} \Rightarrow \mathcal{T}^2 = -1. \quad (2.98)$$

Aplicando a un Hamiltoniano en el espacio de momentos:

$$\mathcal{T}H(k)\mathcal{T}^{-1} = -i\sigma_y H^* i\sigma_y = H(-k). \quad (2.99)$$

Esto tiene consecuencias muy significativas. La primera es que existirá una degeneración para los estados de k y $-k$. A esta degeneración se le conoce como la degeneración de Kramer. Esto a su vez tiene como consecuencia que los estados de borde siempre se presentarán en pares. La segunda implicación es que las invariantes topológicas son obligadas a tomar valores enteros pares. Para sistemas bosónicos, tomarán valores enteros impares.

2.2.2. Simetría Quiral

Existen otros tipos de simetrías, una es la llamada simetría quiral, decimos que un Hamiltoniano posee simetría quiral si:

$$\hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma}^\dagger = -\hat{H}, \quad (2.100)$$

con $\hat{\Gamma}$ siendo $\hat{\Gamma}^\dagger = \hat{\Gamma}$ hermitiano, $\hat{\Gamma}^\dagger\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^2 = I$ unitario y debe ser local, es decir $\hat{\Gamma} = \hat{\gamma}_1 \oplus \hat{\gamma}_2 \oplus \dots \oplus \hat{\gamma}_n$ con $\hat{\gamma}_i$ un operador unitario y hermitiano que actúa solo en cada subespacio de \hat{H} . También algo que comúnmente no se menciona es que $\hat{\Gamma}$ debe ser robusta. Es decir, que si \hat{H} depende de un conjunto de parámetros $\xi \in \Xi$ entonces:

$$\hat{\Gamma}\hat{H}(\xi)\hat{\Gamma}^\dagger = -\hat{H}(\xi), \quad (2.101)$$

$\forall \xi \in \Xi$, es decir que la quiralidad no depende del conjunto de parámetros.

Que exista esta simetría nos permite dividir en subespacios a \hat{H} , así como su estudio[8]. A la simetría quiral también se le conoce como la simetría de la subred, pues para un Hamiltoniano con dos subredes, podemos definir:

$$P_A = \frac{1}{2}(I + \Gamma) \quad P_B = \frac{1}{2}(I - \Gamma), \quad (2.102)$$

donde notemos que $P_A P_B = 0$ y $P_A + P_B = I$. Esta simetría es debida a que el Hamiltoniano no inducirá una transición dentro de la misma subred, es decir:

$$\begin{aligned} \hat{P}_A \hat{H} \hat{P}_A &= \hat{P}_B \hat{H} \hat{P}_B = 0 \\ \implies \hat{H} &= \hat{P}_A \hat{H} \hat{P}_B + \hat{P}_B \hat{H} \hat{P}_A \end{aligned}$$

Esto tiene una consecuencia significativa e interesante acerca del espectro de energías. Sea $|\Psi_n\rangle$ tal que $\hat{H} |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle$, notemos que si

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma} \hat{H} \hat{\Gamma}^\dagger &= -\hat{H} \implies \hat{\Gamma} \hat{H} = -\hat{H} \hat{\Gamma} \\ \implies \hat{H} \hat{\Gamma} |\Psi\rangle &= -\hat{\Gamma} E_n |\Psi\rangle = -E_n \hat{\Gamma} |\Psi\rangle \end{aligned}$$

Esto nos dice que para cada estado con energía E_n tendremos su símil simétrico quiral con energía $-E_n$. Podemos decir más. Para estados $E_n \neq 0$ sabemos que $|\Psi\rangle$ y $\hat{\Gamma} |\Psi\rangle$ tienen que ser ortogonales al tener energías distintas

$$\begin{aligned} \implies 0 &= \langle \Psi | \hat{\Gamma} |\Psi\rangle = \langle \Psi | P_A |\Psi\rangle - \langle \Psi | P_A |\Psi\rangle \\ &\implies \langle \Psi | P_A |\Psi\rangle = \langle \Psi | P_A |\Psi\rangle \end{aligned}$$

esto nos dice que $|Psi\rangle$ tiene el mismo soporte en ambas subredes. Si $E_n = 0$ entonces $\hat{H} |\Psi\rangle = 0$:

$$\implies \hat{H} \hat{P}_{A/B} |\Psi\rangle = \hat{H} (|\Psi\rangle \pm \hat{\Gamma} |\Psi\rangle) = 0$$

Esto nos dice que para estado con energía cero, existe $|\Psi\rangle$ que es símil quiral consigo mismo. Estos son los llamados estados de energía cero. De los cuales unos populares integrantes de esa familia son los estado de Majorana.

2.2.3. Simetría hueco-partícula

Para entender esta simetría hablemos del modelo de John Bardeen, Leon Cooper y Robert Schrieffer (BCS), este es un modelo que explica la superconducción, su Hamiltoniano es el siguiente:

$$H_{BCS} = \sum_{ij} H_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} (\Delta_{ij} c_i^\dagger c_j^\dagger + h.c.). \quad (2.103)$$

En este modelo c_i^\dagger y c_j son los operadores de creación y aniquilación fermiónicos usuales, H_{ij} son elementos de matriz reales y Δ_{ij} es el parámetro de orden superconductor que nos da información acerca de la formación de los pares de Cooper que son responsables de la superconductividad. Notemos que este Hamiltoniano tiene como primer termino la energía de formación de un fermión usual, el segundo termino tiene un par de operadores de creación, estos serían los pares de Cooper. Mientras que la parte hermitica conjugada tiene dos operadores de aniquilación que se entienden como un par de huecos. Entonces existirán un par de Cooper por cada par de huecos, creando así la simetría hueco-partícula en el sistema, solo que cada partícula esta formada por dos partículas cada una.

El operador que describe la simetría \mathcal{P} se escribe en su forma antiunitaria como:

$$\mathcal{P} = \sigma_x \mathbf{K}, \quad (2.104)$$

muy parecida al de inversión temporal. Si aplicamos esta simetría a un Hamiltoniano en el espacio de momentos, tendríamos que:

$$\mathcal{P} H(k) \mathcal{P}^{-1} = -H(-k). \quad (2.105)$$

Esto nos dice que para cada eigenestado con energía E , existirá un eigenestado con energía $-E$. Esta simetría en la literatura también se le conoce como quiral. Para los modelos que estudiaremos mas adelante la simetría quiral y la de hueco-partícula serán equivalentes.

2.2.4. Modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH)

El modelo SSH describe el salto de los electrones en una cadena unidimensional. La cadena consta de N celdas, cada una con dos sitios A y B, véase figura(2.2). No se consideran interacciones entre los electrones [8]. Este modelo se puede escribir como el Hamiltoniano de una partícula:

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N (|m, B\rangle \langle m, A| + h.c.) + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1, A\rangle \langle m, B| + h.c.), \quad (2.106)$$

con $m \in \{1, \dots, N\}$. Los estados $|m, A\rangle$ y $|m, B\rangle$ indican la celda m en la que se encuentra el electrón y el nivel de la subred, ya sea que esté en A o B. El coeficiente v media los saltos dentro de cada celda, es decir los saltos intracelda de A a B y viceversa. Por su parte w media los saltos de una celda a otra, notemos que solo se permiten saltos a la celda mas próxima, esto se le denomina saltos a primeros vecinos. Vemos en la figura (2.2) un esquema del modelo, donde tenemos las m celdas del sistema y sus interacciones mediadas por v y w . Este sistema puede caracterizar moléculas complejas como el Poliacetileno. Por simplicidad v y w se considerarán reales, sin embargo, si esto no fuera así, siempre podemos redefinir una nueva base que absorba la fase proveniente de la parte imaginaria de los coeficientes.

Este sistema es en realidad un sistema de dos niveles repetido N veces, lo que nos invita a intentar describirlo con la base de sistema de dos niveles mas familiares, es decir las matrices de Pauli. Esto pues nuestros estados tienen la forma:

$$|m, \alpha\rangle \rightarrow |m\rangle \otimes |\alpha\rangle \in H_{ext} \otimes H_{int}$$

con $\alpha \in \{A, B\}$ un sistema de dos niveles.

Recordemos que:

$$\sigma_o = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.107)$$

De esta forma podemos escribir el Hamiltoniano como:

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N |m\rangle \langle m| \otimes \sigma_x + w \sum_{m=2}^{N-1} (|m+1\rangle \langle m| \otimes \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2}) + h.c., \quad (2.108)$$

aquí podemos notar que aparece σ_x como un operador de salto de una celda a otra y a $\sigma_+ = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2}$ como un operador de excitación intracelda. Esto quiere decir que el sistema presenta un acoplamiento celda-sitio la cual es de tipo pseudoespín-orbita, pues para los saltos intracelda se comporta como un espín al tener dos niveles, mientras que el sitio lo haría como un orbital. Esto demuestra que los estados de este Hamiltoniano darán origen a una no clasicidad.

2.2.5. SSH Bulto

En este sistema al buscar describir un sistema de estado solido, en realidad se busca describir una cantidad gigantesca de celdas. Podemos entonces tomar el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$. De esta forma podemos entonces estudiar la parte de en medio del sistema, es decir no nos preocupamos de las orillas, esto se le conoce como el bulto del sistema. Así podemos imponer condiciones de frontera de Born-Von Karman, es decir condiciones periódicas a la frontera, el Hamiltoniano se transformaría a:

$$\hat{H}_{bulto} = \sum_{m=1}^N (v |m, B\rangle \langle m, A| + w |m \bmod(N) + 1, A\rangle \langle m, B|) + h.c. \quad (2.109)$$

La virtud de centrarnos en el estudio de un sistema periódico es que podemos invocar el teorema de Bloch y estudiar el sistema en el espacio de momentos, con el número de onda k . Este cambio de base se realiza a través de la transformada de Fourier.

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^N e^{-imk} |m\rangle \quad \text{con } k \in \{\lambda, 2\lambda, \dots, N\lambda\}, \quad (2.110)$$

con $\lambda = \frac{2\pi}{N}$, donde escogimos k para que tome todos los valores de la primera zona de Brillouin.

Entonces por el teorema de Bloch podemos suponer que nuestros estados tendrán la forma:

$$|\Psi_n(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle \quad \text{con} \quad |u_n(k)\rangle = a_n(k)|A\rangle + b_n(k)|B\rangle, \quad (2.111)$$

donde $|u_n(k)\rangle \in H_{\text{interno}}$ del Hamiltoniano en el espacio de momentos. Entonces definimos el Hamiltoniano en el espacio de momento como:

$$\hat{H}(k) = \langle k | \hat{H}_{\text{bulto}} | k \rangle \quad (2.112)$$

que nos lleva a

$$\hat{H}(k) |u_n(k)\rangle = E_n(k) |u_n(k)\rangle. \quad (2.113)$$

Esto es interesante porque entonces mucha de la caracterización del sistema se podrá hacer al Hamiltoniano $\hat{H}(k)$, facilitando el estudio al ser este un sistema de dos niveles. Veamos que si aplicamos la transformada de Fourier de la ecuación (2.110) al Hamiltoniano en (2.108) y luego calculamos $\hat{H}(k)$, obtendremos un Hamiltoniano de dos por dos:

$$\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.114)$$

Las eigenenergías de este Hamiltoniano son:

$$E(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos(k)}. \quad (2.115)$$

También podemos escribir el Hamiltoniano $\hat{H}(k)$ como una combinación lineal de las matrices de Pauli, es decir:

$$\hat{H}(k) = \vec{d} \cdot \vec{\sigma} = (d_x, d_y, d_z) \cdot (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (2.116)$$

$$\vec{d} = (v + w \cos(k), w \sin(k), 0), \quad (2.117)$$

que $d_z = 0$ es consecuencia de que nuestro Hamiltoniano posea simetría quiral.

Podemos entonces calcular el *Winding number* ν de \vec{d} , esto es cuántas veces circula al rededor del origen. Como podemos observar en la figura (2.1) el *Winding number*, nos da una manera de clasificar los diferentes estados topológicos, cuando $\nu \neq 0$ y $v > w$. Así como estados no topológicos cuando $\nu = 0$ y $v < w$. Existe sin embargo una frontera entre estos dos estados, cuando $v = w$, esta frontera concuerda justo cuando $\vec{d}(k)$ pasa por el origen, el *Winding Number* no está definido y la banda de energía se cierra.

2.2.6. Estados de borde del modelo SSH

Ya estudiamos el bulto del sistema pero otra parte importante son los estados de borde, son de hecho la parte estelar para el uso en el cómputo cuántico.

Veamos dos casos, el primero se llama dimerizado trivial, que es escoger $v = 1$ y $w = 0$, lo que fuerza al sistema a estar compuesto de dímeros aislados. Al segundo se le conoce como dimerizado topológico, se escoge $v = 0$ y $w = 1$, en este caso se crean igualmente dímeros, pero en las orillas se crean estados de borde que no están apareados con nadie, véase figura (2.2).

Como los saltos quedan restringidos en cada dímero, entonces podemos escoger eigenestados restringidos a cada celda. Es decir, para $v = 1$ y $w = 0$, $\hat{H}(k) = \sigma_x$, entonces

$$\hat{H}(|m, A\rangle \pm |m, B\rangle) = \pm(|m, A\rangle \pm |m, B\rangle). \quad (2.118)$$

Esto nos dice que $E = \pm 1$, solo existirán dos eigenenergías y no dependerán de k . Del mismo modo para $v = 0$ y $w = 1$, $\hat{H}(k) = \sigma_x \cos(k) + \sigma_y \sin(k)$, los eigenestados serán análogos de la forma $|m, B\rangle \pm |m+1, A\rangle$ con $E = \pm 1$. Entonces para el caso dimerizado, las bandas de energía serán planas. Lo cual tiene sentido si solo se permiten dos estados y no hay interacción.

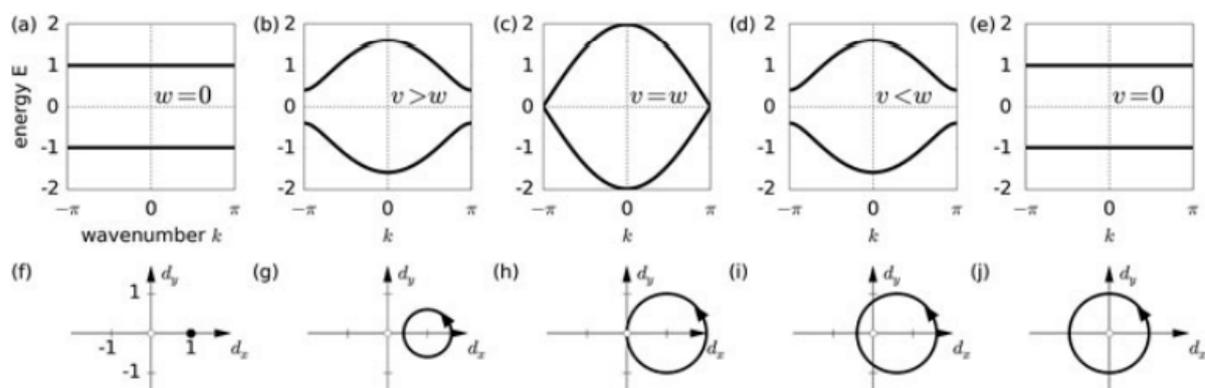


Figura 2.1: En esta figura tenemos la comparación de lo que pasa en la estructura de bandas (a), (b), (c), (d) y (e), para distintos valores de los parámetros v y w . Los cambios significativos son la cerradura y apertura de las bandas para los valores extremos de $-\pi$ y π . Su contraparte en el espacio $d_x - d_y$ está representada en (f), (g), (h), (i) y (j), aquí podemos ver cómo la topología se interpreta como circular o no alrededor del origen; en el caso especial de $v = w$ en (c) y (h), \vec{d} incluye al origen y por lo tanto el Winding number no está definido [8].

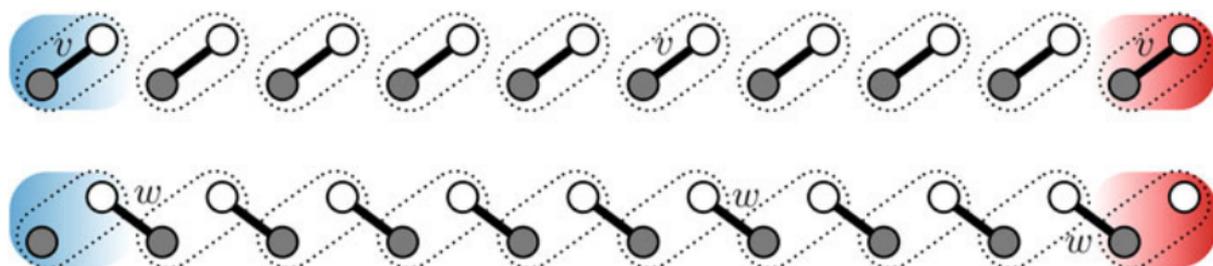


Figura 2.2: La cadena en la parte superior representa el caso trivial: Cadena totalmente dimerizada, quedan solo celdas aisladas una de otras, donde se permite el salto dentro de la celda mediada por v . En la parte inferior se tiene el caso topológico: La cadena queda dimerizada, pero se permiten saltos entre celdas mediadas por el parámetro w , además de que los sitios de los extremos quedan sin aparearse [8].

Algo más interesante pasa para los estados de las orillas en el caso topológico. Pues debido a que no están apareados con nadie, su energía debe ser cero. Esto es que

$$\hat{H} |1, A\rangle = \hat{H} |N, B\rangle = 0, \quad (2.119)$$

los cuales ya sabíamos que existían dada la simetría quiral del sistema.

2.2.7. Evolución de estados de borde

Podemos estudiar que le pasa a esos estados de borde a medida que nos alejamos del límite de dimerización, dejemos fija w y cambiemos v . Graficamos entonces para $N = 10$, tenemos 20 eigenestados, podemos observar en la figura (2.3) que los estados de borde con energía cero solo se encuentran para $v < w$, es decir para una región denominada topológica, de hecho el número de estados de borde es una constante topológica que caracteriza el sistema.

2.2.8. Densidad de estados

Se define como la densidad de estados por unidad de volumen como [27]:

$$N(E) = \sum_n \delta(E - \epsilon_n). \quad (2.120)$$

Esta definición podemos corroborarla al integrar sobre una región de valores de energía $[E_1, E_2]$. Entonces;

$$\int_{E_1}^{E_2} N(E) dE = \int_{E_1}^{E_2} \sum_n \delta(E - \epsilon_n) dE = \sum_n \int_{E_1}^{E_2} \delta(E - \epsilon_n) dE. \quad (2.121)$$

Luego esta integral valdrá cero para ϵ_n fuera del intervalo $[E_1, E_2]$ y uno para las energías dentro del intervalo. Luego sumar el total de estados entre E_2 y E_1 será el número total de estados.

Pareciera que el *Winging Number* tiene cierta relación con el cierre o no de las bandas de conducción y a su vez con la presencia o no de los estados de bordes. Es más de hecho el número de estados de borde es también una propiedad topológica que se conserva en el sistema. Y la relación entre los estados en el bulto y los de borde se le conoce como la correspondencia bulto-borde [8].

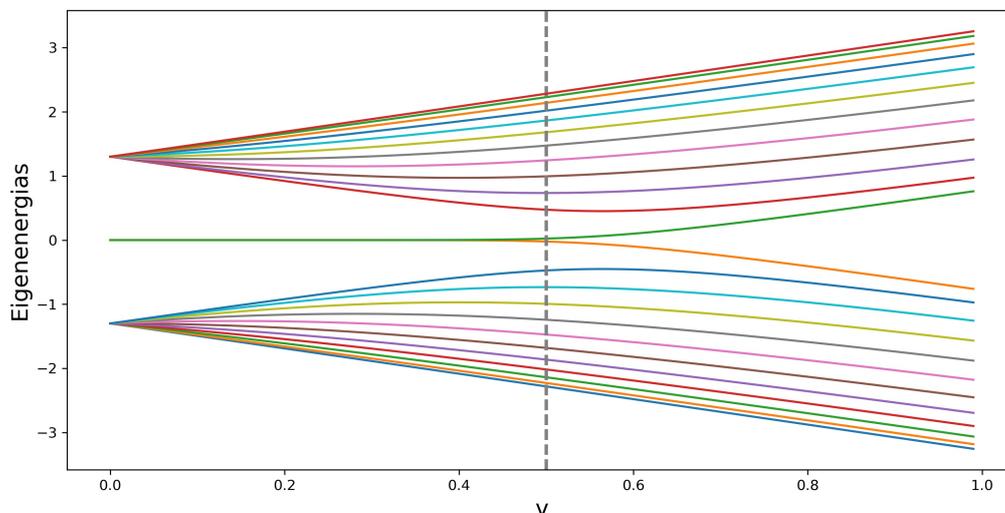
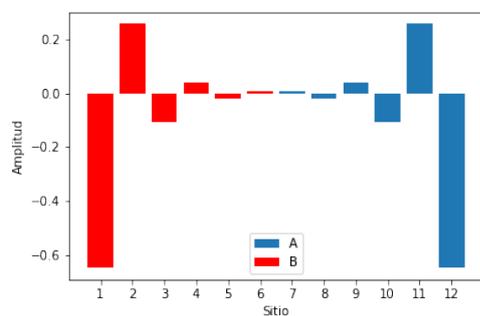
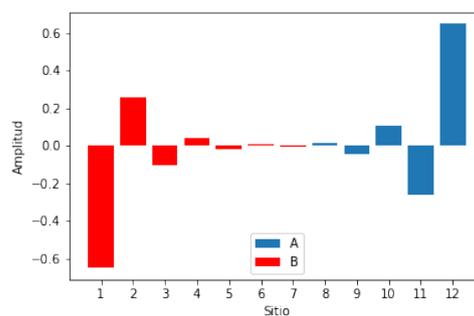


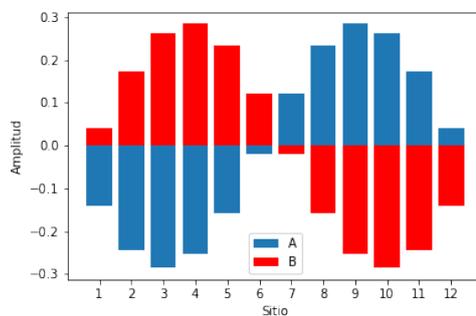
Figura 2.3: En esta figura podemos ver los eigenestados del modelo SSH para $N = 10$ y $w = 0.5$ (línea punteada), vemos que son un conjunto de 20 estados en total, cada estado positivo tiene su contra parte negativa. Vemos que los estados de borde con energía cero solo son encontrados para $v < w$, es decir en la región topológica.



(a)



(b)



(c)

Figura 2.4: En esta figura tenemos la amplitud de probabilidad de ocupación del modelo SSH. Para la celda A en azul y B en rojo. Con $N = 12$, $v = 0.1$ y $w = 0.5$ En (a) y (b) tenemos los estados de borde donde notamos la localización en los extremos de la cadena y en (c) tenemos un estado de bulto, vemos la mezcla de posibles poblaciones y su deslocalización.

2.3. Modelos topológicos mas allá del SSH

2.3.1. Modelo de Kitaev

En este capítulo discutimos el modelo de un superconductor topológico en una dimensión, el llamado modelo de Kitaev, siendo este uno de los modelos pedagógicos para el estudio de las fases topológicas en el ámbito de la física.

El Hamiltoniano de Kitaev es el siguiente:

$$H = -\mu \sum_n c_n c_n^\dagger - t \sum_n (c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}) + \sum_n (\Delta c_n c_{n+1} + \Delta' c_{n+1}^\dagger c_n^\dagger), \quad (2.122)$$

donde c_i^\dagger y c_i son los operadores de creación y aniquilación del electrón en la i -ésima celda, μ es la energía de sitio, también llamada potencial químico, t es la amplitud de salto (hopping) al vecino mas cercano y Δ es el potencial superconductor de pares. Análogo a lo visto en el Hamiltoniano BCS, esta creación de dos partículas y su aniquilación crea los pares de Cooper y los huecos que a su vez dan lugar a la simetría hueco partícula del sistema. Esta simetría es análoga a la quiral, pues es el hecho de tener estos dos estados, dos electrones o dos huecos que nos permite tener entonces dos estados posibles. Al igual que en el modelo SSH teníamos dos celdas A y B, el par de huecos y el par de electrones fingirán como estos dos estados.

Podemos expresar este Hamiltoniano a través del formalismo de Bogoliubov-de Gennes, esto es:

$$H_K = \frac{1}{2} C^\dagger H_{BdG} C, \quad (2.123)$$

donde H_{BdG} es un Hamiltoniano de $2N \times 2N$ y además se puede expresar en términos de las matrices de Pauli τ y en la base de sitio $|n\rangle = (0, \dots, 1, \dots, 0)^T$, $C = (c_1, c_2, \dots, c_N, c_1^\dagger, c_2^\dagger, \dots, c_N^\dagger)^T$, entonces el Hamiltoniano se puede escribir como:

$$H_{BdG} = -\mu \sum_n \tau_z |n\rangle \langle n| - \sum_n (t\tau_x + i\Delta\tau_y) |n\rangle \langle n+1| + h.c. \quad (2.124)$$

En la figura 2.5 podemos ver una representación gráfica del Hamiltoniano H_{BdG} (2.124), donde

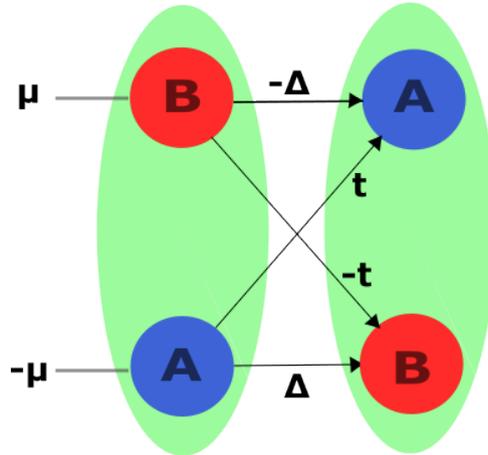


Figura 2.5: Representación del modelo de Kitaev para el Hamiltoniano H_{BdG} (2.124), donde μ es la energía de sitio A o B, mientras que las posibles transiciones al vecino siguiente están mediadas por Δ y t .

observamos que el modelo de Kitaev puede entenderse como una cadena de sistemas de dos niveles, donde los niveles A y B son la creación de un par de electrones y un par de huecos respectivamente. Luego los parámetros t y Δ median las posibles transiciones entre los sistemas vecinos, el parámetro μ es la energía de sitio de cada nivel en cada sistema.

Debido a la naturaleza del modelo y su simetría de traslación, bien podemos invocar el teorema de Bloch y pasar el hamiltoniano al espacio de momentos k . Esto lo logramos haciendo la transformada de Fourier siguiente:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-ikn} |n\rangle. \quad (2.125)$$

Entonces al sustituir la transformación inversa nos resulta en:

$$H_{BdG} = \sum_k (-\mu - 2t\cos(k))\tau_z |k\rangle \langle k| + \sum_k 2\Delta\sin(k)\tau_y |k\rangle \langle k|. \quad (2.126)$$

Lo que nos deja trabajar con un Hamiltoniano de 2×2 de la forma

$$H_k = \vec{h} \cdot \vec{\tau} = (-\mu - 2t\cos(k))\tau_z + 2\Delta\sin(k)\tau_y = \begin{pmatrix} -\mu - 2t\cos(k) & -2i\Delta\sin(k) \\ 2i\Delta\sin(k) & \mu + 2t\cos(k) \end{pmatrix}. \quad (2.127)$$

Si utilizamos la transformación unitaria

$$U = e^{-i\frac{\pi}{4}\tau_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.128)$$

podemos poner en una forma antidiagonal el Hamiltoniano

$$H'(k) = UH(k)U^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & h_z - ih_y \\ h_z + ih_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.129)$$

Entonces lo siguiente es sustituir los valores para \vec{h} y vemos que podemos escribir esto de la siguiente forma

$$H'(k) = \begin{pmatrix} 0 & h_z - ih_y \\ h_z + ih_y & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\mu - 2t\cos(k) - 2i\Delta\sin(k) \\ -\mu - 2t\cos(k) + 2i\Delta\sin(k) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.130)$$

Utilizamos las definiciones de seno y coseno con exponencial compleja:

$$H'(k) = \begin{pmatrix} 0 & -\mu - 2t\left(\frac{e^{ik} + e^{-ik}}{2}\right) - 2i\Delta\left(\frac{e^{ik} - e^{-ik}}{2i}\right) \\ -\mu - 2t\left(\frac{e^{ik} + e^{-ik}}{2}\right) + 2i\Delta\left(\frac{e^{ik} - e^{-ik}}{2i}\right) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.131)$$

Luego agrupamos los términos con argumento positivo y negativo de las exponenciales:

$$H'(k) = \begin{pmatrix} 0 & -\mu + (-t - \Delta)e^{ik} + (\Delta - t)e^{-ik} \\ -\mu + (\Delta - t)e^{ik} + (-\Delta - t)e^{-ik} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.132)$$

Si definimos $v \equiv -\mu$, $z \equiv -t - \Delta$ y $w \equiv \Delta - t$, nuestro Hamiltoniano toma la siguiente forma.

$$H'(k) = \begin{pmatrix} 0 & \rho(k) \\ \rho^*(k) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.133)$$

con $\rho(k) = v + ze^{ik} + we^{-ik}$ donde la energía esta dada por:

$$E = \pm|\rho(k)| = \pm\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 + 4\mu t \cos k - 4(\Delta^2 - t^2) \cos^2 k}. \quad (2.134)$$

Mas adelante veremos, que este es un Hamiltoniano equivalente al modelo de la siguiente sección.

2.3.2. Modelo Su-Schrieffer-Heeger Extendido (SSH-E)

En esta sección discutiremos las propiedades fundamentales del SSH-E, otro modelo que como lo dice su nombre es una extensión del modelo SSH.

El Hamiltoniano del modelo SSH-E es:

$$H = \sum_{j=1}^N v |j, B\rangle \langle j, A| + w |j+1, A\rangle \langle j, B| + z |j+1, B\rangle \langle j, A| + h.c. \quad (2.135)$$

El tercer término del Hamiltoniano nos dice que a diferencia del modelo SSH, este modelo permite saltos entre los sitios A y B pero a celdas vecinas, lo que se le denomina como saltos a primeros vecinos. El modelo SSH se recupera al volver $z = 0$, podemos ver un esquema del modelo en la figura (2.6).

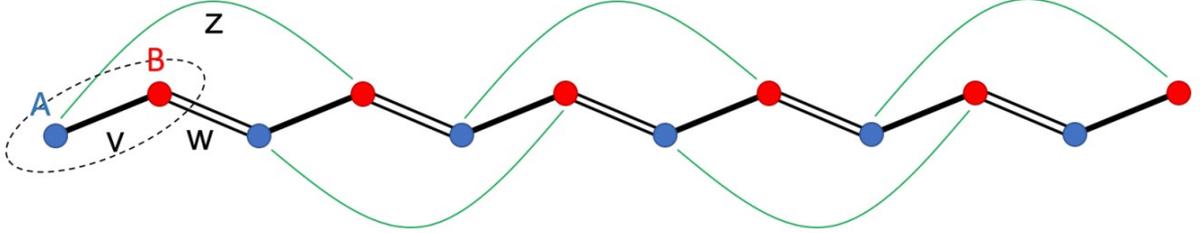


Figura 2.6: Un esquema del modelo SSH-Extendido, vemos que los saltos intercelda están regulados por v , mientras que los saltos a la siguiente celda por w y los saltos a primeros vecinos por el parámetro z . [28]

Análogamente a lo hecho para el modelo de Kitaev y el SSH, ya que el modelo tiene una simetría traslacional al volver periódicas las fronteras, podemos recurrir al teorema de Bloch, esto nos permitirá trabajar nuestro sistema periódico infinito en el espacio de momentos. Lo que nos permite realizar una transformación de Fourier de la siguiente forma:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikj} |n\rangle. \quad (2.136)$$

El Hamiltoniano entonces en el espacio de momentos toma la forma:

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + ze^{ik} + we^{-ik} \\ v + ze^{-ik} + we^{ik} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.137)$$

Las eigenenergías de este Hamiltoniano son:

$$E(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + z^2 - 2wz + 2v(w+z)\cos(k) + 4zwc\cos^2(k)}. \quad (2.138)$$

Podemos escribir este hamiltoniano $H(k)$ en la base de las matrices de Pauli

$$H(k) = d(k) \cdot \vec{\sigma}, \quad (2.139)$$

donde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Sabemos entonces que $d(k)$ debe tener la siguiente forma:

$$\vec{d}(k) = (v + (z+w)\cos(k), (w-z)\sin(k), 0). \quad (2.140)$$

Podemos ver como luce graficada $d(k)$ en la parte inferior de las subfiguras en la figura (2.9), dependiendo de la elección de parámetros, $d(k)$ describe una elipse que puede encerrar o no el origen, en la siguiente sección explicaremos como este hecho da lugar a las fases topológicas del sistema.

2.4. Equivalencia del Modelo de Kitaev con SSH-E

Recordemos los dos Hamiltonianos del modelo de Kitaev y del SSH-Extendido en el espacio de momentos de las ecuaciones (2.132) y (2.137).

$$H_{Kitaev}(k) = \begin{pmatrix} 0 & -\mu + (-t - \Delta)e^{ik} + (\Delta - t)e^{-ik} \\ -\mu + (\Delta - t)e^{ik} + (-\Delta - t)e^{-ik} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.141)$$

$$H_{SSH-E}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + ze^{ik} + we^{-ik} \\ v + ze^{-ik} + we^{ik} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.142)$$

Es evidente que si seleccionamos adecuadamente los parámetros podemos pasar de uno a otro, esto sería escogiendo $v = -\mu$, $z = -(\Delta + t)$ y $w = \Delta - t$. Esta equivalencia resulta muy útil a la hora de interpretar algunos resultados de la geometría del sistema, en particular de la topología de los mismos.

2.5. Fases topológicas del modelo de Kitaev y SSH-Extendido

2.5.1. Fases topológicas del modelo de Kitaev

Recordemos de la ecuación (2.143) el Winding number: la siguiente fórmula

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=1} dz \frac{h'(z)}{h(z)}. \quad (2.143)$$

Que no es mas que la ecuación (2.30), aplicando una homotopía de la primera zona de Brillouin al círculo unitario a través de definir $z = e^{ik}$. Recordemos de la ecuación (2.132) que el Hamiltoniano en el espacio de momentos tiene la siguiente forma:

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & -\mu + (-t - \Delta)e^{ik} + (\Delta - t)e^{-ik} \\ -\mu + (\Delta - t)e^{ik} + (-\Delta - t)e^{-ik} & 0 \end{pmatrix}$$

definimos $h(k) = -\mu + (-t - \Delta)e^{ik} + (\Delta - t)e^{-ik}$, teniendo en cuenta que $z = e^{ik}$, tenemos $h = h(z)$ y su derivada:

$$h(z) = -\mu + (\Delta - t)\frac{1}{z} - (\Delta + t)z. \quad (2.144)$$

Calculando su derivada tenemos que:

$$h'(z) = -\frac{(\Delta - t)}{z^2} - (\Delta + t), \quad (2.145)$$

para resolver esta integral recordemos el principio del argumento de Cauchy, que nos dice que:

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=1} dz \frac{h'(z)}{h(z)} = Z - P, \quad (2.146)$$

donde Z es el número de ceros y P es el número de polos de la función $h(z)$.

Entonces observemos en la ecuación (2.144) tenemos dos ceros, cuando $z^\pm = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 4(\Delta^2 - t^2)}}{-2(\Delta + t)}$ y un polo en $z = 0$ cuando $\Delta \neq t$. El polo siempre estará dentro del círculo unitario, entonces nos preguntamos cuándo los ceros estarán dentro del círculo unitario.

Nos preguntamos entonces:

$$|z^\pm| = \left| \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 + 4(\Delta^2 - t^2)}}{-2(\Delta + t)} \right| < 1. \quad (2.147)$$

Veamos el caso z^+ , esto es:

$$-1 < \frac{\mu + \sqrt{\mu^2 + 4(\Delta^2 - t^2)}}{-2(\Delta + t)} < 1. \quad (2.148)$$

El lado derecho de la desigualdad sigue que:

$$\mu + \sqrt{\mu^2 + 4(\Delta^2 - t^2)} > -2(\Delta + t), \quad (2.149)$$

restando μ en ambos lados de la desigualdad tenemos que:

$$\sqrt{\mu^2 + 4(\Delta^2 - t^2)} > -\mu - 2(\Delta + t), \quad (2.150)$$

elevando al cuadrado en ambos lados:

$$\mu^2 + 4(\Delta^2 - t^2) > \mu^2 - 4\mu(\Delta + t) + 4(\Delta + t)^2. \quad (2.151)$$

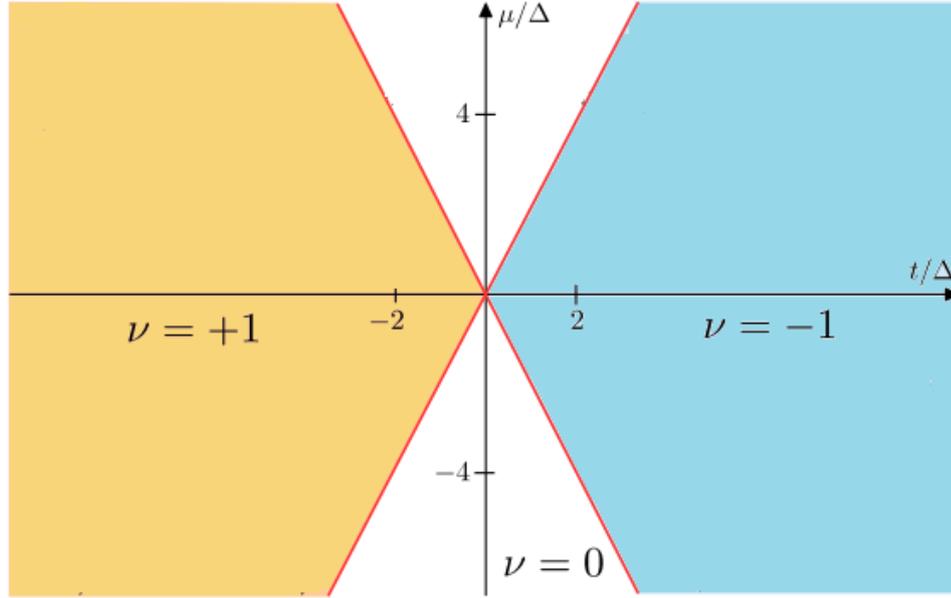


Figura 2.7: Regiones de las distintas fases topológicas para $\Delta < 0$ en el modelo de Kitaev, en azul tenemos $\nu = -1$, en blanco $\nu = 0$ y en amarillo $\nu = +1$. La línea rojas son las rectas $\mu/\Delta = 2t/\Delta$ y $\mu/\Delta = -2t/\Delta$, representan los lugares de transición de fase. Las regiones azul y amarilla de -1 y 1 se invierten para $\Delta < 0$ [18]

Dividiendo entre $\frac{4}{\Delta}(\Delta + t)$ y cancelando μ^2 , tenemos:

$$(\Delta - t)/\Delta > -\mu/\Delta + (\Delta + t)/\Delta, \quad (2.152)$$

cancelando términos nos queda:

$$\frac{-2t}{\Delta} > -\frac{\mu}{\Delta}, \quad (2.153)$$

al multiplicar por -1 y girando la desigualdad tenemos que:

$$\frac{\mu}{\Delta} > \frac{2t}{\Delta}. \quad (2.154)$$

Si realizamos el mismo procedimiento análogo para el lado izquierdo de la desigualdad en (2.148), llegamos al resultado que $2t > -\mu$, como son dos condiciones simultaneas, esto quiere decir que $|2t| > \mu$. Así mismo si hacemos el caso para z^- , llegamos al mismo resultado, es decir que si uno de los ceros esta en el círculo unitario, el otro también estará. Entonces los posibles valores que podemos tener del *Winding Number* son $\nu = 0, +1, -1$. Cuando no hay ceros y no hay polos, cuando hay dos ceros y un polo recorriendo la curva en el sentido horario y recorriendo la curva en sentido antihorario. Es decir, si consideramos $\Delta > 0$ y $t > 0$ entonces la curva se recorrerá en sentido antihorario, por lo tanto tendremos que $\nu = -(P - Z)$, entonces si $|2t| < \mu$ al tener 1 polo y 2 ceros, tendremos que $\nu = -1$. Para $t < 0$ ocurre lo análogo pero en el sentido horario.

Por tanto el *Winding Number* para el modelo de Kitaev queda como:

$$\nu = \begin{cases} 0 & |2t/\Delta| < \mu/\Delta \\ +1 & |2t/\Delta| > \mu/\Delta \text{ y } t/\Delta < 0 \\ -1 & |2t/\Delta| > \mu/\Delta \text{ y } 0 < t/\Delta \end{cases} \quad (2.155)$$

Notemos que esto se invierte si ahora consideramos $\Delta < 0$. Tendríamos un *Winding Number* de -1 para $t/\Delta < 0$ y de +1 para $t/\Delta > 0$. Podemos observar esto gráficamente en la figura (2.7), donde se representan las tres zonas de fase topológica $\nu = 1, 0, -1$, representadas por la región naranja, blanca y azul respectivamente. La gráfica representa el caso cuando $\Delta > 0$, en el caso opuesto, las zonas azules y naranjas se invierten. Las líneas rojas son las rectas $\mu/\Delta = 2t/\Delta$ y $\mu/\Delta = -2t/\Delta$, representan la frontera donde ocurre un cambio de fase.

2.5.2. Fases topológicas del modelo SSH-Extendido

Recordemos que ya hemos encontrado la equivalencia entre el modelo de Kitaev y SSH-E al renombrar los parámetros del sistema $v \equiv -\mu$, $z \equiv -t - \Delta$ y $w \equiv \Delta - t$, entonces podemos realizar el mismo procedimiento para calcular $h'(z')/h(z')$, note que ahora se ha primado z para no confundirlo con el parámetro del modelo SSH-E. Entonces si $a = (\Delta+t) = -z$, $b = (\Delta-t) = w$ y $\mu = -v$

$$\frac{h'(z')}{h(z')} = \frac{zz'^2 - w}{z'(zz'^2 + vz' + w)}. \quad (2.156)$$

Luego realizando la integral (2.143), tendremos que dependiendo de si se encierran o no polos en el círculo unitario los parámetros estarán relacionados como:

$$\nu = \begin{cases} 0 & |w + z| < v \\ +1 & |w + z| > v \quad y \quad w > z \\ -1 & |w + z| > v \quad y \quad w < z \end{cases} \quad (2.157)$$

Sin embargo, podemos dar otro argumento geométrico para estas relaciones, recordemos que en el espacio de momentos el Hamiltoniano puede descomponerse como $H = \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma}$, para el modelo SSH-E ya vimos anteriormente que $d(k)$ está dado por:

$$d(k) = (v + (z + w)\cos(k), (w - z)\sin(k), 0). \quad (2.158)$$

Esto como se ve en la figura (2.9) en la parte inferior de cada subfigura, parametriza una elipse con semiejes $(z + w)$ y $(w - z)$, centrada en $(v, 0)$. Si $w + z < v$ entonces la curva no encierra al origen y no encierra ninguna discontinuidad, por eso el *Winding Number* es cero. Por otro lado si $w + z > v$ encerrará al origen y la diferencia de $w - z$ dará la dirección en que se recorre la curva, por eso para $w > z$, entonces $w - z > 0$ y la curva se recorrerá de forma horaria siendo $\nu = Z - P$. En otro caso, si $w < z$, entonces $w - z < 0$ y la curva se recorrerá en sentido opuesto y tendremos que $\nu = P - Z$. Esto nos da una idea de la importancia y significancia de la geometría y topología de las bandas y la representación de \vec{d} , pues encerrar o no al origen da lugar a la presencia o no de fase topológica.

Vemos en la figura (2.8) como es que se observan estas fases en un espacio cartesiano de (v, w, z) , en estas vemos las tres regiones en tres dimensiones del valor que puede tomar ν . A su vez en la figura (2.9) podemos ver como al igual que en el modelo SSH, tener la trayectoria de $d(k)$ encerrando al origen ocasionando un polo nos determinará el resultado de ν .

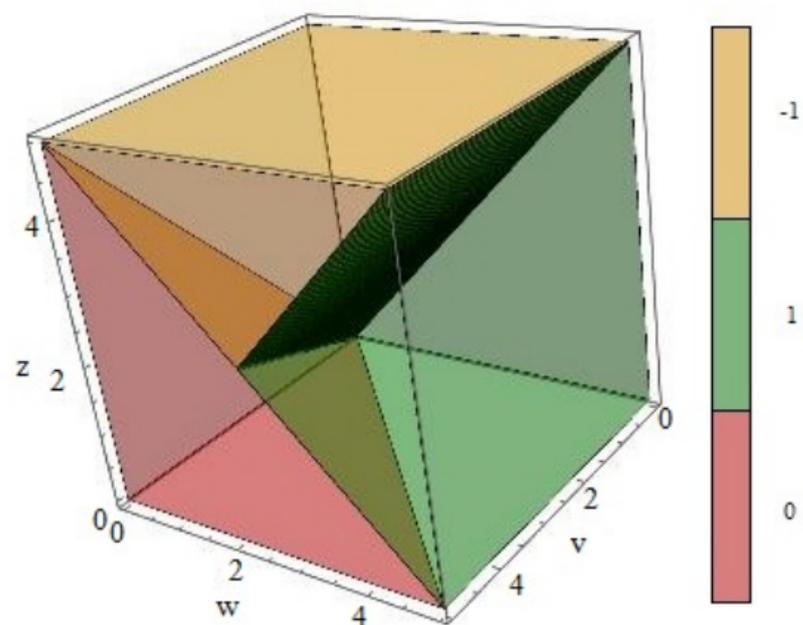


Figura 2.8: Representación cartesiana para el modelo de SSH-E para los parámetros v, w y z . Tenemos en tres colores distintos las regiones para los distintos *Winding Number*, en amarillo la región con $\nu = -1$, en rojo con $\nu = 0$ y en verde con $\nu = 1$. También podemos ver los planos de corte donde ocurren las transiciones de fase [8].

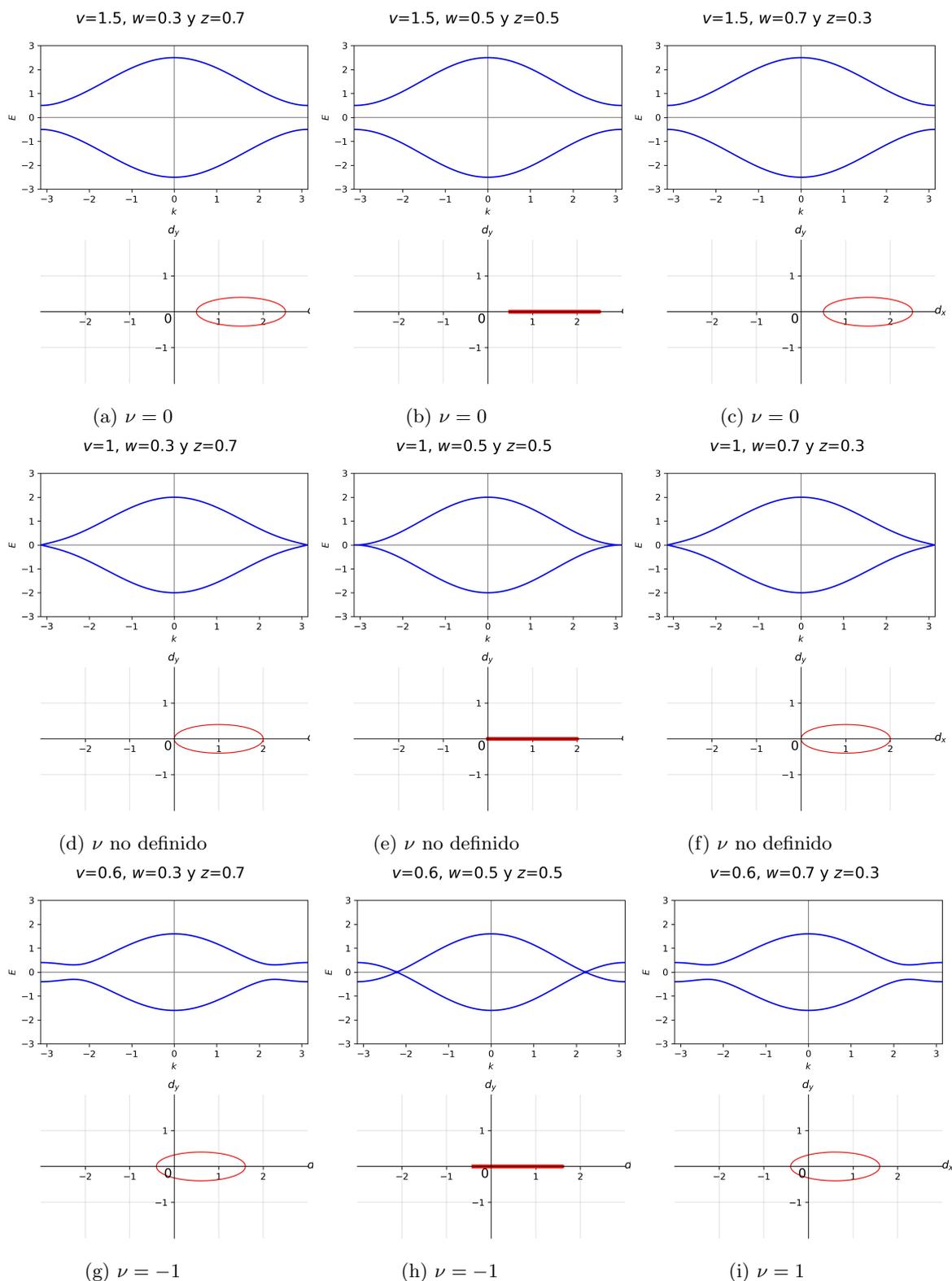


Figura 2.9: Tenemos la comparación de la estructura de bandas en la parte superior contra la geometría de \vec{d} en el plano $d_x - d_y$ en la parte inferior. Las subfiguras (a), (b) y (c) se escogieron los parámetros de tal forma que $\nu = 0$, teniendo una misma estructura de bandas, sin embargo observamos que podemos modificar la geometría de la elipse que describe \vec{d} . Para las subfiguras (d), (e) y (f) la elipse contiene al origen y eso hace que se indetermina ν , este caso las bandas se cierran. En las figuras (g), (h) y (i) tenemos al origen dentro de la elipse, teniendo así un polo dentro de esta, por ende existe fase y corresponde a $\nu = -1$, para este caso podemos cerrar o no las bandas dependiendo de la selección de los parámetros.

Capítulo 3

Modelación

3.1. Modelo de Aislante Topológico de Kitaev con Condiciones de Frontera de Paredes Infinitas.

Ahora bien, lo que necesitamos es encontrar las eigenfunciones del bulto con fronteras abiertas. Para esto volvamos a estudiar el sistema sin saltos a segundos vecinos, es decir el modelo SSH. Este Hamiltoniano se vería así:

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N (|m, B\rangle \langle m, A| + h.c.) + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1, A\rangle \langle m, B| + h.c.), \quad (3.1)$$

donde v modula los saltos dentro de la celda A-B y w los saltos a la siguiente celda, es decir al primer vecino. Se puede observar en la figura (2.6) un esquema del modelo, en este caso $z = 0$. Al igual que hicimos en los otros casos lo podemos descomponer en la forma antidiagonal $\rho(k)$

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & \rho(k) \\ \rho^*(k) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

En este caso $\rho = \frac{v}{w} + e^{-ika_0}$. Si diagonalizamos la matriz encontramos que los eigenvalores son:

$$E = \pm |\rho(k)| \quad (3.3)$$

$$E = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2wv \cos(ka_0)}. \quad (3.4)$$

Podemos escribir $\rho(k) = |\rho(k)|e^{-i\phi(k)}$ donde la fase ϕ esta dada por:

$$\cot(\phi(k)) = \frac{v/w}{\sin(ka_0)} + \cot(ka_0). \quad (3.5)$$

Los eigenvectores estarán dados por:

$$|u_{k,\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\phi(k)} \\ \pm 1 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

De este modo, vemos la estructura básica del sistema básico del SSH, para poder construir las eigenfunciones del sistema con vecinos, solo necesitamos escribir la función $\rho(k)$ del Hamiltoniano (2.137), de la forma $\rho(k) = |\rho(k)|e^{-i\phi(k)}$. Si hacemos eso entonces podemos escribir las eigenfunciones del sistema completo con las fronteras periódicas como combinación lineal de $|u_{k\pm}\rangle$ [10].

$$|u_{k,\pm}\rangle = \sqrt{\frac{1}{2M}} \sum_{m=1}^M e^{ika_0} \begin{pmatrix} e^{-i\phi(k)} \\ \pm 1 \end{pmatrix} \cdot (|m, A\rangle, |m, B\rangle). \quad (3.7)$$

Sin embargo, las condiciones de frontera de paredes infinitas (cdpi) nos dice que

$$\langle 0, B|v_{k,\pm}\rangle = 0, \quad (3.8)$$

lo cuál implica que una base ortogonal, sera para k y $-k$, es decir:

$$|v_{k,\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_{k,\pm}\rangle - |u_{-k,\pm}\rangle). \quad (3.9)$$

La función de onda para el sistema periódico se convierte en:

$$|u_{k,\pm}\rangle = \frac{i}{\sqrt{M}} \sum_{m=1}^M \begin{pmatrix} \sin(km - \phi(k)) \\ \pm \sin(km) \end{pmatrix} \cdot (|m, A\rangle, |m, B\rangle). \quad (3.10)$$

La condición de frontera:

$$\langle (M+1), A | u_{k,\pm} \rangle = 0, \quad (3.11)$$

impone una condición de cuantización para k , tal que:

$$k(M+1)a_0 - \phi(k) = \lambda\pi, \quad (3.12)$$

con $\lambda = 1, \dots, M$.

La fase $\phi(k)$ se obtiene de escribir la componente diagonal del Hamiltoniano diagonal (3.2) como $\rho(k) = |\rho(k)|e^{-i\phi(k)}$, para el caso de el modelo SSH-E tenemos que:

$$\cot(\phi(k)) = \frac{v}{(w-z)\sin(k)} + \frac{(w+z)\cot(k)}{(w-z)}, \quad (3.13)$$

pero recordemos que hallamos la equivalencia entre el modelo de Kitaev y SSH-E a través de identificar, $v \equiv -\mu$, $z \equiv -t - \Delta$ y $w \equiv \Delta - t$, entonces la ecuación anterior para el modelo Kitaev es:

$$\cot(\phi(k)) = \frac{-\mu}{(2\Delta)\sin(k)} + \frac{-t \cot k}{\Delta}. \quad (3.14)$$

Esta construcción de las eigenfunciones es válida para cualquier sistema 2-dimensional, lo que cambiaría entre cada uno de ellos es la forma funcional de $\phi(k)$.

3.1.1. Transiciones permitidas

Notemos que para la función de onda (3.6) podemos calcular el elemento de matriz de la transición debido al operador σ_z . Esto es $\langle u_{k,\tau} | \sigma_z | u_{k',\tau'} \rangle$, donde k corre en todas las posibles k de la zona de Brillouin y $\tau = \pm 1$. Si escogemos $\tau = \tau' = +1$, es decir la banda positiva, tendremos que:

$$\langle u_{k,+} | \sigma_z | u_{k',+} \rangle = \frac{1}{2}(e^{i\phi(k) - \phi(k')} - 1) = 0 \quad \text{si } k=k'. \quad (3.15)$$

Esto quiere decir que las transiciones entre mismas bandas están prohibidas, lo cuál corresponde a las reglas de selección que conocemos para un sistema de dos niveles. En cambio para σ_x y σ_y para la banda $+$ y $+$, con $k = k'$ tendremos que:

$$\langle u_{k,+} | \sigma_x | u_{k,+} \rangle = \frac{1}{2}(e^{i\phi(k)} + e^{-i\phi(k)}) = \text{Re}[e^{i\phi}] = \cos(\phi(k)) \quad (3.16)$$

$$\langle u_{k,+} | \sigma_y | u_{k,+} \rangle = \frac{i}{2}(-e^{i\phi(k)} + e^{-i\phi(k)}) = -\text{Im}[e^{-i\phi}] = \sin(\phi(k)). \quad (3.17)$$

Si aplicamos esto mismo para las eigenfunciones de la ecuación (3.7), es decir un sistema con condiciones periódicas, obtenemos un resultado similar:

$$\begin{aligned} \langle u_{k,+} | \sigma_z | u_{k,+} \rangle &= \frac{1}{2M} \sum_{m=1}^M \sum_{m'=1}^M e^{ia_0(k'm' - km)} (\langle m, A | e^{i\phi(k)} + \langle m, B |) (|m', A\rangle e^{-i\phi(k')} - |m', B\rangle) \\ &= \frac{1}{2M} \sum_{m=1}^M \sum_{m'=1}^M e^{ia_0(k'm' - km)} (e^{i(\phi(k) - \phi(k'))} \delta_{m,m'} - \delta_{m,m'}) \\ &= \frac{1}{2M} \sum_{m=1}^M e^{ia_0 m(k - k')} (e^{i\phi(k) - \phi(k')} - 1) = 0 \quad \text{si } k=k'. \end{aligned}$$

De forma análoga, veamos para $[\sigma_x]_{u_{k,\pm},u_{k',\pm}}$ y $[\sigma_y]_{u_{k,\pm},u_{k',\pm}}$ obtendremos que si escogemos la $k = k'$ y además las bandas + y +:

$$\begin{aligned}\langle u_{k,+} | \sigma_x | u_{k,+} \rangle &= \frac{1}{2M} \sum_{m=1}^M e^{ia_om(k'-k)} (e^{i\phi(k)} + e^{-i\phi(k)}) \\ &= \frac{1}{2} (e^{i\phi(k)} + e^{-i\phi(k)}) \quad \text{si } k=k' \\ &= \text{Re}[e^{i\phi}] = \cos(\phi(k))\end{aligned}$$

mientras que

$$\begin{aligned}\langle u_{k,+} | \sigma_y | u_{k,+} \rangle &= \frac{1}{2M} \sum_{m=1}^M e^{ia_om(k'-k)} i(-e^{i\phi(k)} + e^{-i\phi(k)}) \\ &= i(-e^{i\phi(k)} + e^{-i\phi(k)}) \quad \text{si } k=k' \\ &= -\text{Im}[e^{-i\phi}] = \sin(\phi(k)).\end{aligned}$$

Si calculamos el número de Schmidt de esto, tendremos que:

$$\chi_{sch} = \frac{2}{1 + |r|^2} = \frac{2}{1 + \cos^2(\phi(k)) + \sin^2(\phi(k))} = 1.$$

Ahora, si utilizamos la combinación lineal para obtener la ecuación (3.10) $|v_{k,\pm}\rangle = \frac{|u_{k,\pm}\rangle - |u_{-k,\pm}\rangle}{\sqrt{2}}$, :

$$\langle v_{k,+} | \sigma_z | v_{k,+} \rangle = \frac{-1}{4M} \sum_{m=1}^M 2\text{Re}[e^{-i2a_omk} (e^{2i\phi(k)} - 1)]. \quad (3.18)$$

Lo cual nos indica que las transiciones entre bandas, son permitidas. Efecto interesante a considerar que se verá reflejado en el cálculo del número de Schmidt resultando en un comportamiento no trivial debido a las condiciones de frontera de paredes infinitas. Es decir estas transiciones son lo que dan lugar a la no separabilidad del sistema.

3.2. Número de Schmidt

Vamos a tomar la ecuación (3.10) y encontremos la matriz reducida $\rho_B = \text{tr}_A(\rho)$.

La matriz de densidad ρ esta dada por:

$$\rho = |u_{k,\pm}\rangle \langle u_{k,\pm}| = \frac{-i^2}{\sqrt{M}\sqrt{N}} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \begin{pmatrix} \sin(km - \phi(k)) \\ \pm \sin(km) \end{pmatrix} \cdot (|m, A\rangle, |m, B\rangle) \begin{pmatrix} \sin(kn - \phi(k)) \\ \pm \sin(kn) \end{pmatrix} \cdot (\langle n, A|, \langle n, B|) \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{1}{\sqrt{M}\sqrt{N}} \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \sin(km - \phi(k)) \sin(kn - \phi(k)) |m, A\rangle \langle n, A| \pm \sin(km - \phi(k)) \\ &\quad \sin(kn) |m, A\rangle \langle n, B| \pm \sin(km) \sin(kn - \phi(k)) |m, B\rangle \langle n, A| + \sin(km) \sin(kn) |m, B\rangle \langle n, B| \quad (3.20)\end{aligned}$$

Ahora tomemos la traza parcial sobre el subsistema A, es decir sobre los sitios:

$$\text{tr}_A(\rho) = \sum_l \langle l | u_{k,\pm} \rangle \langle u_{k,\pm} | l \rangle. \quad (3.21)$$

Solo hay que observar que la base $\{|l\rangle\}$ es ortonormal, por esto para cada termino de la suma en (3.20) se obtiene una delta de kroenecker para m y n, debido a que $\sum_l \delta_{lm} \delta_{ln} = \delta_{mn}$, entonces obtenemos:

$$\rho_B = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \sin^2[km - \phi(k)] |A\rangle \langle A| \pm \sin[km] \sin[km - \phi(k)] |A\rangle \langle B| \pm \sin[km] \sin[km - \phi(k)] |B\rangle \langle A| + \sin^2(km) |B\rangle \langle B| \quad (3.22)$$

Podemos ver que el resultado es una matriz de 2×2 , donde solo nos restaría realizar la suma de los senos para tener una forma analítica de la matriz reducida. Para realizar esa suma, vamos a utilizar el siguiente par de resultados (Apéndice A).

$$\sum_{n=1}^M \sin(a + nd) = \frac{\sin(M\frac{d}{2})}{\sin(\frac{d}{2})} \sin(a + (M+1)\frac{d}{2}) \quad (3.23)$$

$$\sum_{n=1}^M \cos(a + nd) = \frac{\sin(M\frac{d}{2})}{\sin(\frac{d}{2})} \cos(a + (M+1)\frac{d}{2}). \quad (3.24)$$

Para $|u_{k,+}\rangle$ la matriz tendría la siguiente representación:

$$\rho' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} \cos((M+1)k - 2\phi(k)) & \frac{1}{2} \cos(\phi(k)) - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} \cos((M+1)k - \phi(k)) \\ \frac{1}{2} \cos(\phi(k)) - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} \cos((M+1)k - \phi(k)) & \frac{1}{2} - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} \cos((M+1)k) \end{pmatrix}$$

. Sin embargo esta no es una matriz de densidad pues no cumple que $\text{tr}(\rho) = 1$ por ello dividimos por la traza de esta.

Por tanto nuestra matriz final es $\rho = \frac{1}{\Omega} \rho'$

$$\rho = \frac{1}{\Omega} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} \cos((M+1)k - 2\phi(k)) & \frac{1}{2} \cos(\phi(k)) - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} \cos((M+1)k - \phi(k)) \\ \frac{1}{2} \cos(\phi(k)) - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} \cos((M+1)k - \phi(k)) & \frac{1}{2} - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} \cos((M+1)k) \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

donde $\Omega = 1 - \frac{\sin(Mk)}{2M\sin(k)} (\cos((M+1)k - 2\phi(k)) + \cos((M+1)k))$

Si quisiéramos obtener el número de Schmidt, podemos descomponer la matriz como $\rho = \frac{1}{2} I + r \cdot \sigma$, para así ver que $K_{sch} = \frac{2}{1+r^2}$.

Entonces para calcular el vector de Bloch, lo hacemos a través de calcular el valor esperado de las matrices de Pauli. $r = (r_x, r_y, r_z) = (\text{tr}(\rho\sigma_x), \text{tr}(\rho\sigma_y), \text{tr}(\rho\sigma_z))$.

La matriz obtenida tiene la forma

$$\rho = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \gamma \end{pmatrix}$$

donde

$$\alpha = \frac{1}{2\Omega} - \frac{\sin(Mk)}{2\Omega M \sin(k)} \cos((M+1)k - 2\phi(k))$$

$$\beta = \frac{1}{2\Omega} \cos(\phi(k)) - \frac{\sin(Mk)}{2\Omega M \sin(k)} \cos((M+1)k - \phi(k))$$

$$\gamma = \frac{1}{2\Omega} - \frac{\sin(Mk)}{2\Omega M \sin(k)} \cos((M+1)k).$$

Entonces calculamos:

$$r_x = \text{tr}(\rho\sigma_x) = \text{tr}\left(\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right) = \text{tr}\left(\begin{pmatrix} \beta & \alpha \\ \gamma & \beta \end{pmatrix}\right) = 2\beta \quad (3.26)$$

$$r_y = \text{tr}(\rho\sigma_y) = \text{tr}\left(\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\right) = \text{tr}\left(\begin{pmatrix} i\beta & i\alpha \\ i\gamma & -i\beta \end{pmatrix}\right) = 0 \quad (3.27)$$

$$r_z = \text{tr}(\rho\sigma_z) = \text{tr}\left(\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right) = \text{tr}\left(\begin{pmatrix} \alpha & -\beta \\ \beta & -\gamma \end{pmatrix}\right) = \alpha - \gamma. \quad (3.28)$$

Por tanto el número de Schmidt será:

$$K_{sch} = \frac{2}{1 + (2\beta)^2 + (\alpha - \gamma)^2} \quad (3.29)$$

$$K_{sch} = \frac{2}{1 + \left(\frac{1}{\Omega} \left(\cos(\phi) - \frac{\sin(Mk)}{M \sin(k)} \cos((M+1)k - \phi) \right) \right)^2 + \left(\frac{1}{\Omega} \left(-\frac{\sin(Mk)}{2M \sin(k)} \left(\cos((M+1)k - 2\phi) + \cos((M+1)k) \right) \right) \right)^2} \quad (3.30)$$

Recordemos que impusimos condiciones de frontera, lo cuál nos dio la ecuación trascendental (3.12). así podemos sustituir $\phi(k) = k(M+1)a_0 - \lambda\pi$:

$$K_{sch} = \frac{2}{1 + \left(\frac{\cos(k[M+1]a_0 - \lambda\pi) - \frac{\sin(Mk)}{M \sin(k)} \cos((M+1)k(1-a_0) + \lambda\pi)}{1 - \frac{\sin(Mk)}{2M \sin(k)} [\cos((M+1)k(1-2a_0) + 2\lambda\pi) + \cos((M+1)k)]} \right)^2 + \left(\frac{-\frac{\sin(Mk)}{2M \sin(k)} [\cos((M+1)k(1-2a_0) + 2\lambda\pi) + \cos((M+1)k)]}{1 - \frac{\sin(Mk)}{2M \sin(k)} [\cos((M+1)k(1-2a_0) + 2\lambda\pi) + \cos((M+1)k)]} \right)^2} \quad (3.31)$$

Aquí vale la pena hacer dos observaciones, si $a_0 = 1$ el termino de $r_z = 0$ quedando el número de Schmidt solo dependiente de r_x , es decir:

$$K_{sch}|_{a_0=1} = \frac{2}{1 + \left(\frac{\cos(k[M+1] - \lambda\pi) - \frac{\sin(Mk)}{M \sin(k)} \cos(\lambda\pi)}{1 - \frac{\sin(Mk)}{2M \sin(k)} [\cos(-(M+1)k + 2\lambda\pi) + \cos((M+1)k)]} \right)^2} \quad (3.32)$$

dado que $\cos(\alpha + 2\pi) = \cos(\alpha)$ y que coseno es una función par, se simplifica a:

$$K_{sch}|_{a_0=1} = \frac{2}{1 + \left(\frac{\cos(k[M+1] - \lambda\pi) - \frac{\sin(Mk)}{M \sin(k)} \cos(\lambda\pi)}{1 - \frac{\sin(Mk)}{M \sin(k)} [\cos((M+1)k)]} \right)^2} \quad (3.33)$$

La segunda observación es que para $M \gg 1$ los términos con M en el denominador contribuirán muy poco. Podemos llegar a la misma conclusión anterior siendo que r_z de igual manera tendería a cero. Pero lo que es mas, la ecuación (3.30) se reduciría a :

$$K_{sch} = \frac{2}{1 + (\cos[k(M+1)a_0 - \lambda\pi])^2} \quad (3.34)$$

Pero notemos que el argumento del coseno no es otra cosa que la fase $\phi(k)$ que vimos en la ecuación trascendental, teniendo entonces que:

$$K_{sch} = \frac{2}{1 + (\cos[\phi(k)])^2} \quad (3.35)$$

Este resultado es significativo ya que nos dice que para $M \gg 1$ el entrelazamiento del sistema estará directamente relacionado con la fase del sistema. Esta característica nos dice que el sistema es sensible al tamaño finito. Además de relacionar la fase del sistema directamente con la no separabilidad del sistema, esta oscilará de forma cosenoidal en función del valor de k.

3.3. Densidad de estados

Calculemos la densidad de estados para el modelo SSH utilizando la definición de la ecuación (2.120). Recordemos que la energía esta dada por:

$$E = \pm|h(k)| = \pm\sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k}, \quad (3.36)$$

entonces la densidad de estados estará dada por:

$$N(E) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E - |h(k)|) dk. \quad (3.37)$$

Definamos $z = |h(k)|$, entonces podemos hacer un cambio de variable:

$$dk = \frac{1}{\pi} \frac{dk}{dz} dz, \quad (3.38)$$

por lo tanto tendremos que:

$$N(E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(E - z) \frac{dk}{dz} dz, \quad (3.39)$$

primero despejamos k en términos de z de la ecuación (3.36) recordando que $z = |h(k)|$, lo que nos queda:

$$k = \arccos\left(\frac{z^2 - v^2 - w^2}{2vw}\right), \quad (3.40)$$

derivando tenemos que:

$$\frac{dk}{dz} = \frac{-z}{vw \sqrt{1 - \left(\frac{z^2 - v^2 - w^2}{2vw}\right)^2}}, \quad (3.41)$$

sustituimos el diferencial dk :

$$N(E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-z \delta(E - z) dz}{vw \sqrt{1 - \left(\frac{z^2 - v^2 - w^2}{2vw}\right)^2}}. \quad (3.42)$$

Por definición de la delta de Dirac, el resultado de la integral es la función a integrar evaluada en la energía E. Tomaremos el valor absoluto pues estamos contando estados

$$N(E) = \left| \frac{-E}{\pi vw \sqrt{1 - \left(\frac{E^2 - v^2 - w^2}{2vw}\right)^2}} \right|. \quad (3.43)$$

Podemos ver dos gráficas en las figuras (3.1) y (3.2) donde mostramos la densidad de estados en función de la energía para parámetros fijos y la densidad de estados en función de v , podemos observar que la existencia de fase topológica no afecta en la densidad de estados:

Para el modelo de Kitaev, tenemos que la relación de dispersión esta dada por:

$$E(k) = \pm\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 + 4\mu t \cos k - 4(\Delta^2 - t^2) \cos k}. \quad (3.44)$$

Observemos que la ecuación anterior es una ecuación trascendental si quisiéramos utilizar el método anterior y despejar k en función de alguna variable z, así que se propone resolver numéricamente encontrando las raíces de $E(k) - z = 0$

Utilizando la definición de densidad de estados, aún así podemos hacer el cambio de variable de la siguiente manera, si $z=E(k)$, entonces:

$$\frac{dz}{dk} = \frac{-2\mu t \sin k + 4(\Delta^2 - t^2) \cos k \sin k}{\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 + 4\mu t \cos k - 4(\Delta^2 - t^2) \cos k}}. \quad (3.45)$$

Entonces la integral quedaría:

$$N(E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-2\mu t \sin k + 4(\Delta^2 - t^2) \cos k \sin k}{\sqrt{\mu^2 + 4\Delta^2 + 4\mu t \cos k - 4(\Delta^2 - t^2) \cos k}} \delta(E - z) dz. \quad (3.46)$$

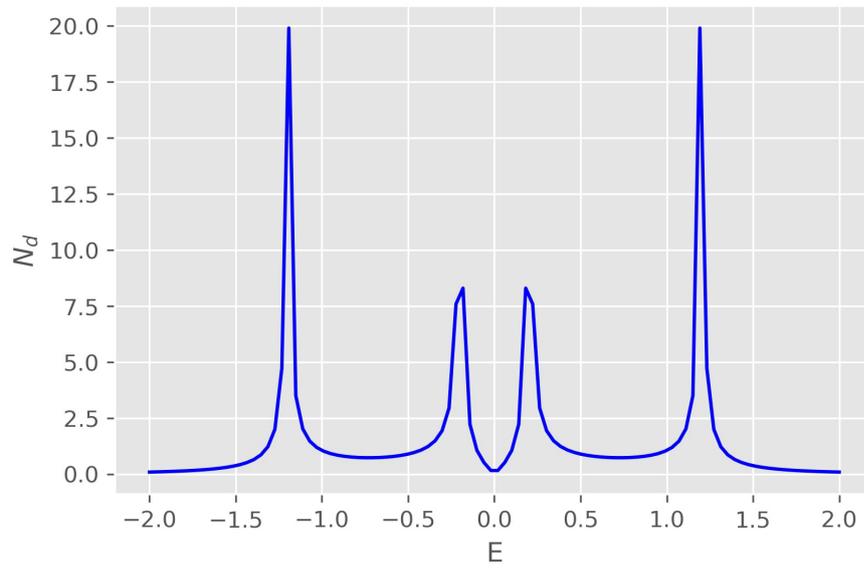


Figura 3.1: Densidad de Estados para el modelo SSH en función de la energía para $w=0.5$ y $v=0.7$. La densidad de estados no se ve alterada por la presencia o no de fase topológica.

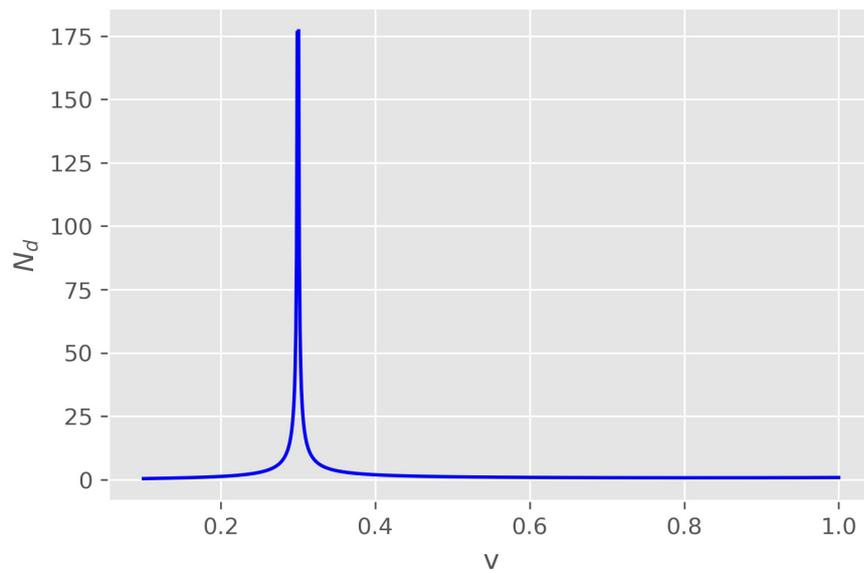


Figura 3.2: Densidad de Estados en función de la v para $E=0.8$ y $v=0.7$. La densidad de estados no se ve alterada por la presencia o no de fase topológica.

Aquí podemos ver a k como una función de z e identificamos el denominador como z , luego tendríamos que:

$$N(E) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-2\mu t \sin k(z) + 4(\Delta^2 - t^2) \cos k(z) \sin k(z)}{z} \delta(E - z) dz, \quad (3.47)$$

usando la definición de la delta de Dirac y tomando el valor absoluto, esto sería:

$$N(E) = \left| \frac{1}{\pi} \frac{-2\mu t \sin k(E) + 4(\Delta^2 - t^2) \cos k(E) \sin k(E)}{E} \right|. \quad (3.48)$$

Hallaremos esos valores de k numéricamente, ya que dado un valor de E , la ecuación trascendental tendrá una solución, siendo k fija. En la figura (3.3) y (3.4) podemos observar las gráficas para la densidad de estados dependientes de la Energía y del parámetro t .

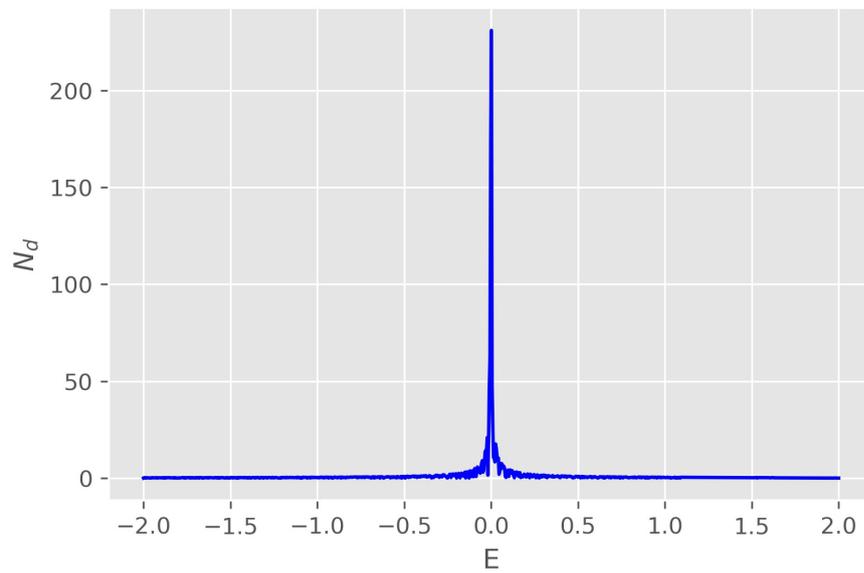


Figura 3.3: Densidad de Estados en función de la energía para $\mu = 1$, $t = 0.8$ y $w = .5$.

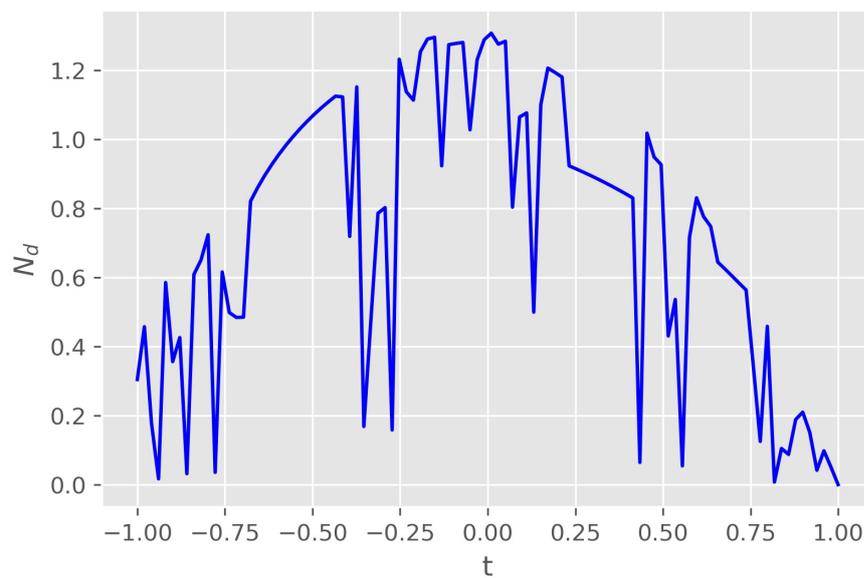


Figura 3.4: Densidad de Estados en función de t para $\mu = 1$, $E = 1$ y $w = .5$.

3.4. Susceptibilidad y Discordia cuántica tipo Fisher

3.4.1. Susceptibilidad

Utilizando la teoría de respuesta lineal nos gustaría calcular la susceptibilidad de los operadores σ_i , los operadores de Pauli. Para esto utilizaremos la ecuación (3.4.1).

$$\chi_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,q} (\Pi_n - \Pi_q) B_{nq} A_{qn} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\omega_{qn} - \omega - i\varepsilon}.$$

Es decir, nos gustaría calcular $\chi_{\sigma_i \sigma_i}$ con $i = x, y, z$. Entonces calculemos $\chi_{\sigma_x \sigma_x}$. Sin embargo, para esto necesitamos conocer los elementos de matriz A_{nq} y B_{nq} de esos operadores en alguna base. Nos interesa la base dada por las eigenfunciones de de la ecuación (3.10), que son los eigenestados para la cadena de Kitaev con condiciones de frontera de paredes infinitas. Entonces $A_{q,n}$ será justo el elemento de matriz $[\sigma^x]_{nq}$, donde n,q correrán sobre todas las funciones de onda $\{k, \pm\}$, análogamente lo será B_{nq} .

Definamos primero el número $\tau = \pm 1$, entonces $|u_{k,\pm}\rangle$ se puede escribir como:

$$|u_{k,\tau}\rangle = \frac{i}{\sqrt{M}} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) |m, A\rangle + \tau \sin(km) |m, B\rangle. \quad (3.49)$$

La normalización de la eigenfunción anterior es:

$$\langle u_{k,\tau} | u_{k,\tau} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \sin^2(km - \phi(k)) + \sin^2(km). \quad (3.50)$$

Utilizando la identidad:

$$\sin^2(\theta) = \frac{1 - \cos(2\theta)}{2}, \quad (3.51)$$

podemos reescribir la ecuación anterior como:

$$\langle u_{k,\tau} | u_{k,\tau} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos(2km - 2\phi(k))}{2} \right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos(2km)}{2} \right) \quad (3.52)$$

$$= 1 - \frac{1}{2M} \left(\sum_{m=1}^M \cos(2km - 2\phi(k)) + \cos(2km) \right), \quad (3.53)$$

podemos utilizar los resultados de la suma de senos y cosenos vistas en (3.24) y (3.23), para realizar las sumas.

$$\langle u_{k,\tau} | u_{k,\tau} \rangle = 1 - \frac{\sin(Mk)}{2M \sin(k)} (\cos((M+1)k - 2\phi(k)) + \cos((M+1)k)). \quad (3.54)$$

Este será el factor de normalización que definiremos como C, notemos que este también depende de k, entonces C' denotara a C para k'.

$$C = \sqrt{\langle u_{k,\tau} | u_{k,\tau} \rangle} = \sqrt{1 - \frac{\sin(Mk)}{2M \sin(k)} (\cos((M+1)k - 2\phi(k)) + \cos((M+1)k))}. \quad (3.55)$$

Ahora recordemos que los operadores de Pauli solo interactúan en el segundo subespacio. Formalmente el operador al que le calcularemos la susceptibilidad será $I_M \otimes \sigma_i$, también tomemos en cuenta que $\sigma_x |A\rangle = |B\rangle$ y $\sigma_x |B\rangle = |A\rangle$.

Entonces:

$$\begin{aligned} \langle u_{k,\tau} | \sigma_x | u_{k',\tau'} \rangle &= \frac{1}{MCC'} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) \langle m, A | + \tau \sin(km) \langle m, B | \\ &\quad \sigma_x \sum_{m'=1}^M \sin(k'm' - \phi(k')) |m', A\rangle + \tau' \sin(k'm') |m', B\rangle \end{aligned}$$

notemos que k , ahora corre sobre todos los valores de k posible, en el conjunto con $\tau = 1$ y todos los valores posibles de k en el conjunto con $\tau = -1$. Al ser los estados $|m, A\rangle$ y $|m, B\rangle$ ortogonales en m y en las subceldas A y B , los elementos resultantes serán:

$$\sigma_{k\tau, k'\tau'}^x = \frac{1}{MCC'} \sum_{m=1}^M \tau' \sin(km - \phi(k)) \sin(k'm) + \tau \sin(k'm - \phi(k')) \sin(km). \quad (3.56)$$

Para poder deshacernos de las sumas, veamos que el primer término, que es idéntico al segundo, salvo por los valores distintos de k y $\phi(k)$, se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \sin(km - \phi) \sin(k'm) &= (\sin(km) \cos(\phi) - \sin(\phi) \cos(km)) \sin(k'm) \\ &= \left[\frac{1}{2} (\cos(km - k'm) - \cos(km + k'm)) \right] \cos(\phi) - \\ &\quad - \left[\frac{1}{2} (\sin(k'm + km) - \sin(km - k'm)) \right] \sin(\phi). \end{aligned}$$

Pero entonces la suma sobre m se puede distribuir y podemos utilizar los resultados de la suma de senos y cosenos vistas en (3.24) y (3.23). Para el segundo término es análogo el procedimiento. El resultado será:

$$\begin{aligned} \sigma_{k\tau, k'\tau'}^x &= \frac{\tau' \sin(\frac{M}{2}(k - k'))}{2MCC' \sin(\frac{k-k'}{2})} \left(\cos(\phi) \cos(\frac{M+1}{2}(k - k')) + \sin(\phi) \sin(\frac{M+1}{2}(k' - k)) \right) + \\ &+ \frac{\tau \sin(\frac{M}{2}(k - k'))}{2MCC' \sin(\frac{k-k'}{2})} \left(\cos(\phi') \cos(\frac{M+1}{2}(k' - k)) + \sin(\phi') \sin(\frac{M+1}{2}(k - k')) \right) + \\ &\quad - \frac{\sin(\frac{M}{2}(k + k'))}{2MCC' \sin(\frac{k+k'}{2})} \left(\cos(\frac{M+1}{2}(k + k')) [\tau \cos(\phi') - \tau' \cos(\phi)] + \right. \\ &\quad \left. + \sin(\frac{M+1}{2}(k + k')) (\tau' \sin(\phi) + \tau \sin(\phi')) \right), \end{aligned}$$

donde $\phi' = \phi(k')$.

Simplificando aún mas, tenemos que:

$$\begin{aligned} \sigma_{k\tau, k'\tau'}^x &= \frac{\sin(\frac{M(k-k')}{2})}{2MCC' \sin(\frac{k-k'}{2})} \left[\tau \cos(\phi' - \frac{M+1}{2}(k' - k)) + \tau' \cos(\phi + \frac{M+1}{2}(k' - k)) \right] \\ &+ \frac{\sin(\frac{M(k+k')}{2})}{2MCC' \sin(\frac{k+k'}{2})} \left[-\tau \cos(\phi' - \frac{M+1}{2}(k + k')) - \tau' \cos(\phi - \frac{M+1}{2}(k + k')) \right]. \end{aligned}$$

Para el caso de los elementos de matriz de σ^y , tendremos que:

$$\begin{aligned} \langle u_{k,\tau} | \sigma_y | u_{k',\tau'} \rangle &= \frac{1}{MCC'} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) \langle m, A | + \tau \sin(km) \langle m, B | \\ &\quad \sigma_y \sum_{m'=1}^M \sin(k'm' - \phi(k')) | m', A \rangle + \tau' \sin(k'm') | m', B \rangle. \end{aligned}$$

En este caso el operador de Pauli actúa sobre el segundo subespacio como, $\sigma_y |m, A\rangle = i |m, B\rangle$ y $\sigma_y |m, B\rangle = -i |m, A\rangle$, entonces los elementos de matriz a calcular son:

$$\sigma_{k\tau, k'\tau'}^y = \frac{i}{MCC'} \sum_{m=1}^M -\tau' \sin(km - \phi(k)) \sin(k'm) + \tau \sin(k'm - \phi(k')) \sin(km), \quad (3.57)$$

sin embargo, podemos reabsorber el menos en $\tau'' = -\tau' = \mp 1$. De esta forma tenemos el mismo cálculo que teníamos para σ_x , salvo la unidad imaginaria i , entonces:

$$\begin{aligned} \sigma_{k\tau, k'\tau'}^y &= i \left(\frac{\sin(\frac{M(k-k')}{2})}{2MCC' \sin(\frac{k-k'}{2})} \left[\tau \cos(\phi' - \frac{M+1}{2}(k'-k)) + \tau'' \cos(\phi + \frac{M+1}{2}(k'-k)) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sin(\frac{M(k+k')}{2})}{2MCC' \sin(\frac{k+k'}{2})} \left[-\tau \cos(\phi' - \frac{M+1}{2}(k+k')) - \tau'' \cos(\phi - \frac{M+1}{2}(k+k')) \right] \right). \end{aligned}$$

Notemos que existe una discontinuidad en $k = k'$, es por esto que lo anterior no es válido en ese caso, procederemos a calcular el caso $k = k'$ para σ_x . En la ecuación (3.56) tomemos $k' = k$, entonces nos queda.

$$\sigma_{k\tau, k\tau'}^x = \frac{1}{MC^2} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) \sin(km) (\tau' + \tau), \quad (3.58)$$

notemos que para los casos en que $\tau' \neq \tau$ resulta en cero su suma, resultando que ese elemento de matriz se anule, sin embargo para $\tau = \tau'$ tendremos que:

$$\begin{aligned} \sigma_{k\tau, k\tau}^x &= \frac{2}{MC^2} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) \sin(km) \quad \text{si } \tau = \tau' = 1 \\ \sigma_{k\tau, k\tau}^x &= \frac{-2}{MC^2} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) \sin(km) \quad \text{si } \tau = \tau' = -1. \end{aligned}$$

Realizando las sumas, entonces tendremos que:

$$\begin{aligned} \sigma_{k\tau, k\tau}^x &= \frac{1}{MC^2} \left(M \cos(\phi(k)) - \frac{\sin(Mk)}{\sin(k)} \cos(\phi(k) + (M+1)k) \right) \quad \text{si } \tau = \tau' = 1 \\ \sigma_{k\tau, k\tau}^x &= \frac{-1}{MC^2} \left(M \cos(\phi(k)) - \frac{\sin(Mk)}{\sin(k)} \cos(\phi(k) + (M+1)k) \right) \quad \text{si } \tau = \tau' = -1. \end{aligned}$$

De igual manera para los elementos de matriz de σ_y calculamos para $k = k'$, entonces partiendo de la ecuación (3.57), tenemos que:

$$\sigma_{k\tau, k\tau'}^y = \frac{i}{M} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) \sin(km) (-\tau' + \tau). \quad (3.59)$$

Para este caso $\tau = \tau'$ se anulan las sumas y es para el caso $\tau = -1$ y $\tau' = 1$ que tendremos que $\sigma_{k,k}^y = -i\sigma_{k,k}^x$ y para el caso $\tau = 1$ y $\tau' = -1$ será $\sigma_{k,k}^y = i\sigma_{k,k}^x$.

Para los elementos de matriz de σ_z es un poco mas laborioso el procedimiento, sin embargo la lógica y las herramientas utilizadas son las mismas.

$$\begin{aligned} \langle u_{k,\tau} | \sigma_z | u_{k',\tau'} \rangle &= \frac{1}{MCC'} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) \langle m, A | + \tau \sin(km) \langle m, B | \\ &\quad \sigma_z \sum_{m'=1}^M \sin(k'm' - \phi(k')) | m', A \rangle + \tau' \sin(k'm') | m', B \rangle. \end{aligned}$$

Sabiendo que $\sigma_z |m, A\rangle = |m, A\rangle$ y $\sigma_z |m, B\rangle = -|m, B\rangle$, entonces tendremos que:

$$\sigma_{k\tau, k'\tau'}^z = \frac{1}{MCC'} \sum_{m=1}^M \sin(km - \phi(k)) \sin(k'm - \phi(k')) - \tau\tau' \sin(km) \sin(k'm) \quad (3.60)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{k\tau, k'\tau'}^z &= \frac{\sin(\frac{M(k-k')}{2})}{2MCC' \sin(\frac{k-k'}{2})} \left(\cos(\phi' - \phi - \frac{M+1}{2}(k-k')) - \tau\tau' \cos(\frac{M+1}{2}(k-k')) \right) + \\ &\quad + \frac{\sin(\frac{M(k+k')}{2})}{2MCC' \sin(\frac{k+k'}{2})} \left(\tau\tau' \cos(\frac{M+1}{2}(k+k')) - \cos(\phi' + \phi - \frac{M+1}{2}(k+k')) \right) \end{aligned}$$

3.5. CUANTIFICADOR TIPO FISHER, DISCORDIA CUÁNTICA Y SU RELACIÓN CON LA SUSCEPTIBILIDAD

De nuevo tenemos la discontinuidad en $k = k'$, por lo tanto hay que realizar ese cálculo por separado. Partiendo de la ecuación (3.60) escogemos la misma k , obtenemos:

$$\sigma_{k\tau, k\tau'}^z = \frac{1}{MC^2} \sum_{m=1}^M \sin^2(km - \phi(k)) - \tau\tau' \sin^2(km). \quad (3.61)$$

Así tenemos de nuevo cuatro casos, sin embargo notemos que si $\tau \neq \tau'$ tendremos justo lo que definimos como el factor de normalización al cuadrado, resultando en que $\sigma_{k,k}^z = 1$ en esos casos. Los otros dos casos, entonces tenemos que:

$$\sigma_{k\tau, k\tau'}^z = \frac{\sin(Mk)}{2M \sin(k)} \left(\cos(2k) - \cos((M+1)k - 2\phi(k)) \right) \quad \text{si } \tau = \tau' = 1, -1. \quad (3.62)$$

De este modo hemos encontrado todas las componentes de las matrices de Pauli en la representación de la eigenbase del sistema. Utilizaremos estas en el siguiente capítulo para realizar un análisis numérico y observar su comportamiento.

3.5. Cuantificador tipo Fisher, Discordia Cuántica y su relación con la Susceptibilidad

Podemos ahora preguntarnos sobre el cuantificador tipo Fisher, para esto utilizaremos el formalismo de la matriz W , la cuál esta dada por:

$$(W_{AB})_{mn} = \sum_{i,j:P_i+P_j \neq 0} \frac{(P_i - P_j)^2}{P_i - P_j} \langle \psi_i | \sigma_m^A \otimes \mathbb{I} | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \sigma_n^A \otimes \mathbb{I} | \psi_i \rangle, \quad (3.63)$$

donde P_i son los proyectores y $\langle \psi_i | \sigma_m^A \otimes \mathbb{I} | \psi_j \rangle$ es el elemento de matriz ij -ésimo de la matriz de Pauli con m seleccionando entre x, y, z , también denotado como $[\sigma_m]_{ij}$. Al encontrarle y diagonalizarle, el cuantificador tipo Fisher estará dado por:

$$F_Q = \lambda_{\min}(W), \quad (3.64)$$

es decir, al eigenvalor mínimo de la matriz W .

Cómo se vio en el marco teórico el cuantificador tipo Fisher se encuentra a partir de la matriz W , la cual esta dada como:

$$(W_{AB})_{mn} = \frac{1}{2} \sum_{i,j:P_i+P_j \neq 0} \frac{(P_i - P_j)^2}{P_i + P_j} \langle \psi_i | \sigma_m^A \otimes \mathbb{I} | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \sigma_n^A \otimes \mathbb{I} | \psi_i \rangle. \quad (3.65)$$

Por otro lado la susceptibilidad estaba dada por:

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{n,q} (\Pi_n - \Pi_q) B_{nq} A_{qn} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\omega_{qn} - \omega - i\varepsilon}, \quad (3.66)$$

con $\omega_{qn} = E_q - E_n$. con P_i y Π_n siendo ambos los proyectores, es decir son el mismo objeto. Si escogemos:

$$\begin{aligned} A &= \sigma_m^A \\ B &= \sigma_n^A, \end{aligned}$$

con $m, n = 1, 2, 3$ correspondientes a las entradas x, y y z del vector $\vec{\sigma}$, entonces podemos calcular:

$$\chi_{\sigma_m, \sigma_n}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{i,j} (\Pi_i - \Pi_j) \langle \psi_i | \sigma_m \otimes \mathbb{I} | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \sigma_n \otimes \mathbb{I} | \psi_i \rangle \lim_{\varepsilon} \frac{1}{\omega_{ji} - \omega - i\varepsilon}. \quad (3.67)$$

Si tomamos la parte imaginaria del límite tendremos que:

$$Im \left[\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\omega_{ji} - \omega - i\varepsilon} \right] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{(\omega_{ji} - \omega)^2 + \varepsilon^2} = \pi \delta(\omega_{ji} - \omega). \quad (3.68)$$

Entonces la parte imaginaria de la susceptibilidad será:

$$\chi''_{\sigma_n, \sigma_m}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{i,j} [\sigma_n]_{ij} [\sigma_m]_{ji} \delta(\omega_{ji} - \omega). \quad (3.69)$$

Si integramos la parte imaginaria de la susceptibilidad como sigue:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \chi''_{\sigma_n, \sigma_m}(\omega). \quad (3.70)$$

Utilizando la identidad:

$$\frac{\Pi_i - \Pi_j}{\Pi_i + \Pi_j} = \frac{e^{\beta E_i} - e^{\beta E_j}}{e^{\beta E_i} + e^{\beta E_j}} = \tanh\left(\frac{\beta(E_j - E_i)}{2}\right), \quad (3.71)$$

entonces la integración se resuelve como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \chi''_{\sigma_n, \sigma_m}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{ij} (\Pi_i - \Pi_j) [\sigma_n]_{ij} [\sigma_m]_{ji} \hbar \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \delta(\omega_{jj} - \omega). \quad (3.72)$$

Al utilizar las propiedades de la delta de Dirac se resuelve la integral del lado derecho y nos queda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \chi''_{\sigma_n, \sigma_m}(\omega) = \pi \sum_{ij} (\Pi_i - \Pi_j) [\sigma_n]_{ij} [\sigma_m]_{ji} \tanh(\beta\omega_{ji}/2). \quad (3.73)$$

De nueva cuenta utilizando la identidad de la tangente de la ecuación (3.71) tenemos que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \chi''_{\sigma_n, \sigma_m}(\omega) = \pi \sum_{ij} (\Pi_i - \Pi_j) [\sigma_n]_{ij} [\sigma_m]_{ji} \frac{\Pi_i - \Pi_j}{\Pi_i + \Pi_j}. \quad (3.74)$$

Reacomodando los términos logramos obtener la forma de la matriz definida en la ecuación (3.63) logrando así una relación explícita entre la parte imaginaria de la susceptibilidad y la matriz W.

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \chi''_{\sigma_n, \sigma_m}(\omega) \pi \sum_{ij} \frac{(\Pi_i - \Pi_j)^2}{\Pi_i + \Pi_j} [\sigma_n]_{ij} [\sigma_m]_{ji} = 2\pi (W_{AB})_{nm}. \quad (3.75)$$

Entonces al encontrar el valor mínimo de esa matriz W podemos encontrar el cuantificador tipo Fisher, por tanto tenemos una relación directa entre la susceptibilidad y el cuantificador tipo Fisher:

$$\mathcal{F}_Q = \lambda_{\min}(W_{AB}) = \lambda_{\min}\left(\frac{\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \chi''_{\sigma_n, \sigma_m}(\omega)\right). \quad (3.76)$$

Este resultado es una contribución de gran importancia pues se tiene en la literatura que Philipp Hauke, et. al. [1] lograron demostrar que mediante mediciones con operadores globales de la susceptibilidad para un sistema de espines se puede encontrar un indicador de las correlaciones cuánticas del sistema, ellos realizan un procedimiento similar pero solo observan las perturbaciones en las direcciones x, y, z , es decir las direcciones en la diagonal de la matriz W. Sin embargo, es de notable importancia que nuestro resultado generaliza ese procedimiento, ya que nosotros obtenemos un cálculo que mapea todas las direcciones del sistema de una forma local y con un paradigma de sistema bipartito. Es decir la ecuación (3.76) nos permite no solo ver las direcciones principales, sino las combinaciones de todas (xy, xz, yx, yz, zx, zy), información que es contenida en los elementos fuera de la diagonal de la matriz W. Aunado a eso, la optimización que se le realiza a la matriz W nos convierte lo que en el artículo es un indicador muy general y prácticamente cualitativo de las correlaciones cuánticas del sistema, en un cuantificador que si nos permite saber la cantidad de correlaciones cuánticas en el sistema, nos permite medir la no clasicidad del sistema tipo discordia.

Capítulo 4

Resultados

Ahora se procederá a presentar los resultados del análisis numérico realizado de los niveles de energía, parametrización de $\vec{d}(k)$, el número de Schmidt, la susceptibilidad lineal y la información cuántica de Fisher del sistema termalizado. Todos los programas fueron realizados en python 3.0.

4.1. Energía, estructura de bandas

Se resolvió numéricamente la ecuación trascendental (3.12) resultada de las cdpi para $M = 300$, se encontraron así los correspondientes trescientos números de onda k . Entonces utilizando la ecuación de la energía (2.134) se pudo obtener una gráfica que se observa en la figura (4.1), donde en la parte superior se aprecia la estructura de bandas que se forma debido a los distintos parámetros elegidos. Notemos que la estructura de las eigenenergías es discreta. Mientras que la parte inferior tenemos el espacio $(d_x - d_y)$, donde vemos parametrizada una elipse mediante los parámetros Δ , t y μ . En las subfiguras (a), (b) y (c), podemos ver la estructura de bandas abierta, mientras que el *Winding Number* toma tres valores 1, 0 y -1 respectivamente, siguiendo las reglas vistas en (2.155). Mientras que para la subfigura (d) la estructura de bandas esta cerrada, en este caso el *Winding number* no está definido. Notemos que al igual que para el SSH y el SSH-E la topología de la elipse parametrizada por \vec{d} sigue teniendo la misma interpretación, pues al encerrar al origen se tiene fase, al no hacerlo no existe y al tocar al origen la fase se indetermina.

4.2. Número de Schmidt

Procedemos a calcular el número de Schmidt de forma numérica a partir de la ecuación (3.31). Utilizando los números de onda k , encontrados al resolver la ecuación trascendental (3.12). Para $M = 350$, escogemos por parámetros $\Delta = 1$ y $\mu = 1$. Y así encontrar el entrelazamiento de la celda y el pseudoespín A,B. Hemos visto como la componente del vector de Bloch en la dirección en x , es la que domina para $M \gg 1$, por esta razón nos concentramos en la descripción de esta componente. Cabe decir que la magnitud de la componente en z es del orden de 10^{-10} despreciable en comparación con la magnitud en la dirección x . El número de Schmidt, así como el valor absoluto de la magnitud de la componente r_x son calculadas variando el parámetro t . En el valor de $t = -0.5$ es donde ocurre una transición de fase de $\nu = 1$ a $\nu = 0$. Esto ocurre para λ menores a 175, donde λ selecciona el estado que observamos, pues es cambiando λ como obtenemos diferentes números de onda k , es decir diferentes soluciones a la ecuación trascendental. Estos pueden observarse en la figura (4.2), donde la parte superior tiene el valor absoluto de la magnitud de componente en x del vector de Bloch en función de t (a) y en la parte inferior tenemos el número de Schmidt (b). Podemos observar entonces como existe un máximo de entrelazamiento en $t = -0.5$, al mismo tiempo habrá un mínimo en la magnitud de la componente x del vector de Bloch en el mismo punto. Los estados intermedios con $\lambda = 175, 176$ son los estados de borde. Estos estados se pueden observar en la figura (4.3) junto con 4 estados más, 2 con λ menor y 2 con λ mayor. Vemos que aquí la dependencia es lineal con el parámetro t , el mismo comportamiento ocurre para r_x . Luego para $\lambda > 175$ lo podemos observar en la

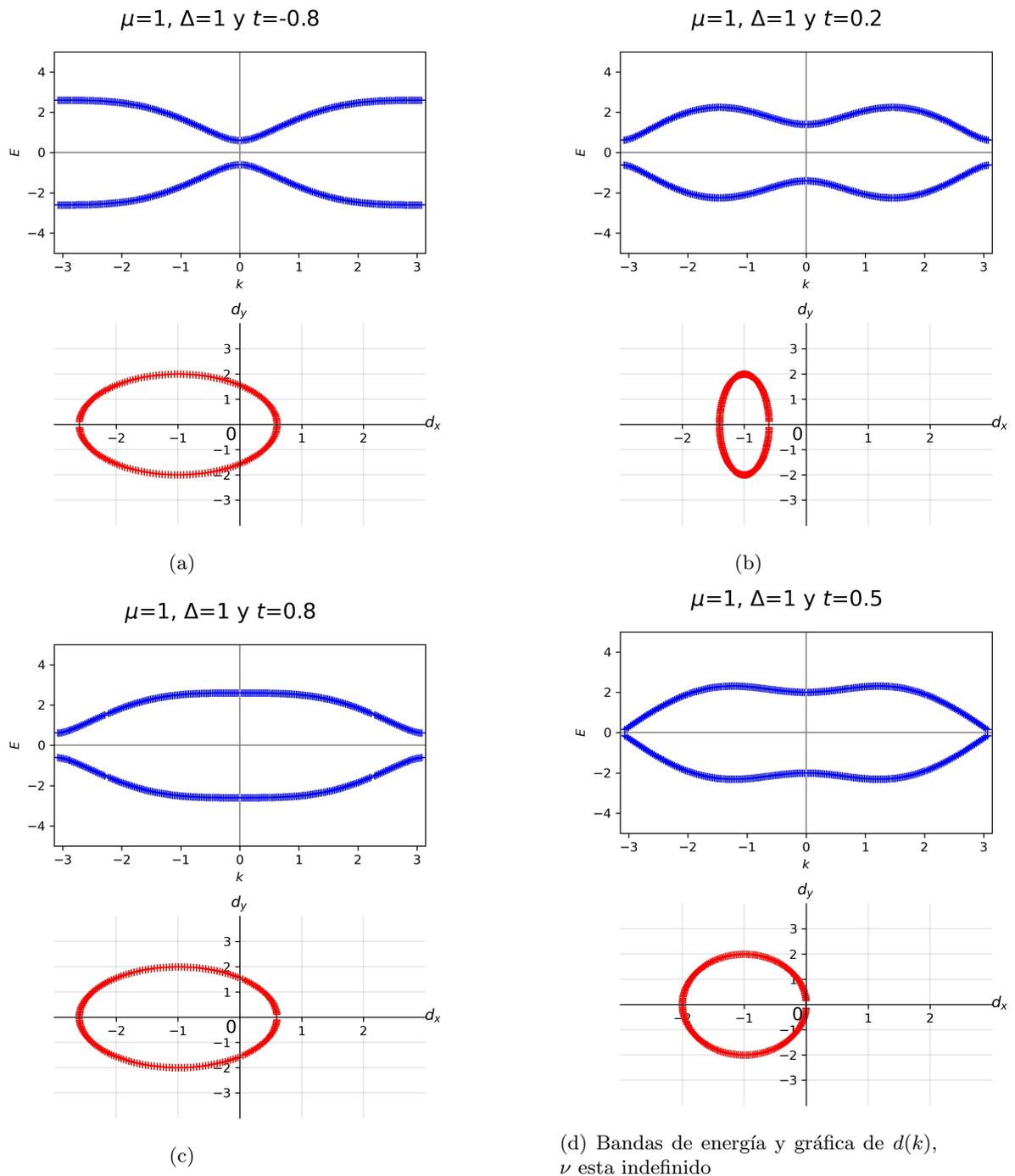


Figura 4.1: Bandas de energía y parametrización en el espacio $d(k)$ obtenidas de resolver la ecuación trascendental para $M = 300$, (a) $\nu = 1$, (b) $\nu = 0$, (c) $\nu = -1$ y (d) ν está indefinido. Con $M = 300$. Notamos como la topología de encerrar o no al origen se preserva a comparado con el modelo SSH y el SSH-E. Además el único caso donde la banda se cierra se observa para una fase indeterminada en (d).

figura (4.4) donde notamos la simetría con t y vemos que es ahora en $t = 0.5$ donde ocurre la transición de fase $\nu = 0$ a $\nu = -1$, en comparación con los estados menores a 175 que ocurría en el valor $t = -0.5$.

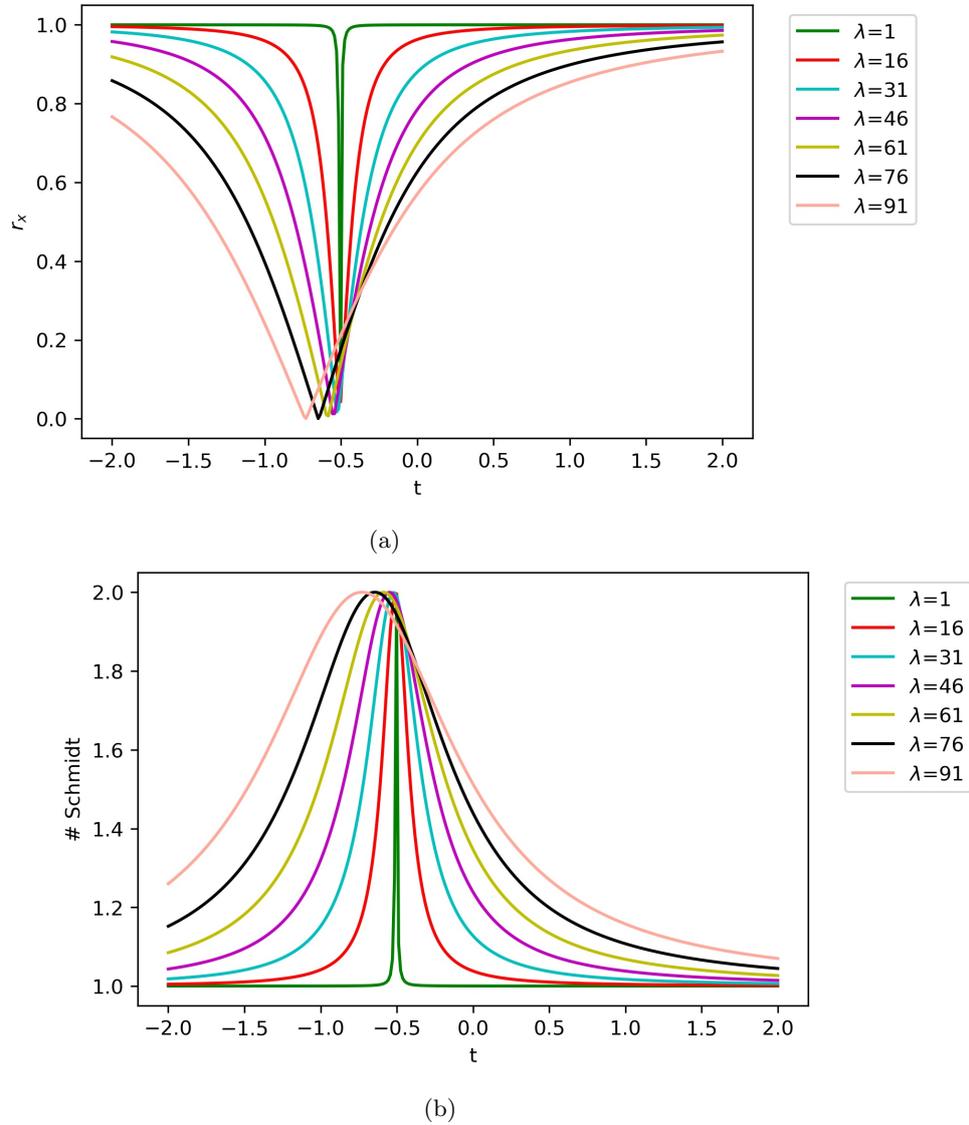
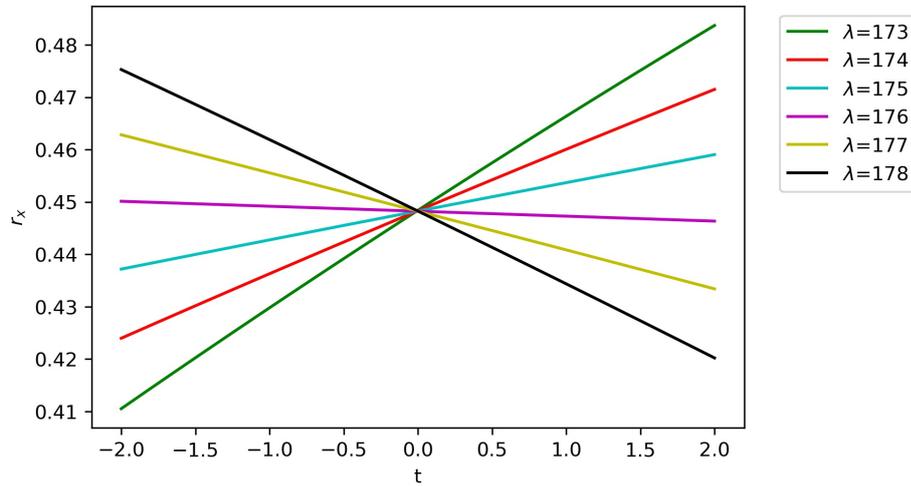
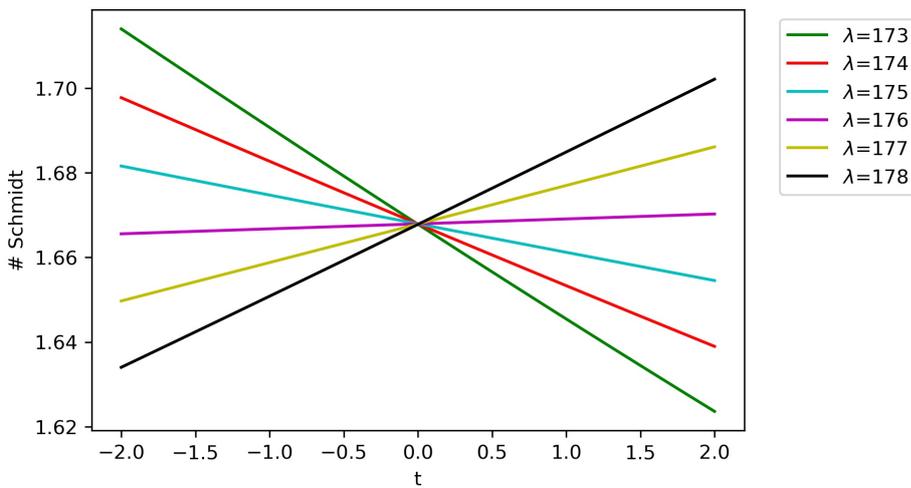


Figura 4.2: Número de Schmidt y componente r_x de Bloch para $\lambda < 175$ e función de t con $M = 350$, $\Delta = 1$ y $\mu = 1$. (a) Valor absoluto de la componente r_x del vector de Bloch, (b) Número de Schmidt para el modelo de Kitaev en función de t . Observamos la transición de fase para $t = -0.5$ de $\nu = 1$ a $\nu = 0$.

A modo de comparación utilizando los valores de k obtenidos de la ecuación trascendental con $M = 350$, $\Delta = 1$ y $\mu = 1$, podemos calcular las energías de cada uno de los estados y observar su comportamiento. Esto se ve en la figura (4.5), donde para las mismas tres regiones de λ descritas anteriormente podemos observar un comportamiento similar. Es decir, en (a) tenemos $\lambda < 175$, existe un mínimo en $t = -0.5$ lugar donde ocurre la transición, mientras que en (b) para los estados cercanos a los de borde y los de borde se sigue teniendo un comportamiento lineal, por último para (c) están los estados con $\lambda > 175$ y del mismo modo que con el número de Schmidt y el valor absoluto de la componente r_x ocurre un mínimo en $t = 0.5$, lugar donde ocurre una transición de fase topológica.



(a)



(b)

Figura 4.3: Número de Schmidt y componente r_x de Bloch para $\lambda = 173, 174, 175, 176, 177, 178$, donde $\lambda = 175, 176$ son los estados de borde en función de t para $M = 350$, $\Delta = 1$ y $\mu = 1$. (a) Valor absoluto de la componente r_x del vector de Bloch del modelo de Kitaev (b) Número de Schmidt para el modelo de Kitaev en función de t . La relación tanto de la componente r_x como para el número de Schmidt es lineal.

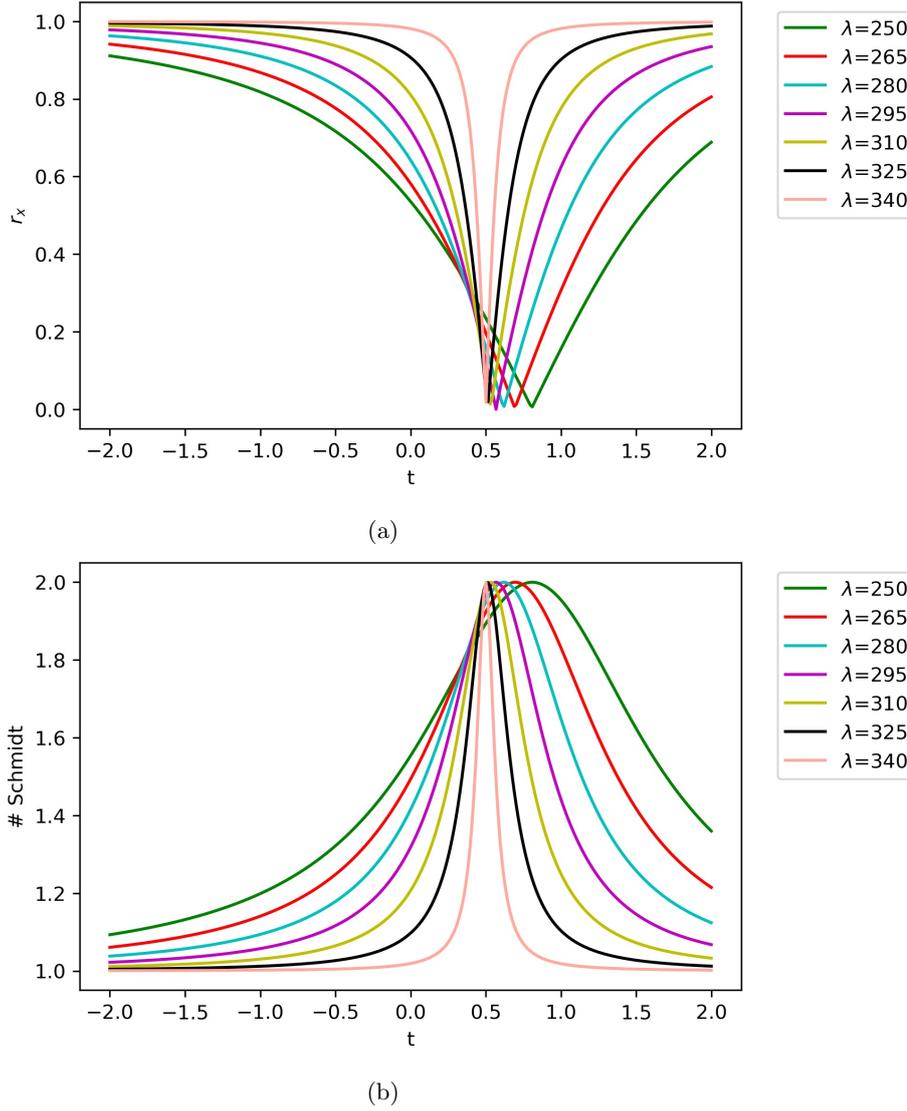


Figura 4.4: Número de Schmidt y componente r_x de Bloch para $\lambda > 175$ para $M = 350$, $\Delta = 1$ y $\mu = 1$. (a) Valor absoluto de la componente r_x del vector de Bloch en función del parámetro t para el modelo de Kitaev, (b) Número de Schmidt para el modelo de Kitaev en función de t .

4.3. Susceptibilidad lineal

Utilizando la ecuación (2.53) y la representación de las matrices de Pauli en la base $|u_{k,\tau}\rangle$ que corresponde al sistema cdpi del sistema termalizado, donde cada una de las eigenfunciones que conforman la base se encontró al resolver la ecuación trascendental (3.12) y utilizar las M soluciones de k . Se calculó para $M = 15$, $\Delta = 1$ y $\mu = 1$ la parte imaginaria de la susceptibilidad lineal. Esto para las tres regiones de fase $\nu = -1, 0, 1$. En la figura (4.6) vemos el comportamiento que sigue la susceptibilidad χ_{xx} respecto a la temperatura en una región del espacio paramétrico donde el *Winding number* es menos uno, observamos como el máximo de la amplitud disminuye conforme aumenta la temperatura. Esto quiere decir que a medida que el sistema se termaliza y los estados son igualmente ocupados por la ergodicidad del sistema, la susceptibilidad disminuye. Es decir el sistema se vuelve menos sensible.

En la figura (4.7) tenemos las gráficas para la susceptibilidad lineal de todas las direcciones de perturbación (a) χ_{xx} , (b) χ_{xy} , (c) χ_{xz} , (d) χ_{yx} , (e) χ_{yy} , (f) χ_{yz} , (g) χ_{zx} , (h) χ_{zy} y (i) χ_{zz} para $M = 15$, $\Delta = 1$, $\mu = 1$ y $t = 0.2$, según las reglas de selección de fase, tenemos $\nu = 0$, notemos que en la dirección xy y yx la magnitud es despreciable en comparación de las otras direcciones lo cuál concuerda con el hecho de que el entrelazamiento, es decir el número de Schmidt no dependía de la dirección en y , es decir la componente r_y en el vector de Bloch es cero. Tomando

en cuenta la relación que tenemos entre la susceptibilidad y el cuantificador tipo Fisher, nosotros podríamos tomar las 9 direcciones de la susceptibilidad lineal y realizar la integración de estas curvas, con ellas podríamos obtener el cuantificador tipo Fisher de la no clasicidad del sistema. Esto es relevante ya que esta sería una manera experimental de obtener este cuantificador a través de la medición de la susceptibilidad. Notemos que en el límite cuando la temperatura es baja en la ecuación (3.76) la tangente hiperbólica se vuelve uno y en esencia la susceptibilidad representa la no clasicidad del sistema, es más el número de transiciones que vemos en las figuras (4.7) nos indicará la cantidad de información tipo discordia del sistema. Es interesante también notar que la única dirección donde se anula la susceptibilidad es en xy y yx , esto nos habla de la complejidad y riqueza que existen en todas las direcciones de perturbación, siendo un sistema complejo y que la no clasicidad no solo proviene de los ejes principales, así como fue descrito en el artículo Philipp Hauke, et. al [1], demostrando la generalidad y poder de nuestro acercamiento.

Para la figura (4.8) tenemos el mismo análisis anterior, solo que para $t = 0.8$, en este caso estamos en una región de fase topológica con $\nu = -1$, mientras que para la figura (4.9) tenemos el caso para $t = -0.8$, en este caso tendremos $\nu = 1$. Vemos que los comportamientos son parecidos en las tres regiones de fase topológica, sin embargo las transiciones cambian de lugar, pero el comportamiento es similar. Podemos de nueva cuenta observar cualitativamente cuál de las direcciones tiene un mayor aporte a la no clasicidad del sistema por el número de transiciones que posee. En cualquiera de los tres casos siempre podemos utilizar la relación directa de la susceptibilidad con el cuantificador tipo Fisher, sin embargo se calculó explícitamente este cuantificador y se presenta en la siguiente sección.

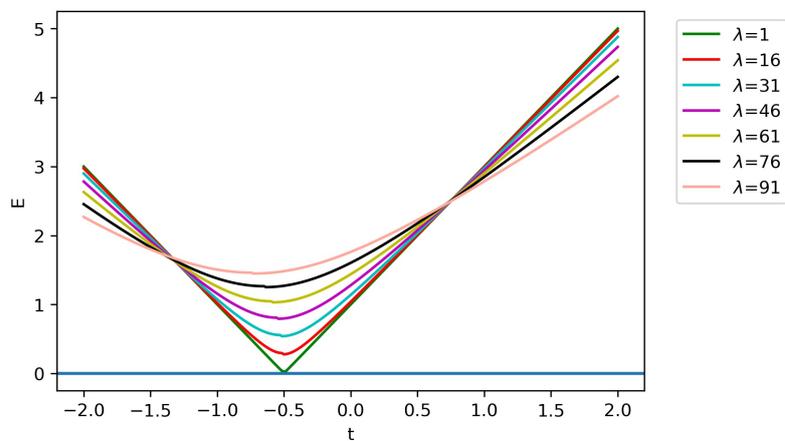
4.4. Discordia tipo Fisher

Se calculó el cuantificador tipo Fisher visto en la ecuación (2.89) al optimizar la matriz W de la ecuación (2.88), esto utilizando las expresiones de los elementos de matriz de los operadores de Pauli que hallamos en el capítulo anterior. Se hizo para $M = 15$ con parámetros $\Delta = 1$ y $\mu = 1$. En las figuras (4.10) y (4.11) tenemos las gráficas para el eigenvalor mínimo de la matriz W en función del parámetro t . La primera es para $T = 0.77$ que es la temperatura a la que se tiene un máximo en el cuantificador tipo Fisher. mientras que para la segunda se tiene $T = 12$ que es una temperatura en la que ya decayó el cuantificador. Para temperaturas bajas, tenemos dos picos bien definidos en regiones cercanas a 0.6 y -0.6 , esto creemos que es debido a que es cerca de esa región donde ocurren las transiciones de fase topológicas, creando así máximos en la discordia. En el caso para una región con temperatura mayor, no se observa el mismo comportamiento, ya que los picos no son tan bien definidos y la amplitud se mucho menor. Cabe mencionar que en la región de $t < 0$ se tiene ruido que proviene del computo y ruido numérico del programa.

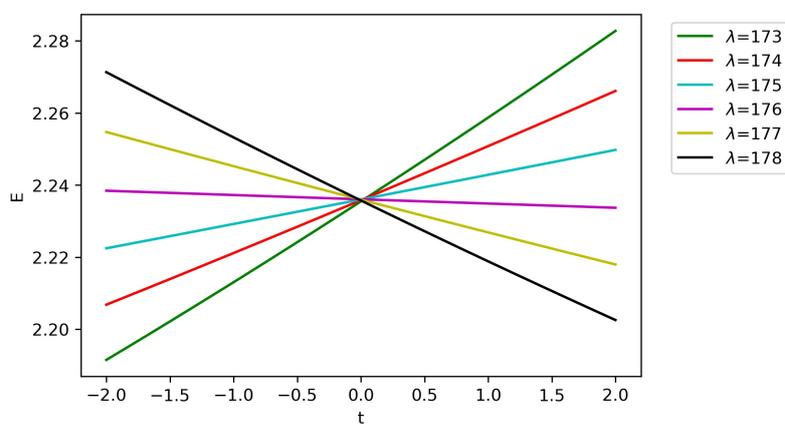
También se graficó variando la temperatura y se calcularon cuatro casos, cada uno para distintos valores de t , en estos casos podemos ver las tres regiones de fase topológica. Lo anterior lo podemos ver en la figura (4.12), en esta vemos cuatro curvas, la curva verde se realizó para $t = 0.68$, este es donde la discordia es máxima como fue visto en la figura(4.10), en esta región tenemos *Winding number* $\nu = -1$, sin embargo para la curva morada tenemos $t = 0.8$ con $\nu = -1$, vemos que poseen el mismo comportamiento y la misma fase topológica los dos casos anteriores, sin embargo la amplitud es mayor para el caso donde $t = 0.68$, que es el valor donde hallamos un máximo al graficar el cuantificador en función de t . Para la curva azul se tiene $t = -0.8$ estando en la región con $\nu = 1$, la amplitud es del mismo orden que el caso anterior. Por último para la curva roja se realizó con $t = 0.2$, teniendo $\nu = 0$ fase nula, sin embargo es ahora evidente que no solo la amplitud cambió sino también el ancho y la forma de la curva, notamos como la velocidad de decaimiento es mayor para la región sin fase topológica. Esto nos indica que la fase sigue siendo una propiedad muy útil en la caracterización de los sistemas.

A su vez, observemos que es en la región de temperaturas pequeñas es donde obtenemos un máximo de discordia, es decir es la región con mayores correlaciones cuánticas, estas correlaciones provienen de los estados con eigenenergía mas baja. Pues como vimos con el número de Schmidt, son los estados de energía mas baja y los estados de borde los que proporcionan un mayor entrelazamiento y por ende una mayor cantidad de información cuántica. Podemos observar a temperaturas altas donde todos los eigenestados tienden a tener la misma probabilidad de estar ocupados, estas correlaciones desaparecen y por lo tanto el cuantificador tipo Fisher decrece. En cuanto a la fase topológica lo que podemos aseverar es que en regiones con fases topológicas se

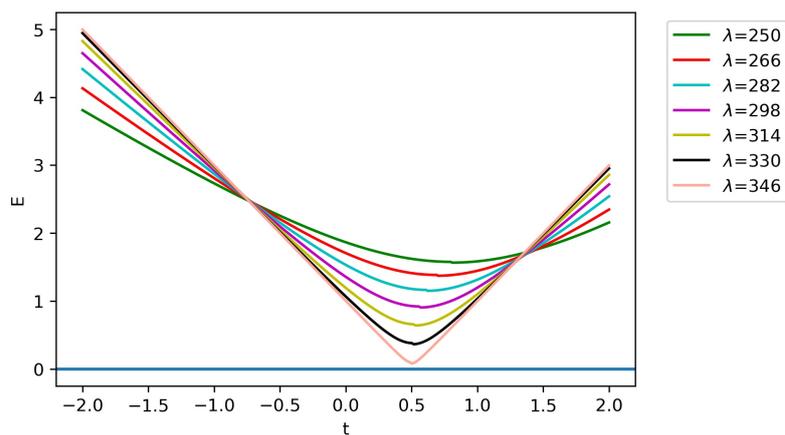
define claramente un comportamiento de máximo y un perfil de decaimiento igual, en contraste con la región sin fase topológica.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.5: Energías en función de t para $M = 350$, $\mu = 1$, $\Delta = 1$, (a) Primero estados de energía, (b) Estados cercanos a los de borde y (c) Estados con energía mayor. Notamos la simetría en las transiciones.

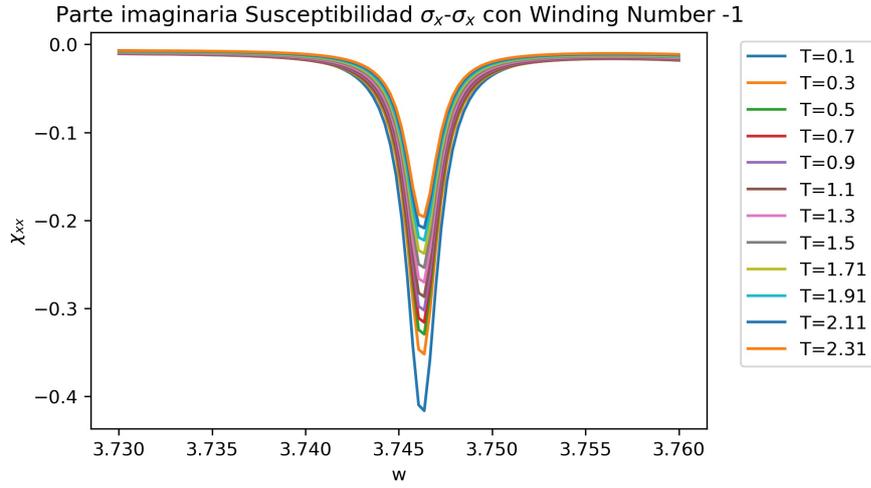


Figura 4.6: Parte imaginaria de χ_{xx} en función de la frecuencia ω

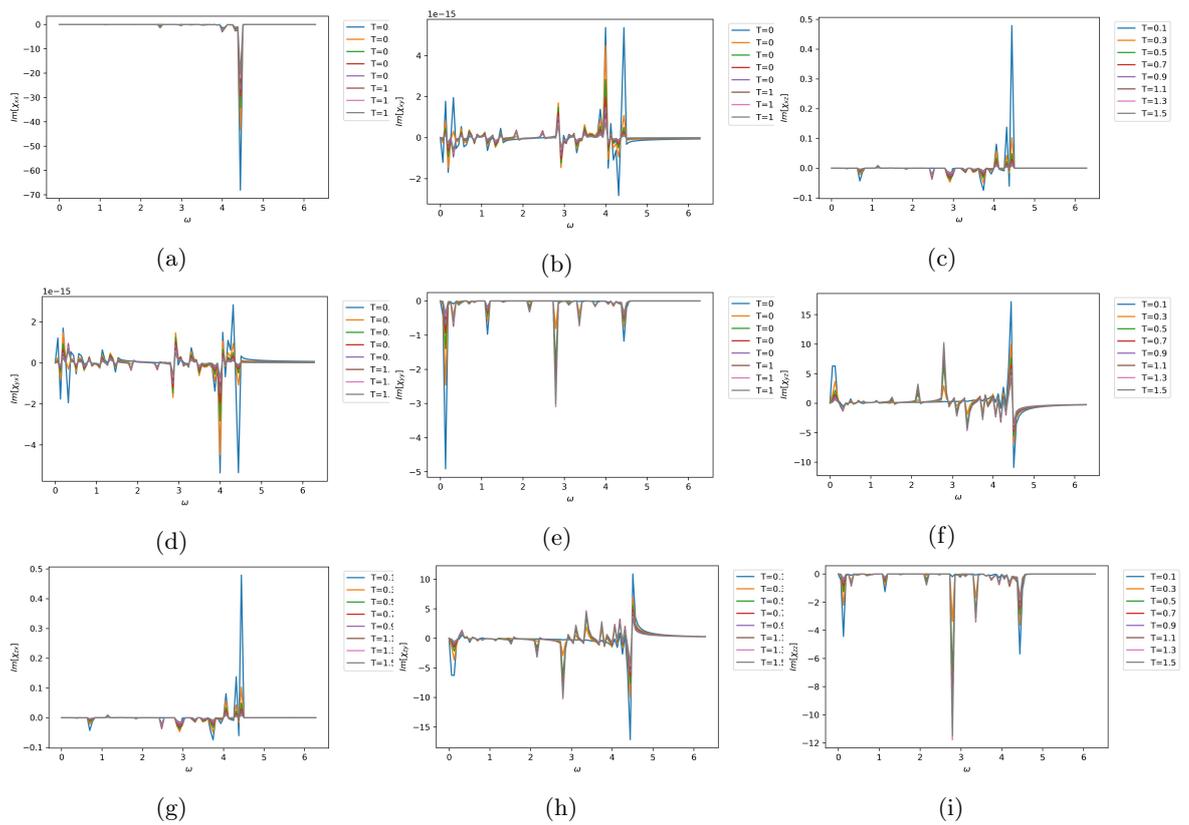


Figura 4.7: Susceptibilidad lineal en todas las direcciones de perturbación (a) χ_{xx} , (b) χ_{xy} , (c) χ_{xz} , (d) χ_{yx} , (e) χ_{yy} , (f) χ_{yz} , (g) χ_{zx} , (h) χ_{zy} y (i) χ_{zz} en función de ω para distintas temperaturas, con parámetros $M = 15$, $\Delta = 1$, $\mu = 1$ y $t = 0.2$, según las reglas de selección de fase, tenemos $\nu = 0$. Cada pico representa una transición.

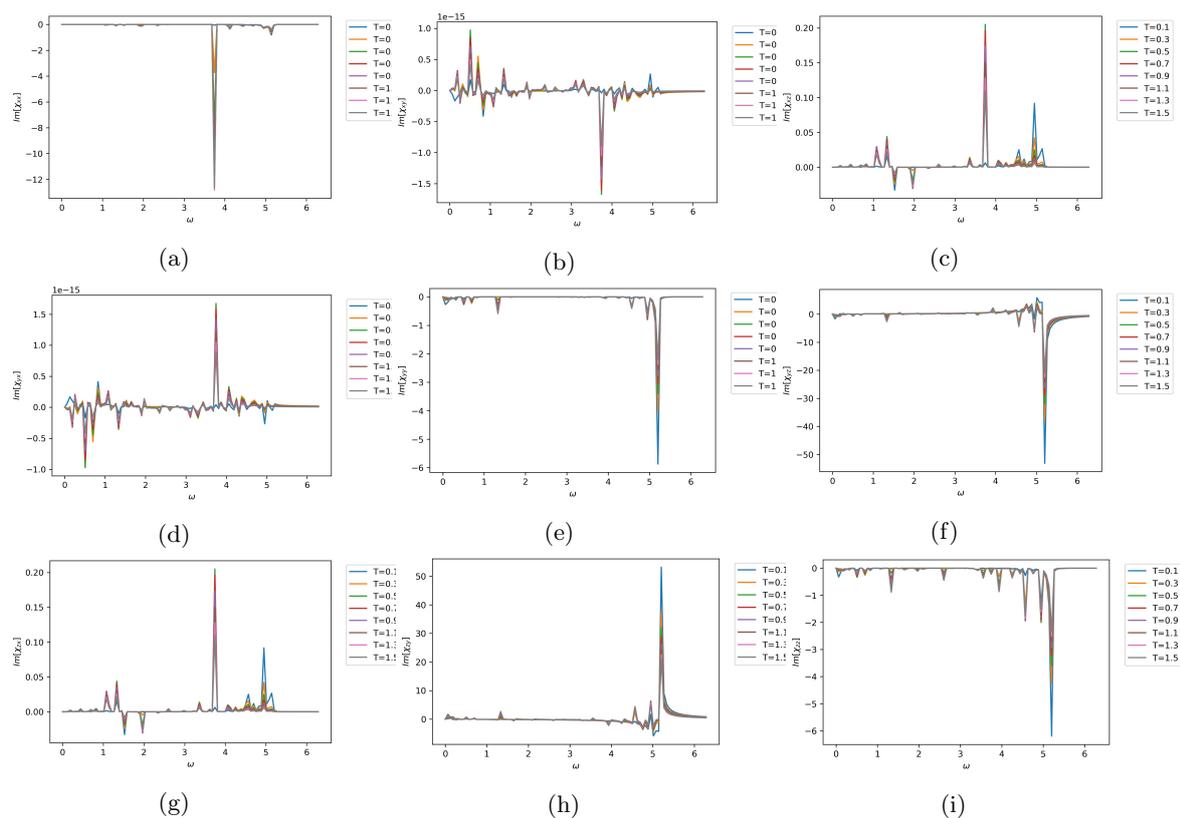


Figura 4.8: Susceptibilidad lineal en todas las direcciones de perturbación (a) χ_{xx} , (b) χ_{xy} , (c) χ_{xz} , (d) χ_{yx} , (e) χ_{yy} , (f) χ_{yz} , (g) χ_{zx} , (h) χ_{zy} y (i) χ_{zz} en función de ω para distintas temperaturas, con parámetros $M = 15$, $\Delta = 1$, $\mu = 1$ y $t = 0.8$, según las reglas de selección de fase, tenemos $\nu = -1$. Cada pico representa una transición.

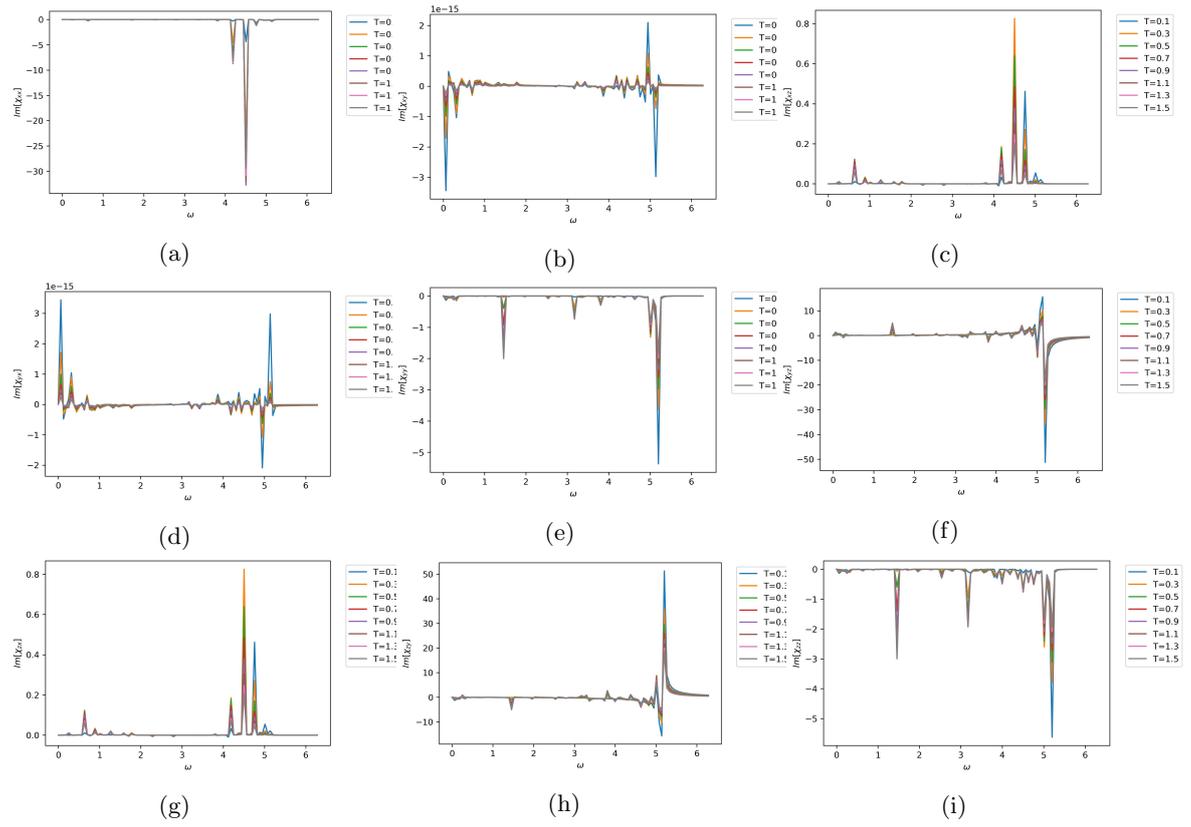


Figura 4.9: Susceptibilidad lineal en todas las direcciones de perturbación (a) χ_{xx} , (b) χ_{xy} , (c) χ_{xz} , (d) χ_{yx} , (e) χ_{yy} , (f) χ_{yz} , (g) χ_{zx} , (h) χ_{zy} y (i) χ_{zz} en función de ω para distintas temperaturas, con parámetros $M = 15$, $\Delta = 1$, $\mu = 1$ y $t = -0.8$, según las reglas de selección de fase, tenemos $\nu = 1$. Cada pico representa una transición.

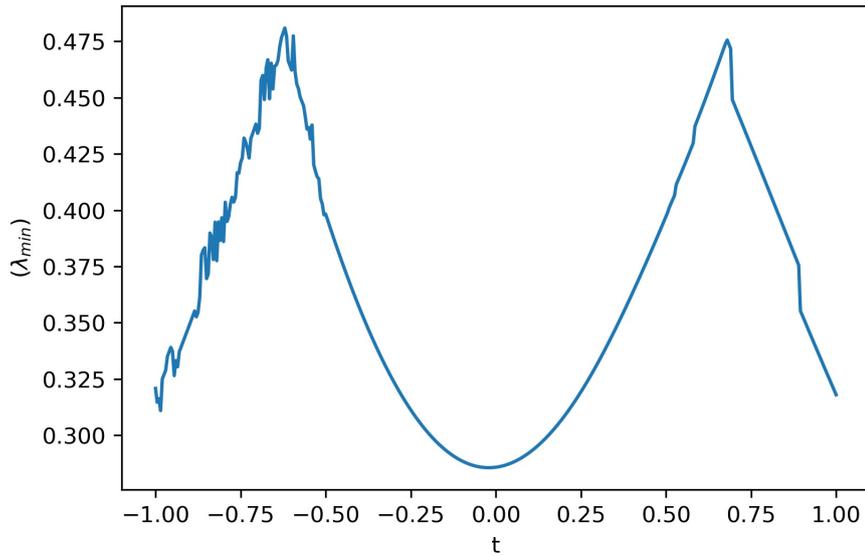


Figura 4.10: Cuantificador tipo Fisher en función del parámetro t , para temperatura $T = 0.77$, con $M = 15$, $\mu = 1$ y $\Delta = 1$.

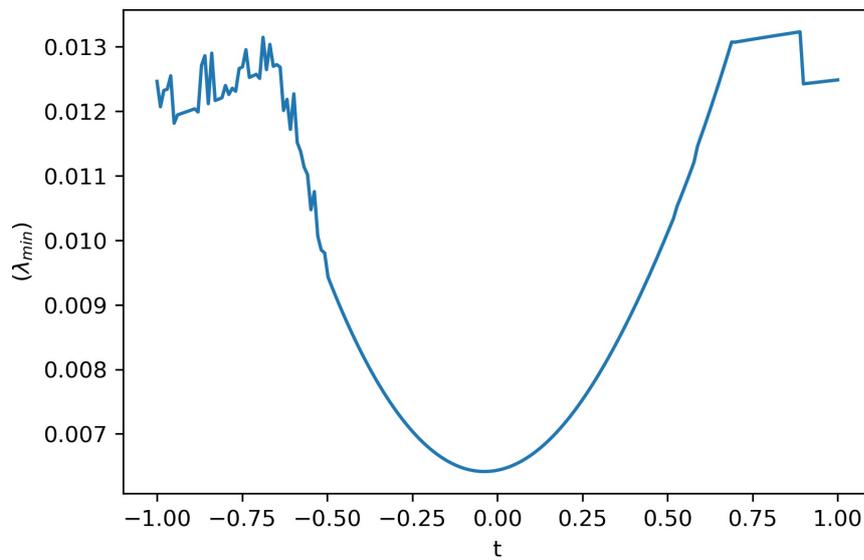


Figura 4.11: Cuantificador tipo Fisher en función del parámetro t , para temperatura $T = 15$, con $M = 15$, $\mu = 1$ y $\Delta = 1$.

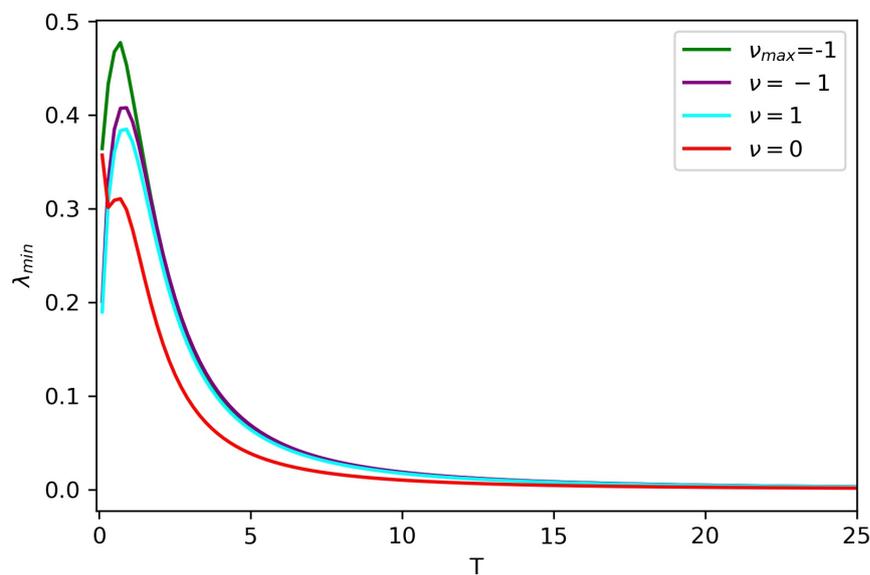


Figura 4.12: Cuantificador tipo Fisher en función de la temperatura, para distintos valores de t con $M = 15$, $\mu = 1$ y $\Delta = 1$. En verde tenemos $t = 0.68$, que es el máximo visto en la figura (4.10), con $\nu = -1$. En morado tenemos $t = 0.8$, una región alejada del máximo pero igual con $\nu = -1$. En azul tenemos $t = -0.8$, con $\nu = 1$ y en rojo tenemos $t = 0.2$ con $\nu = 0$. Se nota los cambios en la amplitud y en el decaimiento dependiendo de la fase topológica y la selección del parámetro t .

Capítulo 5

Conclusiones y Trabajo a Futuro

En el texto se logra motivar, bajo el paradigma de la computación cuántica y el estudio de la metrología cuántica, el porqué estudiar modelos de aislantes topológicos así como sus correlaciones cuánticas es importante y de interés. Dando lugar así, a la discusión de los diferentes modelos, su caracterización y el estudio de sus propiedades que forman parte de los resultados de esta tesis. Se presentan a continuación las conclusiones al respecto.

Se presentaron el modelo SSH, SSH-E y el modelo de Kitaev. Se expone su caracterización a través del estudio de los Hamiltonianos de los sistemas, sus eigenenergías y sus fases topológicas. Se encontró la equivalencia entre el modelo SSH-E y el modelo de Kitaev. Este resultado no está reportado en la literatura, lo cual es de importancia, pues permite la utilización de herramientas y trabajos previos para uno y otro modelo. Se encuentran las eigenfunciones y eigenvalores del modelo de Kitaev, luego se plantean las condiciones de frontera de paredes infinitas (cdpi) e igualmente se encuentran expresiones analíticas para las funciones de onda, la matriz de densidad del sistema cdpi, así como el *Winding Number* que es una fase topológica del sistema. Estos resultados buscan modelar sistemas más realistas, dejando un precedente para futuros trabajos que busquen lo mismo. Debe mencionarse que el reto que representó encontrar las expresiones analíticas fue considerable, así como su estudio a través de métodos numéricos, ya que la gran cantidad de recursos computacionales requeridos volvía lento el estudio del sistema.

Se encontraron expresiones analíticas para el número de Schmidt del sistema cdpi y se encuentra un comportamiento máximo en el entrelazamiento del sistema en las regiones de transiciones de fase topológicas. Estos resultados permiten crear una herramienta para profundizar en el estudio de correlaciones cuánticas en sistemas cdpi en el contexto del número de Schmidt siendo utilizado como indicador de entrelazamiento. A su vez en una aproximación para un tamaño del sistema $M \gg 1$ encontramos que el número de Schmidt, es decir el entrelazamiento del sistema es función de la fase del mismo, teniendo un comportamiento cosenoidal. Encontramos entonces que hay un fenómeno de tamaño finito en el sistema. Estos fenómenos son interesantes y entran en trabajo a futuro como una posible rama de investigación.

Se calculó analíticamente y numéricamente el tensor de susceptibilidad magnética lineal pseudo-espín-pseudoespín (intracelda) del modelo de Kitaev cdpi termalizado, encontrando los elementos de matriz de los operadores de Pauli en la base del sistema, observando que el sistema es no trivial, ya que posee información en todas las direcciones de perturbación. Se calculó analíticamente y numéricamente el cuantificador tipo Fisher para el modelo de Kitaev cdpi termalizado encontrando un comportamiento de máximo en función de la temperatura y de los parámetros del sistema. Se encontró una relación explícita entre el tensor de susceptibilidad y el cuantificador tipo Fisher generalizando el trabajo de Philipp Hauke, et.al [1]. Esto nos permite llegar un paso más allá en el estudio del enredamiento cuántico en sistemas de aislantes topológicos. Al igual que se mencionó antes, el análisis numérico del tensor de susceptibilidad magnética lineal fue en gran medida lo que tomó más tiempo y esfuerzo en el transcurso del desarrollo de este trabajo.

Como trabajo a futuro se piensa estudiar una fase topológica para el sistema termalizado, como lo es la fase de Uhlman. Esta caracterizaría el sistema topológicamente y se buscaría compararla con el cuantificador tipo Fisher pensando en encontrar una relación entre la topología y la no clasicidad del sistema. Se busca también estudiar a profundidad los estados de borde del sistema, así como su evolución. Al lograrse construir satisfactoriamente un cuantificador de la

información no clásica, a futuro esta en nuestros intereses aplicarlo a otros sistemas de mayor complejidad y no necesariamente en el ámbito de estado sólido.

Apéndice A

Identidades trigonométricas

La demostración de las ecuaciones (3.23) y (3.24) se lleva a cabo utilizando el concepto de serie telescópica, solo los términos extremos de la serie contribuyen, siendo que los términos internos se cancelan todos entre sí. Recordemos que:

$$\sin(\alpha + \beta) = \sin(\alpha)\cos(\beta) + \sin(\beta)\cos(\alpha) \quad (\text{A.1})$$

$$\sin(\alpha - \beta) = \sin(\alpha)\cos(\beta) - \sin(\beta)\cos(\alpha) \quad (\text{A.2})$$

$$\Rightarrow \sin(\alpha + \beta) - \sin(\alpha - \beta) = 2\cos(\alpha)\sin(\beta) \quad (\text{A.3})$$

Sea

$$C = \sum_{n=1}^M \cos(a + nd) \quad (\text{A.4})$$

Multiplicamos ambos lados por $2\sin(\frac{d}{2})$

$$2\sin(\frac{d}{2})C = \sum_{n=1}^M 2\sin(\frac{d}{2})\cos(a + nd) \quad (\text{A.5})$$

Esto por las ecuaciones en (A.1) identificando $\alpha = d/2$ y $\beta = a + nd$, tenemos que:

$$2\sin(\frac{d}{2})C = \sum_{n=1}^M \sin(a + (n + \frac{1}{2})d) - \sin(a + (n - \frac{1}{2})d)$$

Escribimos los términos de la suma del lado derecho,

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^M \sin(a + (n + \frac{1}{2})d) - \sin(a + (n - \frac{1}{2})d) = \\ \cancel{\sin(a + \frac{3}{2}d)} - \underbrace{\sin(a + \frac{1}{2}d)} + \\ + \cancel{\sin(a + \frac{5}{2}d)} - \cancel{\sin(a + \frac{3}{2}d)} + \\ + \cancel{\sin(a + \frac{7}{2}d)} - \cancel{\sin(a + \frac{5}{2}d)} + \dots \\ \dots + \cancel{\sin(a + (M - \frac{1}{2})d)} - \cancel{\sin(a + (M - \frac{3}{2})d)} + \\ + \underbrace{\sin(a + (M + \frac{1}{2})d)} - \cancel{\sin(a + (M - \frac{1}{2})d)} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Los únicos términos restantes son el segundo y el penúltimo.

$$2\sin\left(\frac{d}{2}\right)C = \sum_{n=1}^M \sin\left(a + \left(n + \frac{1}{2}\right)d\right) - \sin\left(a + \left(n - \frac{1}{2}\right)d\right) = \sin\left(a + \left(M + \frac{1}{2}\right)d\right) - \sin\left(a + \frac{1}{2}d\right) \quad (\text{A.7})$$

Ahora aplicamos la identidad $\sin(\alpha + \beta) - \sin(\alpha - \beta) = 2\cos(\alpha)\sin(\beta)$ al inverso, resolvemos para α y β las ecuaciones $\alpha + \beta = a + (M + 1/2)d$ y $\alpha - \beta = a + d/2$. Obteniendo que:

$$2\sin\left(\frac{d}{2}\right)C = 2\cos\left(a + \left(1 + M\right)\frac{d}{2}\right)\sin\left(\frac{Md}{2}\right) \quad (\text{A.8})$$

Despejamos para C y finalmente obtenemos que:

$$\sum_{n=1}^M \cos(a + nd) = \frac{\sin\left(\frac{Md}{2}\right)}{\sin\left(\frac{d}{2}\right)} \cos\left(a + \left(M + 1\right)\frac{d}{2}\right) \quad (\text{A.9})$$

La prueba para la suma de senos es completamente análoga.

Bibliografía

- [1] P. Hauke, M. Heyl, L. Tagliacozzo, and P. Zoller, “Measuring multipartite entanglement through dynamic susceptibilities,” vol. 12, no. 8, pp. 778–782.
- [2] M. Mohseni, P. Read, H. Neven, S. Boixo, V. Denchev, R. Babbush, A. Fowler, V. Smelyanskiy, and J. Martinis, “Commercialize quantum technologies in five years,” vol. 543, no. 7644, pp. 171–174.
- [3] J. P. Dowling and G. J. Milburn, “Quantum technology: the second quantum revolution,” vol. 361, no. 1809, pp. 1655–1674.
- [4] I. Georgescu and F. Nori, “Quantum technologies: an old new story,” vol. 25, no. 5, pp. 16–17.
- [5] D. Aasen, M. Hell, R. V. Mishmash, A. Higginbotham, J. Danon, M. Leijnse, T. S. Jespersen, J. A. Folk, C. M. Marcus, K. Flensberg, and J. Alicea, “Milestones toward majorana-based quantum computing,” vol. 6, no. 3, p. 031016.
- [6] S. D. Sarma, M. Freedman, and C. Nayak, “Majorana zero modes and topological quantum computation,” vol. 1, no. 1, p. 15001.
- [7] T. O’Brien, P. Rožek, and A. Akhmerov, “Majorana-based fermionic quantum computation,” vol. 120, no. 22, p. 220504.
- [8] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, *A Short Course on Topological Insulators*, vol. 919 of *Lecture Notes in Physics*. Springer International Publishing.
- [9] O. Viyuela, A. Rivas, and M. A. Martin-Delgado, “Uhlmann phase as a topological measure for one-dimensional fermion systems,” Publisher: arXiv Version Number: 2.
- [10] P. Delplace, D. Ullmo, and G. Montambaux, “Zak phase and the existence of edge states in graphene,” vol. 84, no. 19, p. 195452.
- [11] Y. Kanada-En’yo, “Entanglement entropy and schmidt number as measures of delocalization of clusters in one-dimensional nuclear systems,” vol. 2015, no. 4.
- [12] J. Audretsch, *Entangled systems: new directions in quantum physics*. Wiley-VCH.
- [13] H. Ollivier and W. H. Zurek, “Quantum discord: A measure of the quantumness of correlations,” vol. 88, no. 1, p. 017901.
- [14] L. Henderson and V. Vedral, “Classical, quantum and total correlations,” vol. 34, no. 35, pp. 6899–6905.
- [15] S. Kim, L. Li, A. Kumar, and J. Wu, “Characterizing nonclassical correlations via local quantum fisher information,” vol. 97, no. 3, p. 032326.
- [16] D. Girolami, T. Tufarelli, and G. Adesso, “Characterizing nonclassical correlations via local quantum uncertainty,” vol. 110, no. 24, p. 240402.
- [17] R. Muthuganesan and V. K. Chandrasekar, “Quantum fisher information and skew information correlations in dipolar spin system,” vol. 96, no. 12, p. 125113.
- [18] N. Leumer, M. Marganska, B. Muralidharan, and M. Grifoni, “Exact eigenvectors and eigenvalues of the finite kitaev chain and its topological properties,” vol. 32, no. 44, p. 445502.

- [19] S. M. Girvin and K. Yang, *Modern Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 1 ed.
- [20] R. Grobe and et al, “Measure of electron-electron correlation in atomic physics,” vol. 27, pp. L503–L508.
- [21] N. Sandulescu and G. F. Bertsch, “Accuracy of BCS-based approximations for pairing in small fermi systems,” vol. 78, no. 6, p. 064318.
- [22] C. K. Law and J. H. Eberly, “Analysis and interpretation of high transverse entanglement in optical parametric down conversion,” vol. 92, no. 12, p. 127903.
- [23] N. Pottier, *Nonequilibrium statistical physics: linear irreversible processes*. Oxford graduate texts, Oxford University Press. OCLC: ocn368051042.
- [24] P. Bogaert and D. Girolami, “Metrological measures of non-classical correlations,” in *Lectures on General Quantum Correlations and their Applications* (F. F. Fanchini, D. d. O. Soares Pinto, and G. Adesso, eds.), pp. 159–179, Springer International Publishing. Series Title: Quantum Science and Technology.
- [25] M. Z. Hasan and C. L. Kane, “*Colloquium* : Topological insulators,” vol. 82, no. 4, pp. 3045–3067.
- [26] J. C. Budich and B. Trauzettel, “From the adiabatic theorem of quantum mechanics to topological states of matter: From the adiabatic theorem of quantum mechanics to topological states of matter,” vol. 7, no. 1, pp. 109–129.
- [27] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. Cambridge University Press.
- [28] C. Li and A. Miroshnichenko, “Extended SSH model: Non-local couplings and non-monotonous edge states,” vol. 1, no. 1, pp. 2–16.