



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
**POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS**

**FASES GEOMÉTRICAS Y NO CLASICIDAD TIPO DISCORDIA CUÁNTICA  
EN SISTEMAS MIXTOS DE AISLANTES TOPOLÓGICOS**

**TESIS**  
**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:**  
**MAESTRO EN CIENCIAS FÍSICAS**

**PRESENTA:**  
**LEONARDO ANTONIO NAVARRO LABASTIDA**

**DIRECTOR DE TESIS**  
**DR. FERNANDO ROJAS ÍÑIGUEZ, CNYN-UNAM**

**COMITÉ TUTORAL**  
**DR. ERNESTO COTA ARAIZA, CNYN-UNAM**  
**DR. JESUS MAYTORENA CORDOVA, CNYN-UNAM**

**ENSENADA, B.C., MÉXICO, JUNIO 2021.**



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.



**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.

## Resumen

De la tesis de **Leonardo Antonio Navarro Labastida**, presentada como requisito parcial para la obtención del grado de Maestro en Ciencias Físicas.

### **Fases geométricas y no clasicidad tipo discordia cuántica en sistemas mixtos de aislantes topológicos**

Resumen aprobado por:

---

Dr. Fernando Rojas Iñiguez  
Director de Tesis

En este trabajo de investigación se estudia el entrelazamiento y las correlaciones cuánticas como métricas del grado de no clasicidad de sistemas mixtos, y se analiza su conexión intrínseca con las fases geométricas o polarización eléctrica, en el modelo SSH simple y extendido. El entrelazamiento del sistema puro se calcula mediante el número de Schmidt y la fase geométrica a partir de la fase de Berry, por otro lado, en el ensamble termodinámico se introduce la métrica optimizada de la información cuántica de Fisher como medidor del grado de no clasicidad y en este caso la fase geométrica se cuantifica a partir de la matriz de densidad de estados mezcla. Además, se busca una relación con algunas cantidades termodinámicas asociadas como la entropía y el calor específico. En el sistema puro se encontró una correspondencia directa con las transiciones de fase topológicas, ya que el número de Schmidt presenta puntos críticos justo en los cambios de fase geométrica, también se observó que el SSH extendido tiene un mayor grado de entrelazamiento que el SSH simple, ya que el hopping extra introducido a segundos vecinos genera una mayor interacción entre sitio-átomo en el que el electrón se puede encontrar. En cambio, en el ensamble termodinámico se tuvo una relación entre la métrica de Fisher y la polarización eléctrica, de tal manera que en la región topológica hay más correlaciones cuánticas, por lo tanto, esto genera una mayor robustez y protección en la información, debido a efectos de ruido térmico.

Palabras clave: **Correlaciones cuánticas, fases geométricas, ensamble termodinámico, entrelazamiento, SSH.**

## **Abstract**

Of the thesis presented by **Leonardo Antonio Navarro Labastida**, in partial fulfillment of the requirements of the degree of Master in Physical Sciences.

### **Geometrical phases and non-classicality type quantum discord in mixtures systems of topological insulators**

Abstract approved by:

---

Dr. Fernando Rojas Iñiguez  
Thesis Director

In this work we study entanglement and quantum correlations as metrics of the degree of non-classicity in mixtures systems and is analyzed their intrinsic connection with geometric phases or electric polarization, in the SSH model simple and extended. Entanglement in pure system is calculated by the Schmidt number and geometric phase from the Berry phase, on the other hand, in thermal ensemble the optimized quantum Fisher information is introduced as quantifier of non-classicity and in the case of the geometric phase this is calculated from the density matrix of mixed states. In addition, a relationship is sought with some associated thermodynamic quantities such as entropy and specific heat. In the pure system a direct correspondence with the topological phase transitions was found since the Schmidt number presented critical points just in the geometric phase changes, it was also observed that the extended SSH has a higher degree of entanglement than the simple SSH because of the extra hopping introduced to seconds neighboring generates a greater interaction between the site-atom in which the electron can be stay. On the other hand, in the thermal ensemble there was a relationship between the Fisher metric and the electrical polarization in such a way that in the topological region there are more quantum correlations therefore this generates more robustness and protection in the information due to thermal effects.

Keywords: **Quantum correlations, geometric phases, thermal ensemble, entanglement, SSH.**

## **Dedicatoria**

*Para Elizabeth, por todo tu apoyo y compañía durante este trabajo.*

## **Agradecimientos**

Al CONACYT por brindarme una beca de posgrado nacional y así poder realizar la maestría.

Al CNyN-UNAM por permitirme formar parte de la comunidad estudiantil.

Agradezco al Dr. Fernando Rojas por su tutoría a lo largo del desarrollo del proyecto de investigación y a mi comité tutorial por sus observaciones sobre la tesis.

A mis papás por su apoyo incondicional, brindarme un cálido hogar y por inculcarme el estudio como una forma de vida.

A mis hermanos Rene y Chuy por sus tardes de discusión sobre temas de ciencia y sus bromas.

A mis amigos, Alfredo, Patrón y Fernando, por su amistad, por esas tardes de video juegos y divertidas platicas.

A mi amor Elizabeth Mavil por brindarme su cariño, apoyo y comprensión, siendo un pilar importante en el desarrollo del presente trabajo. También por sus observaciones y correcciones.

A mis primos los Navarrocks por las buenas vivencias a lo largo de nuestra infancia.

# Índice

Resumen .....	III
Abstract .....	IV
Dedicatoria .....	V
Agradecimientos.....	VI
Introducción .....	1
<b>I. Correlaciones cuánticas</b> .....	<b>5</b>
1.1. Introducción a la información cuántica .....	5
1.1.1. Qubit y esfera de Bloch .....	6
1.1.2. Sistemas compuestos: bipartitos .....	9
1.2. Métricas de no clasicidad .....	10
1.2.1. Entrelazamiento .....	11
1.2.2. Número de Schmidt: Entrelazamiento en sistemas bipartitos puros .....	12
1.3. Correlaciones cuánticas.....	13
1.3.1. Información cuántica de Fisher optimizada .....	14
<b>II. Topología y fases geométricas</b> .....	<b>16</b>
2.1. Topología .....	16
2.1.1. Clasificación topológica y simetrías .....	17
2.1.2. Simetría quiral .....	19
2.1.3. Invariantes topológicas: Winding number .....	20
2.2. Condición de adiabaticidad y presencia de fases geométricas .....	21
2.2.1. Teorema adiabático.....	22
2.2.2. Fase de Berry .....	24
2.2.3. Fase geométrica y polarización eléctrica de Resta.....	26
2.2.4. Fase geométrica y polarización eléctrica en un ensamble.....	27
<b>III. Modelo y resultados</b> .....	<b>28</b>
3.1. Modelo Su-Schrieffer-Heeger .....	28
3.1.1. Hamiltoniano SSH simple .....	29
3.1.2. Espectro de energías SSH simple .....	30
3.1.3. Hamiltoniano del bulto SSH simple .....	31
3.1.4. Diferencia entre los estados borde y estados de bulto: Distribución de probabilidades.....	34
3.1.5. Dimerizado trivial y topológico para los estados borde .....	35
3.1.6. Correspondencia borde-bulto.....	36

3.2. Caracterización topológica en el modelo SSH simple .....	37
3.2.1. Winding number y el modelo SSH simple.....	37
3.2.2. Polarización eléctrica en el modelo SSH simple.....	39
3.3. Entrelazamiento en el modelo SSH simple .....	43
3.3.1. Condición de máximo entrelazamiento y separabilidad .....	43
3.3.2. Número de Schmidt y vector de Bloch .....	45
3.4. SSH extendido.....	50
3.4.1. Hamiltoniano SSH extendido .....	50
3.4.2. Hamiltoniano del bulto SSH extendido .....	51
3.4.3. Diferencia entre estados borde y estados del bulto en el modelo SSH extendido: Distribución de probabilidades y modos de energía.....	54
3.4.5. Entrelazamiento y polarización eléctrica en el modelo SSH extendido.....	56
3.5. Modelo SSH simple y extendido parametrizado adiabático $\vartheta$ .....	61
3.5.1. Entrelazamiento y vector de Bloch dependiente de $\vartheta$ para el modelo SSH simple y extendido ...	62
3.5.2. Polarización eléctrica dependiente de $\vartheta$ para el modelo SSH simple y extendido .....	68
3.6. Análisis de las amplitudes de los estados y condiciones de entrelazamiento para los modelos SSH simple, extendido y modulado $\vartheta$ .....	70
3.7. Correlaciones cuánticas: ensamble térmico .....	77
3.7.1. Variables termodinámicas y distribución de probabilidad.....	77
3.7.2. Información cuántica de Fisher optimizada y su relación con el vector de Bloch y la capacidad calorífica. ....	82
3.7.3. Fases geométricas en el ensamble térmico simple.....	88
3.7.5. SSH extendido térmico .....	90
3.7.4. Modulación paramétrica adiabática $\vartheta$ en el ensamble térmico simple y extendido.....	96
<b>IV. Conclusiones y trabajo futuro.....</b>	<b>100</b>
Apéndice.....	101
A.1. Postulados de la mecánica cuántica.....	101
A.2. Matriz de densidad .....	102
A.3. Schmidt .....	104
A.4. Ensamble Térmico .....	106
A.5. Información Cuántica de Fisher .....	107
A.6. Aproximación de amarre fuerte: SSH .....	110
A.7. Matriz densidad reducida en el análisis de las amplitudes de los estados del modelo SSH simple, extendido y modulado $\vartheta$ .....	113
Bibliografía.....	117

## Índice de Figuras

Figura 1.1. Esfera de Bloch. El estado cuántico $R$ se encuentra parametrizado por los ángulos $\theta$ y $\phi$ sobre la esfera unitaria. Los estados $0$ y $1$ se encuentran en el polo norte y sur de la esfera, respectivamente. Todo punto que cae sobre la esfera es una superposición de estos dos estados cuánticos extremos. ....	7
Figura 1.2. Sistema compuesto bipartito. Este esquema sugiere que el sistema está dividido en dos partes, A y B, cuya unión no corresponde al sistema completo. ....	9
Figura 1.3. Superposición de espines en una caja negra. La cuerda amarilla representa el entrelazamiento entre los dos posibles resultados. ....	12
Figura 2.1. Deformación topológica entre una taza y una dona .....	16
Figura 2.2. Evolución paramétrica en una trayectoria cerrada por un estado puro $ \phi(t)\rangle$ . ....	23
Figura 3.1. Modelo SSH 1D. Estructura de $N = 5$ uniceldas alternando átomos tipo $A$ (rojo) y átomos tipo $B$ (azul) en cada celda unitaria “ $m$ ” con amplitudes de transición “ $v$ ” (enlace sencillo) y “ $w$ ” (enlace doble) correspondientes a los tunelajes de intracelda e intercelda respectivamente. ....	28
Figura 3.2. Espectro de energías SSH en el espacio real Las energías dispersadas por la banda de valencia son negativas (curvas azules) y las energías dispersadas en la banda de conducción son positivas (curvas rosas). Se observa en medio de las dos bandas que existen unos estados de borde (curvas rojas) que se mantienen con energía cero para $v < w$ y que a partir de $v = w$ se separan exponencialmente, para $N = 100$ celdas unitarias y $w = 0.5$ . ....	30
Figura 3.3. Espectro de Energías del bulk SSH. En este caso se aprecia que los estados metálicos han desaparecido al usar condiciones de frontera periódicas para $N = 100$ celdas unitarias y $w = 0.5$ . ...	31
Figura 3.4. Espectro de energías en el espacio $k$ . Para el caso trivial (curva verde) $v = 0.6, w = 0.3$ , caso topológico (curva azul) $v = 0.6, w = 0.3$ y para el caso metálico (curva roja) $v = 0.5, w = 0.5$ el gap se cierra. ....	33
Figura 3.5. Distribución de probabilidades en función de la posición sobre la cadena. (a) Estado borde y (b) estado del bulk, con $v = 0.1, w = 0.5$ y $N = 40$ uniceldas. ....	34
Figura 3.6. Cadena completamente dimerizada. (a) Dimerizado trivial con $v = 1, w = 0$ y (b) dimerizado topológico con $v = 0, w = 1$ , los cuadros punteados al final de la cadena indican los estados aislados del resto, para $N = 6$ celdas unitarias. (c) y (d) representan la máxima probabilidad de localización de estos estados bordes. ....	35
Figura 3.7. Winding number en el plano $hx - hy$ . En el caso $v < w$ observamos que la trayectoria cerrada asociada encierra el punto crítico (curva roja) mientras que para $v > w$ se queda afuera este punto (curva azul), en $v = w$ se interpreta geoméricamente la singularidad (curva negra). ....	38
Figura 3.8. Fase geométrica acumulada o polarización eléctrica en el modelo SSH simple en función de las amplitudes de tuneo $v$ para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias. En la figura 3.8 (a)-(d) se presenta la polarización eléctrica para (a) el estado del bultp $E_1$ , (b) el estado del bultp $E_{10}$ , (c) el estado del bulto $E_{30}$ y (d) el estado borde $E_B$ , para todos los estados se fijó el tunelaje intercelda $w = 0.5$ . ....	41
Figura 3.9. Diagrama de fase geométrica acumulada o polarización eléctrica en el modelo SSH simple en función de las amplitudes de tuneo $v$ y $w$ , para $N = 40$ celdas unitarias. Polarización eléctrica para los estados (a) $E_1$ , (b) $E_{10}$ , (c) $E_{30}$ y (d) el estado borde $E_B$ . ....	42
Figura 3.10. Entrelazamiento o número de Schmidt en función de la amplitud de tunelaje intracelda $v$ para el sistema bipartito $\text{sitio} \otimes \text{átomo}$ del modelo SSH simple para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias. En las figuras 3.10 (a)-(d) se presentan los entrelazamientos con una amplitud de tunelaje $w = 0.5$ para los estados de bulto (a) $E_1$ , (b) $E_{10}$ , (c) $E_{30}$ y el estado borde (d) $E_B$ . ....	45
Figura 3.11. Diagrama de entrelazamiento o número de Schmidt en el modelo SSH en función de las amplitudes de tuneo $v$ y $w$ , para una cadena con $N = 40$ celdas unitarias. Entrelazamiento de formación o número de Schmidt para los estados de bulto (a) $E_1$ , (b) $E_{10}$ , (c) $E_{30}$ y el estado borde (d) $E_B$ . ....	47

Figura 3.12 Vector de Bloch en función de la amplitud de tuneo $v$ para el sistema bipartito $\text{sitio} \otimes \text{átomo}$ del modelo SSH simple para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias. En las figuras 3.11 (a)-(d) se presentan las magnitudes del vector de Bloch con un tunelaje intercelda $w = 0.5$ para los estados del bulto (a) $E_1$ , (b) $E_{10}$ , (c) $E_{30}$ y el estado borde (d) $E_B$ .	49
Figura 3.13. SSH extendido 1D. Esta cadena para $N = 6$ uniceldas va alternando átomos tipo $A$ (rojo) y átomos tipo $B$ (azul) en cada celda unitaria $m$ con amplitudes de transición $v$ (enlaces sencillos) y $w$ (enlaces dobles) correspondientes a los tunelajes intracelda e intercelda respectivamente y además tiene tunelaje “ $z$ ” a segundos vecinos con $z \geq 0$ (líneas verdes).	50
Figura 3.14. Espectro de energías SSH extendido en el espacio real. Las energías dispersadas por la banda de valencia son negativas (curvas azules) y las energías dispersadas en la banda de conducción son positivas (curvas rosas). Se observa entre las dos bandas que existen unos estados de borde (curvas rojas) que se mantienen con energía cero para $v < w + z$ , y que a partir de $v = w + z$ se separan exponencialmente para $N = 100$ celdas unitarias, $w = 0.5$ y $z = 0.3$ .	51
Figura 3.15. Espectro de Energías del bulto SSH extendido. En este caso se aprecia que los estados metálicos han desaparecido al usar condiciones de frontera periódicas para $N = 100$ celdas unitarias, $w = 0.5$ y $z = 0.3$ .	51
Figura 3.16. Espectro de energías SSH extendido en el espacio $k$ . Para el caso topológico $w > z$ (curva azul) con $v = 0.4$ , $w = 0.2$ , $z = 0.1$ y para el caso topológico $w < z$ (curva verde) con $v = 0.4$ , $w = 0.4$ , $z = 0.3$ , hay un gap abierto, sin embargo, para el caso metálico (curva roja) $v = 0.6$ , $w = 0.3$ , $z = 0.3$ el gap se cierra.	53
Figura 3.17. Distribución de Probabilidades para la cadena 1D SSH extendida. Estado borde (a) y estado de bulto (b) con parámetros $v = 0.5$ , $w = 1$ , $z = 0.3$ para $N = 40$ uniceldas.	54
Figura 3.18. Dispersión de energías en contra del número $m$ de modos de energía sobre la cadena abierta con $N=20$ celdas unitarias. Con parámetros (a) $v = 0.5$ , $w = 1$ , $z = 0$ y (b) $v = 0.5$ , $w = 1$ , $z = 0.3$ .	54
Figura 3.19. Winding number SSH extendido. Como se puede apreciar las trayectorias ahora con un $z \neq 0$ seran unas elipses, con $v < w + z$ un aislante topológico (curva roja), $v > w + z$ un aislante trivial (curva azul) y en el caso metálico la singularidad se dará en el punto $v = w + z$ (curva negra).	56
Figura 3.20. Entrelazamiento y polarización eléctrica del sistema SSH extendido en función del tunelaje a segundos vecinos $z$ para el estado bulto base $E_g$ . (a) Número de Schmidt y (c) polarización con parámetros $v = 0.3$ , $w = 0.5$ , (b) número de Schmidt y (d) polarización con parámetros $v = 0.5$ , $w = 0.3$ . Para $N = 300$ celdas unitarias.	57
Figura 3.21. Diagramas de entrelazamiento y polarización eléctrica en función de las amplitudes de tuneo $z$ y $w$ . Diagramas de entrelazamiento para (a) el estado bulto base $E_g$ y (b) para el estado borde $E_B$ , los correspondientes diagramas de polarización eléctrica para (c) el estado bulto base $E_g$ y (d) para el estado borde $E_B$ , se usó un parámetro de tuneo intracelda $v = 0.4$ y $N = 100$ celdas unitarias.	59
Figura 3.22. Dispersión de energías para el SSH simple con dependencia $\vartheta$ . Consideramos $N=40$ celdas unitarias, $v_p = 0.5$ y $z(\vartheta) = 0$ . (a) Cadena abierta y (b) cadena con condiciones de frontera periódicas.	61
Figura 3.23. Dispersión de energías SSH extendido con dependencia $\vartheta$ . Consideramos $N=40$ celdas unitarias, $v_p = 0.5$ y un tunelajes $w(\vartheta) = 1$ , $z(\vartheta) = 0.3$ . (a) Cadena abierta y (b) cadena con condiciones de frontera periódicas.	62
Figura 3.24. Número de Schmidt dependiente de $\vartheta$ . Se consideró una cadena abierta con $N=40$ celdas unitarias, para el caso SSH simple con parámetros $v_p = 0.5$ , $w\vartheta = 1$ y $z\vartheta = 0$ se presenta para (a) el estado bulto base $E_g$ y (b) el estado borde $E_B$ , para el caso SSH extendido con parámetros $v_p = 0.5$ , $w(\vartheta) = 1$ y $z(\vartheta) = 0.3$ se presenta (c) estado bulto y (d) estado borde.	63

Figura 3.25. Vector de Bloch dependiente de $\vartheta$ . (a) Vector de Bloch para el estado bulto base $E_g$ y (b) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ . (c) Vector de Bloch para estado del bulto y (d) estado borde, con $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.3}$ . Con parámetros $N=40$ celdas unitarias y $v_p = \mathbf{0.5}$ .....	65
Figura 3.26. Diagramas de entrelazamiento variando $\vartheta$ y $\mathbf{w}$ . (a) estado bulto base $E_g$ y (b) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0}$ , (c) estado bulto base $E_g$ y (d) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.1}$ , (e) estado bulto base $E_g$ y (f) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{w}(\vartheta) = \mathbf{1}$ y $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.3}$ . Parámetros fijos, $N=40$ celdas unitarias y $v_p = \mathbf{0.5}$ .....	66
Figura 3.27. Diagramas del vector de Bloch variando $\vartheta$ y $\mathbf{w}$ . (a) estado bulto base $E_g$ y (b) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0}$ , (c) estado bulto base $E_g$ y (d) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.1}$ , (e) estado bulto base $E_g$ y (f) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.3}$ . Parámetros fijos, $N=40$ celdas unitarias y $v_p = \mathbf{0.5}$ .....	67
Figura 3.28. Polarización eléctrica modulando $\vartheta$ . (a) Estado bulto base $E_g$ y (b) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0}$ , (c) estado bulto y (d) estado borde, con $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.3}$ . Parámetros fijos, $N=40$ celdas unitarias y $v_p = \mathbf{0.5}$ .....	68
Figura 3.29. Diagramas de fase variando $\vartheta$ y $\mathbf{w}$ . (a) estado bulto base $E_g$ y (b) estado borde $E_B$ , con $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ , (c) estado bulto y (d) estado borde, con $\mathbf{z} = \mathbf{0.1}$ , (e) estado bulto y (f) estado borde, con $\mathbf{z} = \mathbf{0.3}$ . Parámetros fijos, $N=40$ celdas unitarias y $v_p = \mathbf{0.5}$ . ....	69
Figura 3.30. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH simple respecto de la figura 3.10 (a) y 3.10 (2). Para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias el estado bulto base $E_g$ (a) $\mathbf{w} = \mathbf{0.3}, \mathbf{v} = \mathbf{0.5}$ , (c) $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}, \mathbf{v} = \mathbf{0.5}$ y (e) $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}, \mathbf{v} = \mathbf{0.3}$ , y el estado borde $E_B$ (b) $\mathbf{w} = \mathbf{0.3}, \mathbf{v} = \mathbf{0.5}$ , (d) $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}, \mathbf{v} = \mathbf{0.5}$ y (f) $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}, \mathbf{v} = \mathbf{0.3}$ .....	70
Figura 3.31. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH extendido respecto de la figura 3.20 (a). Para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias y tunelajes $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}$ y $\mathbf{v} = \mathbf{0.3}$ , para el estado bulto base $E_g$ con (a) $\mathbf{z} = \mathbf{0.4}$ , (c) $\mathbf{z} = \mathbf{0.5}$ y (e) $\mathbf{z} = \mathbf{0.6}$ , y el estado borde $E_B$ con (b) $\mathbf{z} = \mathbf{0.4}$ , (d) $\mathbf{z} = \mathbf{0.5}$ y (f) $\mathbf{z} = \mathbf{0.6}$ .....	71
Figura 3.32. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH extendido respecto de la figura 3.20 (b). Para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias y tunelajes $\mathbf{w} = \mathbf{0.3}$ y $\mathbf{v} = \mathbf{0.5}$ para el estado bulto base $E_g$ con (a) $\mathbf{z} = \mathbf{0.15}$ , (b) $\mathbf{z} = \mathbf{0.2}$ , (c) $\mathbf{z} = \mathbf{0.25}$ , (d) $\mathbf{z} = \mathbf{0.3}$ , (e) $\mathbf{z} = \mathbf{0.35}$ , (f) $\mathbf{z} = \mathbf{0.5}$ , con parámetros $\mathbf{v} = \mathbf{0.5}, \mathbf{w} = \mathbf{0.3}$ y $N = 50$ sitios.....	72
Figura 3.33. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH extendido respecto de la figura 3.20 (b). Para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias y tunelajes $\mathbf{w} = \mathbf{0.3}$ y $\mathbf{v} = \mathbf{0.5}$ para el estado borde $E_B$ con (a) $\mathbf{z} = \mathbf{0.15}$ , (b) $\mathbf{z} = \mathbf{0.2}$ , (c) $\mathbf{z} = \mathbf{0.25}$ , (d) $\mathbf{z} = \mathbf{0.3}$ , (e) $\mathbf{z} = \mathbf{0.35}$ , (f) $\mathbf{z} = \mathbf{0.5}$ , con parámetros $\mathbf{v} = \mathbf{0.5}, \mathbf{w} = \mathbf{0.3}$ y $N = 50$ sitios. ....	73
Figura 3.34. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH modulado $\vartheta$ respecto de la figura 3.24 (a)-(b). Para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias y tunelajes $\mathbf{w}(\vartheta) = \mathbf{1}, v_p = \mathbf{0.5}$ y $\mathbf{z}\vartheta = \mathbf{0}$ , para el estado bulto base $E_g$ con (a) $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ , (b) $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$ , (c) $\vartheta = \frac{4\pi}{3}$ y (d) $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$ , y para el estado borde $E_B$ con (b) $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ , (d) $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$ , (f) $\vartheta = \mathbf{0}$ y (h) $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$ .....	74
Figura 3.35. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH modulado $\vartheta$ respecto de la figura 3.24 (c)-(d). Para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias y tunelaje $\mathbf{w}(\vartheta) = \mathbf{1}, v_p = \mathbf{0.5}$ y $\mathbf{z}\vartheta = \mathbf{0.3}$ , para el estado bulto base $E_g$ con (a) $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ , (b) $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$ , (c) $\vartheta = \frac{4\pi}{3}$ y (d) $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$ , y para el estado borde $E_B$ con (e) $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ , (f) $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$ , (g) $\vartheta = \mathbf{0}$ y (h) $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$ .....	75
Figura 3.36. Entropías de información termodinámica. (a) $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}, \mathbf{T} = \mathbf{0.005}$ y (b) $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}, \mathbf{T} = \mathbf{0.5}$ , son las entropías en función del tunelaje $\mathbf{v}$ ; (c) $\mathbf{w} = \mathbf{0.6}, \mathbf{v} = \mathbf{0.1}$ y (d) $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}, \mathbf{v} = \mathbf{0.5}$ , son las entropías en función de la temperatura, $N = 40$ uniceldas y el tunelaje a <b>2do</b> vecinos $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ .....	77
Figura 3.37. Capacidad calorífica y fluctuación de la energía para una cadena de $N = 40$ uniceldas. (a) $\mathbf{w} = \mathbf{0.6}, \mathbf{v} = \mathbf{0.1}$ , (c) $\mathbf{w} = \mathbf{0.5}, \mathbf{v} = \mathbf{0.5}$ y (e) $\mathbf{w} = \mathbf{0.1}, \mathbf{v} = \mathbf{0.6}$ , son las capacidades caloríficas en	

función de la temperatura; (b) $w = 0.6$ , $v = 0.1$ , (d) $w = 0.5$ , $v = 0.5$ y (f) $w = 0.1$ , $v = 0.6$ , son las fluctuaciones en la energía asociadas. Se considero siempre el tunelaje a <b>2do</b> vecinos $z = 0$ . 78	
Figura 3.38. Diagrama de la capacidad calorifica en función de la temperatura $T$ y la amplitud de tuneo $v$ para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias. Aquí hemos fijado al tunelaje $w = 0.5$ y al tunelaje a <b>2do</b> vecinos $z = 0$ . .....	80
Figura 3.39. Distribución de probabilidades del ensamble térmico por sitio. (a) $w = 0.5$ , $v = 0.1$ y (b) $w = 1$ , $v = 1$ , con temperatura $T = 0.003$ ; (c) $w = 0.5$ , $v = 0.1$ y (d) $w = 1$ , $v = 1$ , con un aumento en la temperatura a $T = 1.5$ , $N = 40$ uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos $z = 0$ .....	80
Figura 3.40. Probabilidad de los eigenestados en el ensamble. (a) $w = 0.5$ , $T = 0.005$ y (b) $w = 0.5$ , $T = 10$ , variando el tunelaje $v$ ; (c) $w = 0.5$ , $v = 0.1$ y (d) $w = 0.5$ , $v = 0.5$ , variando la temperatura, $N = 40$ uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos $z = 0$ .....	81
Figura 3.41. Información cuántica de Fisher optimizada. (a) QFI en función del tunelaje $v$ y (b) variando la temperatura $T$ , con $w = 0.5$ y $N = 40$ uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos $z = 0$ .....	83
Figura 3.42. Información cuántica de Fisher optimizada. (a) QFI en función del tunelaje $v$ y (b) variando la temperatura $T$ , con $w = 0.5$ y $N = 40$ uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos $z = 0$ .....	84
Figura 3.43. Vector de Bloch del ensamble estadístico. (a) Vector de Bloch en función del tunelaje $v$ y (b) variando la temperatura, con $w = 0.5$ y $N = 40$ uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos $z = 0$ ...	85
Figura 3.44. QFI optimizada vs Vector de Bloch. (a) En función del tunelaje $v$ y (b) variando la temperatura $T$ , con $w = 0.5$ , $z = 0$ y $N = 40$ uniceldas. ....	86
Figura 3.45. QFI vs $C_V$ para una cadena $N = 40$ uniceldas con tunelaje a <b>2do</b> vecinos $z = 0$ . En función de la temperatura $T$ con (a) $w = 0.2$ y (b) $w = 0.7$ . En función del tunelaje $v$ con (a) $w = 0.2$ y (b) $w = 0.7$ .....	87
Figura 3.46. Diagramas de la polarización eléctrica en un ensamble termodinámico en función de la temperatura $T$ y de la amplitud de tuneo $v$ , para una cadena de $N = 40$ celdas unitarias y tunelaje a <b>2do</b> vecinos $z = 0$ . Para un tunelaje intercelda (a) $w = 0.2$ y (b) $w = 0.5$ . ....	88
Figura 3.47. Diagrama de fase para un sistema de dos estados en función de $p$ y $\phi_2$ . (a) $\phi_1 = 0$ y (b) $\phi_1 = \pi$ . .....	89
Figura 3.48. Diagrama de la capacidad calorífica SSH extendido en función de la temperatura $T$ y el tunelaje $z$ . (a) $w = 0.5$ , $v = 0.3$ , (b) $w = 0.3$ , $v = 0.5$ , con $N = 40$ uniceldas. ....	90
Figura 3.49. QFI optimizada en función de la temperatura con (a) $v = 0.3$ , $w = 0.5$ y (b) $v = 0.5$ , $w = 0.3$ , en función del tunelaje $z$ con (c) $v = 0.3$ , $w = 0.5$ y (d) $v = 0.5$ , $w = 0.3$ , en todos los casos con $N = 40$ uniceldas. ....	91
Figura 3.50. Diagramas QFI optimizada para el sistema extendido en función de la temperatura y la amplitud de tuneo $z$ . (a) $w = 0.5$ , $v = 0.3$ y (b) $w = 0.3$ , $v = 0.5$ , con $N = 40$ uniceldas. ....	92
Figura 3.51. Vector de Bloch del ensamble estadístico para el sistema extendido en función del tuneo $z$ con (a) $w = 0.5$ , $v = 0.3$ y (b) $w = 0.3$ , $v = 0.5$ , y variando la temperatura con (c) $w = 0.5$ , $v = 0.3$ y (d) $w = 0.3$ , $v = 0.5$ , en todos los casos con $N = 40$ uniceldas. ....	93
Figura 3.52. QFI optimizada vs Vector de Bloch en el sistema extendido. En función del tuneo $z$ con (a) $w = 0.5$ , $v = 0.3$ y (b) $w = 0.3$ , $v = 0.5$ , en función de la temperatura con (c) $w = 0.5$ , $v = 0.3$ y (d) $w = 0.3$ , $v = 0.5$ , para $N = 40$ uniceldas. ....	94
Figura 3.53. QFI optimizada vs $C_V$ en el sistema SSH extendido, en función del tunelaje $z$ con (a) $w = 0.5$ , $v = 0.3$ y (b) $w = 0.3$ , $v = 0.5$ , en función de la temperatura con (c) $w = 0.5$ , $v = 0.3$ y (d) $w = 0.3$ , $v = 0.5$ , para $N = 40$ uniceldas. ....	95
Figura 3.54. Diagrama de la polarización eléctrica en un ensamble termodinámico para el modelo SSH extendido en función de la temperatura y de la amplitud de tuneo a segundos vecinos $z$ . Con (a) $w = 0.5$ y $v = 0.3$ , (b) $w = 0.3$ y $v = 0.5$ , con $N = 40$ uniceldas. ....	96

Figura 3.55. QFI modulado paramétrico  $\vartheta$  con parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w = 1$ ,  $z = 0$  y  $N = 40$  uniceldas. (a) QFI variando  $\vartheta$  con  $z = 0$  y (b) QFI variando  $\vartheta$  con  $z = 0.3$ . Vector de Bloch  $\vartheta$ , (c)  $z = 0$  y (d)  $z = 0.7$ . ..... 97

Figura 3.56. Diagram de la QFI optimizada y el Vector de Bloch en funcion de  $\vartheta$  y la temperatura  $T$ , con parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $N = 40$  uniceldas. (a) QFI optimizada con  $z(\vartheta) = 0$ , (b) Vector de Bloch con  $z(\vartheta) = 0$ , (c) QFI optimizada con  $z(\vartheta) = 0.7$ , (d) Vector de Bloch con  $z(\vartheta) = 0.7$ . ..... 98

## Índice de cuadros

Cuadro 2.1. Clasificación a partir de simetrías en el Hamiltoniano no interactuante de una partícula, para aislantes y superconductores topológicos, extraído de (Schnyder et al., 2008). ..... 18

## Introducción

Los sistemas topológicos en física de la materia condensada han cobrado interés en los recientes años debido a sus peculiares propiedades, en particular, existe en estos materiales una propiedad denominada *robustez* la cual protege de decoherencias al transporte electrónico (Aoki, 2011; Qi & Zhang, 2011; Shen, 2011; Xiao et al., 2010). Por esta razón entre otras, diversas áreas del desarrollo tecnológico proponen a los materiales topológicos como buenos candidatos para implementarse en equipos eléctricos y prometen ser una nueva era en la revolución tecnológica cuántica.

Un aislante topológico es un material que es aislante en su interior pero conduce en su superficie, por lo tanto, la conducción de estos materiales queda caracterizada por sus estados de superficie o estados de borde (Asbóth et al., 2015), los cuales se encuentran ligados a la topología del sistema mediante las llamadas “invariantes topológicas”, por ejemplo, el número de Chern. Es decir, esto se debe a que en la estructura de bandas de los aislantes topológicos se tienen estados energéticos permitidos de dos tipos: los estados borde y los estados del bulto. En algunos sistemas, los estados borde tienen la peculiar propiedad de que al evolucionar adiabáticamente sus modos de energía tomando un valor igual a cero (Rex, 2017). Esta es una propiedad importante en la topología de estos estados. Además, es importante mencionar que existe una correspondencia borde-bulto ya que la presencia de fase topológica es sinónimo de estados borde (Asbóth et al., 2015).

La teoría de la información cuántica se encarga de estudiar el entrelazamiento y las correlaciones cuánticas involucradas en sistemas de materia condensada. De acuerdo al tensor geométrico del espacio cuántico (Cheng, 2010) existe una relación entre las métricas de no clasicidad y las fases geométricas, de tal forma que es natural pensar que hay una conexión entre las correlaciones cuánticas y la presencia de robustez topológica. Debido a lo mencionado, resulta adecuado el estudio del entrelazamiento o correlaciones cuánticas en sistemas topológicos. Ya existen diversos trabajos (Chen & Li, 2010; Cho & Kim, 2017; Fromholz et al., 2020; Hauke et al., 2016; Zeng et al., 2019) que mencionan algunas peculiaridades de estos tipos de materiales y en general se ha demostrado que debido a la robustez de estos materiales hay más correlaciones cuánticas en estos sistemas y esto

permite un mayor grado de eficiencia en el transporte electrónico, dado que en este régimen topológico surgen los llamados “estados borde” que generan una protección ante decoherencias de la información. Por ende, es de esperar que los materiales topológicos sean buenas plataformas para el procesamiento de la información.

Por ello, en este trabajo se presenta una conexión intrínseca que hay entre las correlaciones cuánticas como medidas de la no clasicidad y la robustez topológica descrita por invariantes adiabáticas en aislantes topológicos. Hay una gran variedad de aislantes topológicos con diversas simetrías (Schnyder et al., 2008), sin embargo, nos limitamos a estudiar el modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH), el cual es un buen punto de partida para entender la topología y como se relaciona con el entrelazamiento. El modelo SSH es un aislante topológico simple descrito por un sistema de amarre fuerte en el que se van alternando enlaces sencillos y dobles. La versión que aquí presentamos es el modelo SSH 1D también conocido como alambre topológico. Este sistema está compuesto por un Hamiltoniano hermitiano y a pesar de que este sistema es relativamente simple en el modelo SSH se encuentran las propiedades más importantes sobre aislantes topológicos, es decir, presencia de fases geométricas, invariantes topológicas, estados borde, polarización eléctrica robusta, entre otras propiedades (Qi & Zhang, 2011). Sobre el entrelazamiento en sistemas topológicos ya existen algunos trabajos previos en otros modelos (Fromholz et al., 2020; J. Li et al., 2014; Zeng et al., 2019), principalmente para sistemas 1 y 2 dimensiones, tales como en nanoestructuras como grafeno, redes ópticas, átomos fríos y iones atrapados. También ya se han reportado ciertas propiedades sobre el entrelazamiento en el modelo SSH (Cho & Kim, 2017), sin embargo, aún no han profundizado mucho sobre la relación entre la topología, el entrelazamiento y los estados presentes en estos sistemas. El modelo SSH es un sistema bipartito de dimensión  $2N$ ,  $N$  es el número de celdas unitarias sobre la cadena y 2 es la dimensión interna del sistema de dos niveles o tipo de átomo. El modelo SSH tiene 2 átomos por celda unitaria, por esta razón el valor de su dimensión interna. Por lo tanto, es posible calcular el entrelazamiento del sistema bipartito y determinar cómo la topología de este sistema influye en el entrelazamiento del sistema.

Aun no se cuenta con una descripción detallada sobre la relación entre entrelazamiento y fases geométricas en este sistema, y menos con métricas de correlación tipo discordia

cuántica más generales que el propio entrelazamiento. La búsqueda en el entendimiento de las propiedades de estos materiales topológicos aún sigue en desarrollo, en particular, su relación con la información cuántica comienza a cobrar interés debido a la robustez de estos materiales. El modelo SSH es un ejemplo del efecto que produce la topología de la estructura de bandas en la inducción de entrelazamiento cuántico. Otro punto que proponemos estudiar son los efectos térmicos del modelo SSH ya que no se tiene una métrica de la información cuántica involucrada en ensambles estadísticos en estos tipos de sistemas topológicos, además, si es que en ensambles estadísticos todavía se preservan las invariantes topológicas y de qué manera lo hacen es una incógnita. Existen métricas que pueden introducir el efecto térmico en sistemas cuánticos y de esta forma podría determinarse si alguna observable se encuentra vinculada. En este trabajo, realizamos un desarrollo detallado sobre el modelo SSH en donde nos centramos en caracterizar su entrelazamiento y fases geométricas, así como también la polarización eléctrica. También modificamos el modelo SSH agregando un tunelaje a segundos vecinos (C. Li & Miroshnichenko, 2018) y modulando paramétricamente mediante una variable adiabática. Además, calculamos la información cuántica producto del efecto térmico en el modelo SSH en todas sus versiones modificadas y analizamos las fases topológicas por medio de la matriz densidad del ensamble estadístico, y comparamos con otras cantidades termodinámicas como la capacidad calorífica y la entropía de información de von Neumann.

El objetivo de esta tesis es; determinar numérica y teóricamente como el entrelazamiento y la topología se encuentran relacionados geoméricamente en los valores de la polarización eléctrica, dispersión de la energía y en la distribución de los estados cuánticos presentes. También es de interés medir el efecto de la temperatura en las fases geométricas y calcular la discordia cuántica en el ensamble térmico como un medidor de la no clasicidad del sistema. Así como, calcular otras variables termodinámicas como la entropía de von Neumann y la capacidad calorífica.

Este trabajo se encuentra dividido de la siguiente forma, en el capítulo 1, nos adentramos en la teoría de la información cuántica con un énfasis en correlaciones cuánticas como medidores de la no clasicidad y eficiencia metrológica. En el capítulo 2, se aborda la topología en aislantes topológicos y los principios fundamentales arraigados en este campo.

En el capítulo 3, detallamos el modelo de estudio y sus propiedades tales como, la polarización eléctrica, el entrelazamiento de formación y hacemos un análisis detallado sobre las amplitudes de los estados del sistema. Además, discutimos los resultados obtenidos en relación con las correlaciones cuánticas involucradas en el sistema debido a efectos termodinámicos y medimos algunas cantidades termodinámicas como la entropía de información y capacidad calorífica. En la parte final de este trabajo de investigación, presentamos las conclusiones y presentamos algunas perspectivas del trabajo futuro en esta área.

## **I. Correlaciones cuánticas**

En este capítulo, describimos las herramientas y conceptos necesarios para entender la teoría de la información cuántica, con un enfoque en las correlaciones cuánticas como medida de la no clasicidad de un sistema. Primero, explicamos los fundamentos e ideas claves de esta área, así como la notación matemática e interpretación de un “qubit”, el cual es la unidad de información cuántica y el núcleo de la investigación en este tema, ya que a partir de estos bloques o estados fundamentales se plantea procesar información cuántica, en lugar de los bits clásicos utilizados en la computación convencional. Por último, hablamos sobre métricas de entrelazamiento y de manera más general sobre correlaciones cuánticas con una orientación en aquellas que involucren efectos de temperatura.

### **1.1. Introducción a la información cuántica**

El estudio de la información cuántica se encarga de describir cómo la naturaleza codifica la información a partir de las propiedades de la mecánica cuántica como la superposición y el entrelazamiento. La información intrínseca de un sistema puede ser de muchas clases, puede estar relacionada con la magnetización, conductividad eléctrica, polarización, intercambio de espín y carga, etc. La palabra “información” engloba algo muy genérico y depende del sistema el tipo de información de que se trata. Existen trabajos (Campos Venuti & Zanardi, 2007; Cheng, 2010; Christian, 2011); que han determinado que la información es una propiedad cuántica y en una aproximación puede tratarse como clásica. Este es el caso por ejemplo de la información de Shannon que es solo una aproximación de su forma natural cuántica, la cual es descrita por la entropía de von Neumann (Petz, 2001).

Cabe mencionar que la tecnología computacional está basada en una codificación binaria clásica dada por bits 0 o 1. Actualmente se está buscando implementar la información cuántica ya que se ha determinado que las propiedades únicas del régimen cuántico generan mayor procesamiento en la información y eficiencia (Merali, 2011). Sin embargo, aún existen algunos problemas cuánticos que en el régimen clásico no existen, tal es el caso de la decoherencia de la información, el problema de la medición de estados cuánticos y la escalabilidad de los sistemas cuánticos. Por esta razón, resulta muy importante seguir estudiando cómo funciona la información cuántica, para explotar sus fortalezas y saber

identificar sus desventajas, y así poder implementar correctamente estas nuevas propiedades en una nueva era de dispositivos electrónicos que procesen la información de forma cuántica.

De acuerdo a los fundamentos y postulados de la mecánica cuántica (Apéndice 1), una función de onda puede ser descrita como una superposición de estados, los cuales tienen una propiedad muy peculiar denominada “entrelazamiento” (Paul, 1980) y que es de origen cuántico, ya que no tiene interpretación clásica y es de este concepto cuántico donde surge la idea central de que los sistemas involucrados comparten de alguna forma información y a partir de esta propiedad podemos manipular o medir estados.

### 1.1.1. Qubit y esfera de Bloch

El sistema cuántico más simple y no trivial, es un sistema de dos estados linealmente independientes y que se puede describir por dos vectores en un espacio de Hilbert de dos dimensiones  $\mathcal{H}_2$ . Estos estados en  $\mathcal{H}_2$  son también llamados qubits y se pueden escribir de la forma,

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (1.1)$$

con  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , donde la base ortonormal  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  es referida también como la base computacional. Este sistema se encuentra en una superposición de dos posibles resultados y el resultado de medir a uno de los estados automáticamente afecta al otro.

Para analizar las propiedades de los qubits consideremos un operador de densidad  $\hat{\rho}$  para un sistema de dos niveles (Audretsch, 2007), tal que, si cumple las propiedades  $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$ , o sea que es un operador hermitiano y  $Tr(\hat{\rho}) = 1$ , podemos decir que  $\hat{\rho}$  será un operador de la forma,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}), \quad (1.2)$$

donde  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  son las matrices de Pauli  $SU(2)$ ,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

las cuales son matrices hermitianas que satisfacen la regla conmutativa  $[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$ , además  $\hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i$  es un operador hermitiano y unitario  $\hat{\sigma}_i^2 = 1$ , y donde  $\vec{r}$  es el “vector de Bloch” cuyos componentes están dadas como,

$$r_x = \text{Tr}[\rho\sigma_x], \quad r_y = \text{Tr}[\rho\sigma_y], \quad r_z = \text{Tr}[\rho\sigma_z], \quad (1.4)$$

cuyo valor se encuentran entre  $0 \leq |\vec{r}| \leq 1$ . El vector de Bloch será el recurso mediante el cual se podrá visualizar un qubit sobre la esfera de Bloch (figura 1.1). La idea básicamente consiste en la superposición, la cual posicionándonos en una esfera el polo norte indica la posición del estado  $|0\rangle$  y el polo sur el  $|1\rangle$ , existen unos parámetros  $\theta$  y  $\phi$ , que determinan la posición del qubit sobre la esfera.

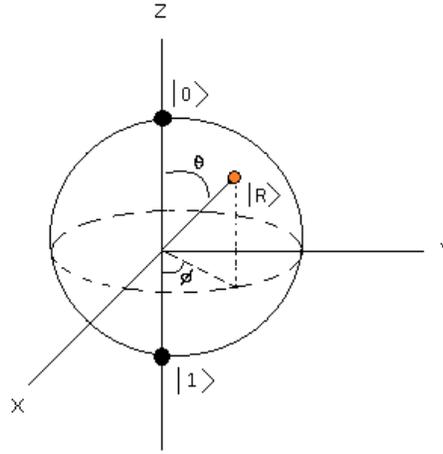


Figura 1.1. Esfera de Bloch. El estado cuántico  $|R\rangle$  se encuentra parametrizado por los ángulos  $\theta$  y  $\phi$  sobre la esfera unitaria. Los estados  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$  se encuentran en el polo norte y sur de la esfera, respectivamente. Todo punto que cae sobre la esfera es una superposición de estos dos estados cuánticos extremos.

Si consideramos un vector de Bloch en la forma  $\vec{r} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$  con magnitud  $|\vec{r}| = 1$  podemos parametrizar en coordenadas esféricas dos puntos asociados a dos estados sobre la esfera de Bloch, entonces, un qubit  $|\psi\rangle$  lo podemos representar de la forma,

$$|\psi\rangle = e^{-i\frac{\phi}{2}} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\frac{\phi}{2}} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \quad (1.5)$$

donde  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ .

Tenemos qué remarcar, que el operador de densidad es crucial en el análisis de qubits y otras cantidades asociadas al entrelazamiento de estos sistemas. Además, es un operador muy particular con ciertas propiedades y criterios (Apéndice 2) que lo hacen distinto a otros. La potencia cuadrada del operador densidad también juega un papel importante, en particular, notemos que,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \frac{1}{2}(1 + |\vec{r}|^2) \quad (1.6)$$

y que como veremos más adelante esta cantidad se relaciona con el entrelazamiento. En el caso de que se traten estados puros o sin mezcla estadística, el operador de densidad lo podemos poner de la forma  $\hat{\rho} := |\psi\rangle\langle\psi|$ , por lo que vemos  $\hat{\rho}$  es el operador de proyección del estado  $|\psi\rangle$  consigo mismo, o sea que se realiza un mapeo isomorfo entre ambos operadores  $\hat{\psi} \rightarrow \hat{\rho}$ , por lo tanto se pasa del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  al espacio proyectivo  $\wp(\mathcal{H})$ .

En cambio para una mezcla estadística el operador de densidad tendrá una estructura más compleja y ésta se puede escribir en su descomposición espectral de eigenestados, tal que  $\rho = \sum_i^{\dim\{\mathcal{H}\}} \alpha_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ . Cada eigenestado de la matriz  $\rho$  tiene un peso estadístico asociado  $\alpha_i$ , además  $0 \leq \alpha_i \leq 1$  y  $\sum_i \alpha_i = 1$ , y por lo tanto, también podemos obtener la relación,  $\text{Tr}(\rho^2) = \sum_i \alpha_i^2 \leq 1$ , notemos que cuando  $\text{Tr}(\rho^2) = 1$ , nos estaremos refiriendo a un estado puro. Existen varias propiedades para la matriz de densidad y estas varían también respecto al tipo de medición que se hace, ya sea selectiva o no selectiva (Apéndice 2).

Vale la pena describir la cantidad llamada “grado de mezclado” para ensambles estadísticos. Ésta la podemos expresar como,  $\Xi := 1 - \text{Tr}(\rho^2)$ , y cuyos valores se encuentran entre,  $0 \leq \Xi \leq 1 - \frac{1}{d}$ , donde  $d = \dim(H)$  representa la dimensión del espacio cuántico. El caso  $\Xi = 0$ , es el de un estado puro y  $\Xi = 1 - \frac{1}{d}$  es el punto de máximo grado de mezclado, cuya matriz de densidad  $\rho = \frac{1}{d}\mathbb{I}$ , es la matriz de máximo mezclado, y como notamos se vuelve una matriz con eigenvalores  $\alpha_i = \frac{1}{d}$  sobre la diagonal.

En el caso de que tratemos un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_2$ , o sea un qubit, y con la ecuación (1.2) en su descomposición espectral y el vector de Bloch,  $\vec{r} = Tr(\rho\vec{\sigma}) = \langle \vec{\sigma} \rangle$ , tenemos la relación  $\frac{1}{2} \leq Tr(\rho^2) \leq 1$ , con  $|\vec{r}|^2 \leq 1$ , podemos escribir al grado de mezclado para un qubit en la forma,

$$\Xi = \frac{1}{2}(1 - |\vec{r}|^2) \quad (1.7)$$

dado que la dimensión del espacio de Hilbert es  $d = 2$ , tenemos que los valores del grado de mezclado se encuentran entre,  $0 \leq \Xi \leq \frac{1}{2}$ . Entonces, podemos apreciar que el vector de Bloch el cual es el valor esperado de las matrices  $SU(2)$  se encuentra relacionado con el grado de mezcla. La condición de máximo mezclado  $\Xi = \frac{1}{2}$ , sucederá cuando la posición del vector de Bloch sea  $|\vec{r}| = 0$ , y en  $|\vec{r}| = 1$  tendremos un sistema separable o bien un grado de mezclado  $\Xi = 0$ .

### 1.1.2. Sistemas compuestos: bipartitos

Un espacio de Hilbert no solamente puede ser visto como un espacio aislado sino que puede tratarse como un espacio compuesto (Hotta & Ozawa, 2004; Sperling et al., 2017) de varios subespacios. El caso más simple, es el sistema compuesto por dos subespacios de Hilbert o también llamado bipartito,  $\mathcal{H} := \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$  (figura 1.2), en donde podemos expresar a la matriz de densidad compuesta como,

$$\rho^{AB} = \rho^A \otimes \rho^B \quad (1.8)$$

donde el signo  $\otimes$  representa un producto tensorial entre los subespacios  $A$  y  $B$ .

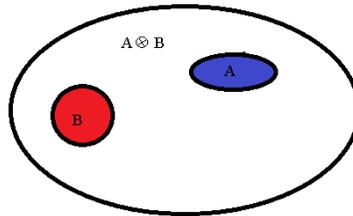


Figura 1.2. Sistema compuesto bipartito. Este esquema sugiere que el sistema está dividido en dos partes, A y B, cuya unión no corresponde al sistema completo.

Ahora bien, si quisiéramos acceder a la información de uno de los subespacios, por ejemplo el subespacio  $A$ , tenemos que realizar una traza parcial sobre el subespacio  $B$ , de esta manera, nos quedamos con la información relacionada solamente de  $A$ . Esto lo podemos expresar como,  $\rho^A = Tr_B(\rho^A \otimes \rho^B)$  y análogamente para el subespacio  $B$  tenemos,  $\rho^B = Tr_A(\rho^A \otimes \rho^B)$ , con la propiedad,  $Tr(\rho^A) = Tr(\rho^B) = 1$ .

Con esta idea en mente, se pueden realizar mediciones locales sobre subsistemas y determinar algún tipo de correlación o información mutua compartida entre estos, por lo que, si realizamos alguna medición sobre este sistema compuesto mediante un operador  $C$  y la matriz de densidad puede escribirse como la ecuación (1.8), entonces,  $Tr(\rho^{AB} C) = Tr(\rho^A C^A \otimes \rho^B C^B) = \langle C^A \rangle \langle C^B \rangle$ ; sin embargo, si esta última relación se cumple, la matriz densidad (1.8) es una matriz no correlacionada, entonces se dice que el subespacio  $A$  y  $B$  son separables.

Por esta razón, la forma más general de expresar una matriz de densidad bipartita que se encuentra correlacionada cuánticamente es,

$$\rho^{AB} \neq \rho^A \otimes \rho^B \quad (1.9)$$

y entonces  $Tr(\rho^A C^A \otimes \rho^B C^B) \neq \langle C^A \rangle \langle C^B \rangle$ , aquí los valores de expectación son respecto a las observables locales  $C^A$  o  $C^B$ .

## 1.2. Métricas de no clasicidad

Una de las importancias de la información cuántica es que crea nuevas formas de medir en el régimen mecánico cuántico, que muchas veces resulta bastante complejo debido a la estructura del espacio de Hilbert y por otras razones físicas como, el colapso de la función de onda, la decoherencia de la información y el ruido del ambiente, entre otras. La principal función de estas métricas es medir distancias entre estados cuánticos y determinar el grado de información cuántica. Por esta razón, también se dice que miden el grado de “no clasicidad” (Auyuanet & Davidovich, 2010). Dado que, el entrelazamiento es una propiedad cuántica, se sabe que la mínima información compartida en un sistema de este tipo es debida al entrelazamiento propio del sistema (Dhar et al., 2017); sin embargo, podemos tener más información cuántica involucrada a causa de efectos de acoplamiento,

ruido, excitaciones térmicas, etc., y estas son denominadas de manera más general como correlaciones cuánticas.

El conocer el comportamiento de estas métricas nos permite relacionarlas con algunas propiedades físicas u observables, y esto es de suma importancia, ya que se vuelven una herramienta para determinar cómo las correlaciones cuánticas cambian conforme estas propiedades físicas también lo hacen, tal que, se logra vincular el concepto de observable que tiene un carácter físico con el de información y esto es sin duda algo muy importante que demuestra que toda propiedad física se puede pensar como una información codificada en el sistema y tiene un origen arraigado en las correlaciones cuánticas. Por lo tanto, las correlaciones cuánticas son propiedades universales que se encuentran involucradas en todo ente cuántico y repercuten en propiedades macroscópicas medibles.

### **1.2.1. Entrelazamiento**

El entrelazamiento es una propiedad cuántica que resulta ser un concepto algo contra intuitivo, ya que va en contra del sentido común y lo que logramos percibir en la naturaleza clásica, de acuerdo a las declaraciones de Einstein en su paradoja EPR (Einstein, 1935) llamándola así como una reacción fantasmagórica a distancia, la cual viola el principio de la relatividad general y dice que nada va más rápido que la velocidad de la luz. Experimentos subsiguientes con la finalidad de describir el comportamiento ondulatorio de la naturaleza siguieron con los experimentos de Bell (Abellán et al., 2018; Bell et al., 1989) y tuvieron un gran impacto en el entendimiento del realismo no local de la mecánica cuántica, dado que antes de su experimento solo estaban algunos pensamientos plasmados y no había pruebas contundentes de la realidad. Por lo tanto, la mecánica cuántica no es determinista y se trata de una teoría probabilística, la cual puede encontrarse en una superposición de posibles resultados (figura 1.3). Entonces todos los estados son igualmente probables hasta que se realice una medición y de esta manera la función de onda sufra un colapso en alguna dirección. También cabe destacar que el entrelazamiento no depende de la distancia y que si se trata de un sistema puro completamente aislado del ambiente el efecto de medir en uno de los estados colapsa instantáneamente en el resto de los estados. Existen diversas métricas para medir el grado de entrelazamiento en estos

sistemas puros, algunas de las más conocidas es la entropía de Von Neumann, la concurrencia, el número de Schmidt, etc. Dado a nuestro interés nos enfocaremos en la métrica del número de Schmidt (Sperling & Vogel, 2011), el cual, de manera natural se encarga de medir el grado de entrelazamiento en un sistema bipartito puro.



Figura 1.3. Superposición de espines en una caja negra. La cuerda amarilla representa el entrelazamiento entre los dos posibles resultados.

### 1.2.2. Número de Schmidt: Entrelazamiento en sistemas bipartitos puros

Consideremos un sistema bipartito con espacio de Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{ext} \otimes \mathcal{H}^{int}$  y centrémonos en el caso de un qubit, y, mediante la descomposición de Schmidt (deducción del teorema se encuentra en el Apéndice 3), podemos reescribir a la función de onda en términos de los coeficientes de Schmidt en la forma  $|\psi^{ext,int}\rangle = \sum_{n=1}^k \sqrt{p_n} |u_n^{ext}, w_n^{int}\rangle$ , en donde  $k \leq \dim\{\min(ext, int)\}$  es la dimensión más pequeña entre los subespacios y cuya matriz de densidad simplemente está definida como,  $\rho^{ext,int} = \sum_{n=1}^k p_n |u_n^{ext}, w_n^{int}\rangle \langle u_n^{ext}, w_n^{int}|$ ; siendo los coeficientes  $p_n$  los eigenvalores distintos de cero de la matriz densidad reducida. A partir de esta matriz de densidad podemos determinar el número de Schmidt (Bogdanov et al., 2007), el cual está definido como,

$$K = \frac{1}{Tr(\rho_r^2)} = \frac{1}{\sum_{n=1}^k p_n^2} \quad (1.12)$$

donde  $\rho_r$  es la matriz reducida sobre uno de los subespacios *ext* ó *int*. Suponiendo que nos encontramos en un subsistema tipo qubit, el cual se encuentra expresado por la matriz reducida  $\rho_r$ , podemos relacionar la ecuación (1.12) con la (1.6), por lo tanto, haciendo esta conexión tenemos que el número de Schmidt también puede expresarse en la forma,

$$K = \frac{2}{1+|\tilde{r}|^2} \quad (1.13)$$

y donde vemos que cuando la magnitud del vector de Bloch sea  $|\vec{r}| = 0$ , obtenemos un entrelazamiento máximo  $K = 2$ , mientras que para  $|\vec{r}| = 1$  tenemos  $K = 1$  y el sistema se vuelve separable, entonces,  $1 \leq K \leq 2$ . Por otro lado, el número de Schmidt se relaciona con el grado de mezclado como,  $K = \frac{1}{1-\epsilon}$ , o sea, que cuando  $|\vec{r}| = 0$  ambas cantidades serán máximas y cuando  $|\vec{r}| = 1$  ambas serán de un estado separable. De forma más general, el número de Schmidt puede tomar valores en un rango  $1 \leq K \leq d$ , donde “d” representa la dimensionalidad del subespacio más pequeño. Cuando  $K = 1$  se trata de un sistema separable o no entrelazado, debido a que solo participa un estado en la descomposición y el número Schmidt, en otras palabras, hay un eigenestado no nulo para el operador de densidad reducido. Por otro lado, con  $K = d$  el sistema se encuentra en su estado de máximo entrelazamiento, ya que están presentes los “d” eigenestados en el número de Schmidt y con el mismo peso, puesto para llegar al valor “d” es un requerimiento que los eigenvalores del operador de densidad reducido tengan el mismo peso estadístico (Audretsch, 2007).

### 1.3. Correlaciones cuánticas

Como ya se mencionó, una correlación cuántica es más general que el entrelazamiento puro o de formación, por esta razón, resulta interesante ver cómo estas cantidades se comportan y se relacionan entre sí. No existe una sola expresión para determinar cualquier correlación en un sistema, sino que, de acuerdo a la forma del espacio y el tipo de medición que se requiera hacer se implementarán distintas métricas de correlación (Girolami, 2013). Por mencionar algunas, está la métrica de Von Neumann, Witnesses, la fidelidad, Fisher, etc. Así mismo, un sistema que posee correlación cuántica se puede expresar a grandes rasgos en la forma  $\rho \neq \rho^A \otimes \rho^B$  esto quiere decir, que no es separable.

Cada métrica tiene su deducción e interpretación, pero todas miden el grado de no clasicidad. En nuestro caso nos limitamos a describir la información cuántica de Fisher (QFI, por sus siglas en inglés), (Luo, 2004) en el contexto de correlaciones debido a mezclas en ensambles térmicos (apéndice 4).

### 1.3.1. Información cuántica de Fisher optimizada

Esta métrica de correlación cuántica, como otras tantas más, también tiene su contraparte clásica (Fisher et al., 1922). La información cuántica de Fisher funciona a partir de la implementación de operadores cuánticos. En algunos trabajos (Hauke et al., 2016; Liu et al., 2020) se explica que la QFI (Quantum Fisher Information) es más que solo una métrica y que en realidad forma parte de la descripción cuántica como una propiedad física, ya que se ha encontrado que está fuertemente ligada con la susceptibilidad dinámica en sistemas ópticos y promete ser una herramienta útil para la caracterización de sistemas de muchos cuerpos. En nuestro enfoque consideraremos la forma de la QFI a partir de la descomposición espectral de la matriz densidad (Luo, 2004). Así pues, podemos expresar a la QFI (apéndice 5) en la descomposición espectral de los operadores, tal que,

$$F_Q(\rho, A) = \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{\dim\{\mathcal{H}\}} \frac{(\lambda_i - \lambda_j)^2}{(\lambda_i + \lambda_j)} |\langle \psi_i | A | \psi_j \rangle|^2 \quad (1.14)$$

donde  $\lambda_i$  y  $|\psi_i\rangle$ , son los eigenvalores y eigenvectores respectivamente de la matriz densidad  $\rho$ , y  $A$  es el operador de medición, que en un sistema  $SU(2)$  pueden ser las matrices de Pauli.

En general, la QFI es una métrica que nos permite conocer el grado de incertidumbre de medir una observable en nuestro sistema, en particular, su cota máxima nos habla de la accesibilidad a la información y su eficiencia como métrica, mientras que por otra parte, su cota inferior determina la no clasicidad del sistema (N. Li & Luo, 2013). Para un sistema qubit-qudit, tenemos un espacio restringido  $\mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^d$ , consideremos que  $A$  es el subespacio del qubit y  $B$  el qudit. Un qudit es la generalización de un qubit de dimensión  $d = 2$  a una dimensión  $d = N$ . Consideremos un operador local observable  $K_A^\Lambda$  con un espectro  $\{\lambda_1, \lambda_2\}$  puede ser parametrizado de forma general como,  $K_A^\Lambda = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2)}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A + \frac{(\lambda_1 + \lambda_2)}{2} \mathbb{1}_A$ , donde  $\vec{n}$  es un vector unitario. Por lo tanto, para sistemas qubit-qudit la selección del espectro  $\Lambda$  no afecta la cantidad de correlaciones no clásicas y sin pérdida de generalidad elegimos  $\Lambda = \{1, -1\}$ , asumimos a las observables locales en la forma  $K_A^\Lambda = \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A$ . Definimos a la información cuántica de Fisher optimizada como el proceso de minimización de la forma

cuadrática sobre la esfera unitaria  $\mathcal{P}_A^\Lambda(\rho_{AB}) := \min_{K_A} F_Q(\rho_{AB}, K_A^\Lambda)$ , por ende, llegamos a la expresión,

$$\mathcal{P}_A^\Lambda = \lambda_{\min}(M_{AB}) \quad (1.15)$$

la cual también se conoce como “potencia interferométrica” y es el proceso de optimización de la matriz de Fisher  $M_{AB}$ . Esta es una forma de cuantificar la discordia cuántica (Dhar et al., 2017), y consiste en minimizar la QFI eligiendo el eigenvalor más pequeño  $\lambda_{\min}$  de la matriz  $M_{AB}$  de tamaño  $3 \times 3$  cuyos elementos son de la forma,

$$(M_{AB})_{mn} = \frac{1}{2} \sum_{i,j, \lambda_i + \lambda_j \neq 0} \frac{(\lambda_i - \lambda_j)^2}{(\lambda_i + \lambda_j)} \langle \psi_i | \sigma_{mA} \otimes \mathbb{I}_B | \psi_j \rangle_{AB} \langle \psi_j | \sigma_{nA} \otimes \mathbb{I}_B | \psi_i \rangle_{AB} \quad (1.16)$$

y en donde se considera una descomposición espectral para la matriz de densidad  $\rho^{AB} = \sum_i^{\dim\{\mathcal{H}\}} \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|_{AB}$ . La ecuación (1.15) determina el grado de no clasicidad a partir de la métrica de la información cuántica de Fisher. Desde una perspectiva geométrica, este proceso de optimización consiste en seleccionar la dirección del semieje más corto de un elipsoide que se encuentra dentro de una esfera unitaria. Por esta razón la potencia interferométrica es proporcional al eigenvalor más pequeño de la matriz de Fisher, o sea  $\lambda_{\min}(M_{AB})$ . En el caso de un estado puro  $|\psi\rangle\langle\psi|_{AB}$ , esto se reduce a la entropía de entrelazamiento (D. Girolami, 2013),  $\mathcal{P}_A(|\psi\rangle\langle\psi|_{AB}) = 2(1 - \text{Tr}[\rho_A^2])$ . Si estamos hablando de un ensamble térmico, la matriz de densidad  $\rho = \sum_i^{\dim\{\mathcal{H}\}} \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ , tendrá eigenvalores  $\lambda_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$ , donde  $\beta = \frac{1}{kT}$ , con  $k$  la constante de Boltzman,  $E_i$  la energía asociada al eigenestado  $|\psi_i\rangle$  y  $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$ , como la función de partición.

## II. Topología y fases geométricas

En este capítulo, enfocamos a describir la estructura geométrica del espacio cuántico e identificamos las condiciones necesarias en la que el sistema queda invariante bajo ciertas deformaciones adiabáticas. También, explicamos las propiedades geométricas de estos sistemas y los categorizamos de acuerdo a sus simetrías. En la primera parte, describimos los fundamentos de la topología que necesitamos aplicar a nuestro espacio cuántico, además, clasificamos los distintos tipos de sistemas topológicos a partir de sus simetrías internas e introducimos el concepto de invariante topológica que será fundamental en el tratamiento a desarrollar. En la segunda parte, explicamos el teorema adiabático, las condiciones de adiabaticidad y las fases geométricas.

### 2.1. Topología

En matemáticas, la rama que se encarga de estudiar el comportamiento de las métricas de los espacios y las propiedades que se preservan a partir de variaciones continuas en sus normas, es la topología. Formalmente, para dos conjuntos  $M$  y  $N$ , sea una función  $f$  continua, tal que,  $f : M \rightarrow N$ , o sea que es biyectiva de  $M$  a  $N$ , entonces decimos que las topologías  $\gamma_M$  y  $\gamma_N$ , son topológicamente equivalentes.

En todas las ramas de la física hay topología, en particular, en física de la materia condensada esta propiedad global del espacio cuántico se ve manifestada a partir del surgimiento de algunos fenómenos tales como, la fase de Berry y el efecto Hall cuántico (Aoki, 2011; Xiao et al., 2010) , entre otros, de tal manera que este mapeo no trivial entre espacios causa que emerjan invariantes topológicas que se mantienen constantes cuando este mapeo se hace bajo deformaciones continuas.

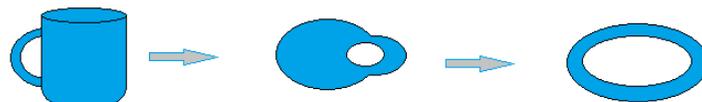


Figura 2.1. Deformación topológica entre una taza y una dona

En otras palabras, una invariante topológica es una propiedad del espacio topológico, la cual es invariante bajo deformaciones continuas, esto es, si un espacio  $M$  siempre posee una propiedad cada espacio que sea homeomórfico a  $M$  también poseerá esta propiedad. Un homeomorfismo o isomorfismo topológico es una función continua entre dos espacios topológicos y que tiene una función continua inversa. Esto lo podemos observar en la figura 2.1, que representa un homeomorfismo entre una taza y una dona. Entre estos dos objetos la invariante topológica asociada es el número de hoyos el cual es  $\gamma_m = \gamma_n = 1$ .

### 2.1.1. Clasificación topológica y simetrías

Desde física de altas energías hasta materia condensada, existe una amplia gama de invariantes topológicas propias de los sistemas y estas dependerán de sus simetrías intrínsecas. Debido a nuestro interés, nos limitaremos a la clasificación la cual categoriza diez clases de aislantes y superconductores topológicos de Hamiltonianos no interactuantes entre partículas (Schnyder et al., 2008), a partir de las simetrías  $\mathcal{T}$  “inversión temporal”,  $\mathcal{P}$  “partícula-hueco” y  $\mathcal{S}$  “quiral o sublattice” (tabla 2.1).

La simetría de inversión temporal TRS (por sus siglas en inglés, time reversal symmetry), es una propiedad fundamental en un sistema asociada a la invariancia del Hamiltoniano a una transformación de inversión temporal,  $\mathcal{T} : t \rightarrow -t$ , es decir, se invierte la dirección del tiempo. Rigurosamente hablando, la invariancia respecto a la TRS se puede formular como,  $[\mathcal{T}, H] = 0$ . Entonces, si el Hamiltoniano conmuta con el operador de inversión temporal decimos que este será invariante ante dicha transformación. Además, cabe destacar que el operador  $\mathcal{T}$  es proporcional a un operador complejo conjugado, ya que  $\mathcal{T}\hat{x}\mathcal{T}^{-1} = \hat{x}$ ,  $\mathcal{T}\hat{p}\mathcal{T}^{-1} = -\hat{p}$ , lo cual conduce a  $\mathcal{T}[\hat{x}, \hat{p}]\mathcal{T}^{-1} = -[\hat{x}, \hat{p}]$  o  $\mathcal{T}i\mathcal{T}^{-1} = -i$ , concluimos entonces que el operador  $\mathcal{T}$  es anti-unitario. Por regla general, tenemos que un operador anti-unitario puede expresarse como el producto de un operador unitario y un operador complejo conjugado. Matemáticamente podemos expresar este hecho como,  $\mathcal{T} = U_t K$ , con  $U_t^\dagger = U_t^{-1}$ . El sistema quedará invariante si aplicamos el operador  $\mathcal{T}$  dos veces, entonces,  $\mathcal{T}^2 = U_t K U_t K = U_t U_t^* = e^{i\varphi}$ . Esto implica que,  $U_t = e^{i\varphi} U_t^T = e^{i\varphi} (e^{i\varphi} U_t^T)^T = e^{2i\varphi} U_t$ , por ende,  $e^{i\varphi} = \pm 1$ . Por lo tanto, el operador de TR cumple que  $\mathcal{T}^2 = \pm 1$ .

Cuadro 2.1. Clasificación a partir de simetrías en el Hamiltoniano no interactuante de una partícula, para aislantes y superconductores topológicos, extraído de (Schnyder et al., 2008).

Clase	TRS	PHS	SLS	d=1	d=2	d=3
A (unitario)	0	0	0	-	$\mathbb{Z}$	-
AI (ortogonal)	+1	0	0	-	-	-
AII (simpléctico)	-1	0	0	-	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
AIII (quiral-unitario)	0	0	1	$\mathbb{Z}$	-	$\mathbb{Z}$
BDI (quiral-ortogonal)	+1	+1	1	$\mathbb{Z}$	-	-
CII (quiral-simpléctico)	-1	-1	1	$\mathbb{Z}$	-	$\mathbb{Z}_2$
D	0	+1	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	-
C	0	-1	0	-	$\mathbb{Z}$	-
DIII	-1	+1	1	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$
CI	+1	-1	1	-	-	$\mathbb{Z}$

Por sus siglas en inglés, TRS es “time-reversal symmetry”, PHS es “particle-hole symmetry” y SLS es “sublattice (or chiral) symmetry”. En las últimas tres columnas “d” representa la dimensión espacial en donde los símbolos  $\mathbb{Z}$  y  $\mathbb{Z}_2$  son las invariantes topológicas asociadas a esa clase, en las columnas de las simetrías el valor 0 denota la ausencia de dicha simetría, mientras que, los valores  $\pm 1$  indican su presencia y el signo dependerá de la potencia cuadrada del operador.

Por otra parte, la simetría de partícula-hueco o simetría de conjugación de carga PHS (por sus siglas en inglés, particle-hole symmetry), también juega un papel muy importante en la clasificación de los Hamiltonianos de una sola partícula. En física de altas energías, PHS también conocida como conjugación de carga es una transformación que cambia una partícula en su antipartícula. Por otro lado, en física de la materia condensada, la PHS emerge como una simetría aproximada entre electrones (estados ocupados sobre el nivel de Fermi) y huecos (estados desocupados por debajo del nivel de Fermi). De manera similar, la PHS se puede expresar en términos del operador de conjugación de carga  $\mathcal{C}$ , el cual cambia la partícula en su antipartícula, esto es, dejar invariante la masa, pero invertir el

signo de la carga. Consecuentemente, el operador  $\mathcal{C}$  también es anti-unitario y se puede expresar como  $\mathcal{C} = U_c K$ , análogamente se cumple la relación,  $\mathcal{C}^2 = U_c U_c^* = \pm 1$ .

Cuando el sistema posee TRS y PHS, se dice que tiene simetría de subred o simetría quirral SLS (por sus siglas en inglés, sublattice symmetry). El operador que define esta simetría compuesta es simplemente el producto de estas dos simetrías,  $\mathcal{S} = \mathcal{T} \cdot \mathcal{C}$ . Hay que hacer notar, que el operador  $\mathcal{S}$  no tendrá una simetría ordinaria ya que no conmuta, sino que anti-conmuta con el Hamiltoniano,  $\mathcal{S}H\mathcal{S}^{-1} = U_t U_c^* H U_c^T U_t^{-1} = -H$ , y donde  $\mathcal{S}^2 = 1$ . Cabe mencionar que un sistema que posea esta simetría tendrá un espectro de energías simétrico, ya que para cualquier eigenestado con vector de onda  $k$  y energía  $E_+(k) > 0$  habrá una energía correspondiente con  $E_-(k) = -E_+(k)$ .

### 2.1.2. Simetría quirral

Esta simetría juega un papel importante en la clasificación de Hamiltoniano de una sola partícula y por lo general se observa claramente en el efecto de desdoblamiento que provoca en el espectro de energías. La quiralidad de un objeto la podemos definir como una propiedad óptica en el que el objeto propio no es imagen especular de sí mismo. Matemáticamente un Hamiltoniano es quirral si cumple (Asbóth et al., 2015),

$$\hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma}^\dagger = -\hat{H} \quad (2.1)$$

Para que el operador  $\hat{\Gamma}$  sea quirral, no solamente debe de ser unitario sino que además debe de cumplir con otros tres criterios extras. Primero, debe ser un operador hermitiano, así que, se puede escribir resumidamente como  $\hat{\Gamma}^\dagger\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^2 = 1$ . Si esto es cierto, el operador  $\hat{\Gamma}$  anticonmuta con el Hamiltoniano  $\{\hat{\Gamma}, \hat{H}\} = 0$ .

Segundo, debe de ser un operador local que actúa sobre el subespacio en cuestión, en el modelo SSH este espacio es sobre el grado de libertad interno de cada celda unitaria “m” y los elementos de matriz de  $\hat{\Gamma}$  entre distintos sitios  $m \neq m'$  son despreciables, esto es,  $\langle m, \alpha | \hat{\Gamma} | m', \alpha' \rangle = 0$  para cualquier  $\alpha, \alpha' \in \{A, B\}$ . Así pues, el operador  $\hat{\Gamma}$  se proyecta localmente sobre cada sitio  $m$ , de tal modo que, la acción global del operador quirral puede considerarse equivalente en todas las celdas unitarias y cada una de esas acciones se puede pensar como un operador  $\hat{\gamma}$  actuando sobre el grado de libertad interno, i.e.,

$$\hat{\Gamma} = \hat{\gamma} \oplus \hat{\gamma} \oplus \cdots \oplus \hat{\gamma} = \bigoplus_{m=1}^N \hat{\gamma} \quad (2.2)$$

para un número  $N$  de celdas unitarias.

Tercero, el operador  $\hat{\Gamma}$  debe de ser robusto. Para entender esto, digamos que contamos con un conjunto de parámetros  $\zeta$  que se pueden poner dentro de un solo vector  $\vec{\zeta} \in \Xi$ , en donde  $\Xi$ , es un conjunto de todas las deformaciones que se pueden realizar. Ahora, en lugar de pensar en las simetrías de un Hamiltoniano refirámonos a las simetrías de un conjunto de Hamiltonianos  $\{H(\zeta)\}$ . Entonces este conjunto tiene simetría quirál representada por  $\hat{\Gamma}$  si,

$$\forall \vec{\zeta} \in \Xi, \hat{\Gamma} \hat{H}(\vec{\zeta}) \hat{\Gamma}^\dagger = -\hat{H}(\vec{\zeta}) \quad (2.3)$$

Se dice que cuando un Hamiltoniano sea quirál respecto a un operador, tendrá una dirección preferencial de giro definido bajo dicho operador.

### 2.1.3. Invariantes topológicas: Winding number

Las invariantes topológicas o adiabáticas son cantidades que solo dependen de la topología del espacio y podemos decir que no hay una única ecuación para determinarlas sino que existen distintas formas y dependerán del aislante o superconductor que estemos tratando. La forma que tengan estas invariantes topológicas estará caracterizada por la presencia de ciertas simetrías en el Hamiltoniano, la dimensionalidad del sistema y los efectos de desorden. Por fines de simplicidad y dado por nuestro interés, consideraremos sistemas que son invariantes en traslación, o sea, sin efectos de desorden.

La complejidad de estas invariantes es muy cambiante, por esta razón, para fines prácticos nos enfocaremos en un sistema de dos niveles y sólo en aquellas invariantes que pertenezcan al grupo de los enteros. Las invariantes que cumplan este requerimiento pertenecerán a la categoría de las invariantes  $\mathbb{Z}$  (Guo, 2016). El número de Chern y el winding number, son algunas de estas invariantes  $\mathbb{Z}$  que al menos en física se ha visto que son clave fundamental en la descripción de la geometría del espacio cuántico. A diferencia del número de Chern que es un mapeo homeomorfo,  $f: T^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$ , el winding number es un mapeo,  $f: \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ , cuyo espacio paramétrico se encuentra en  $\mathbb{R}^2$  y su mapeo se puede visualizar como una banda cerrada que se puede deformar y encierra al origen del

plano  $\mathbb{R}^2$ . La función de este número o índice, es determinar el número de veces que la trayectoria da vueltas encerrando a cierto punto crítico (origen) y que como veremos, si se trata de sistemas unidimensionales (1D), éste caracteriza muy bien la presencia de fases no triviales acumuladas en una evolución sobre una trayectoria cerrada, ya que se relaciona con la fase de Berry (Asbóth et al., 2015).

Por lo general, el winding number se define en un espacio complejo y por lo tanto lo podemos calcular a partir de la expresión,

$$\xi = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\alpha}^{\beta} \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z_0} dt \quad (2.4)$$

Siendo,  $\gamma: [\alpha, \beta] \rightarrow \mathbb{C}$ , una trayectoria cerrada paramétrica en  $t$  y que define si encierra al punto  $z_0$  en el plano complejo. Es decir, el índice complejo define una curva en el plano complejo y al realizarse una evolución cerrada determina el número de polos que encierra la trayectoria.

## 2.2. Condición de adiabaticidad y presencia de fases geométricas

La condición adiabática es la restricción o límite que imponemos para que nos adentremos en una aproximación adiabática y es aquí donde surgen las fases geométricas, por lo tanto, el imponer una restricción adiabática en la evolución de una deformación es fundamental para que obtengamos una descripción topológica. En un Hamiltoniano de dos bandas se dirá que una deformación es adiabática si, se mantiene el gap finito entre la banda de conducción y de valencia, las simetrías intrínsecas del Hamiltoniano no se rompen y si la evolución paramétrica se ha realizado lo suficientemente suave, tal que, el sistema haya permanecido en su estado estacionario base (Born & Fock, 1928), por lo tanto, esto no ha provocado que el sistema sufra una transición de energía.

Sino se cumpliera la condición de adiabaticidad y se deformara rápidamente el parámetro, las invariantes topológicas que determinan las fases geométricas en una evolución cerrada ya no serían más un caracterizador de la no trivialidad de estos sistemas. Por otro lado, la no adiabaticidad produciría que se romperían las simetrías del sistema provocando que el gap se colapse y genere transiciones a estados más excitados.

### 2.2.1. Teorema adiabático

Expuesto lo anterior, resulta importante encontrar una relación matemática que nos permita conocer cuando un proceso puede ser considerado adiabático y de esta manera demostrar que una consecuencia de esta restricción es el surgimiento de fases topológicas (Kato, 1950). Para resolver esto, consideremos una familia de eigenestados instantáneos,

$$H(t)|\phi_n(t)\rangle = E_n(t)|\phi_n(t)\rangle \quad (2.5)$$

Con  $E_1(t) < E_2(t) < \dots$ , de tal manera, que no haya degeneraciones.

Si a un tiempo  $t = 0$ ,  $|\psi\rangle = |\phi_n(0)\rangle$  para alguna  $n$  y si entonces variamos  $H(t)$  muy lentamente de  $0 \leq t \leq T$ . Entonces, al tiempo  $T$  tendremos  $|\psi\rangle \approx |\phi_n(T)\rangle$  salvo algún cambio en la fase debido a la geometría de la trayectoria. Además, tenemos que despreciar posibles transiciones de probabilidad a otros estados  $|\phi_k(t)\rangle$  con  $k \neq n$ . Partimos, de una función de onda en la forma,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\phi_n(t)\rangle \quad (2.6)$$

sustituimos (2.6) en la ecuación de Schrödinger:  $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$ , tal que,

$$i\hbar \sum_n (\dot{a}_n(t)|\phi_n(t)\rangle + a_n(t)|\dot{\phi}_n(t)\rangle) = \sum_n a_n(t) E_n(t)|\phi_n(t)\rangle \quad (2.7)$$

proyectamos (2.7) con el bra  $\langle\phi_k(t)|$ ,

$$i\hbar \dot{a}_k = (E_k - i\hbar \langle\phi_k|\dot{\phi}_k\rangle) a_k - i\hbar \sum_{n \neq k} a_n \langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle \quad (2.8)$$

Por otro lado, podemos relacionar el término  $\langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle$  como un elemento matricial de  $H(t)$  en el espacio instantáneo de eigenestados (2.6), de tal manera que tomando la derivada respecto del tiempo, tenemos,

$$\dot{H}(t)|\phi_n(t)\rangle + H(t)|\dot{\phi}_n(t)\rangle = \dot{E}_n(t)|\phi_n(t)\rangle + E_n(t)|\dot{\phi}_n(t)\rangle \quad (2.9)$$

proyectamos por el eigenestados  $\langle\phi_k(t)|$  con  $k \neq n$ , entonces,

$$\langle\phi_k|\dot{H}|\phi_n\rangle + E_k \langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle = E_n \langle\phi_k|\dot{\phi}_n\rangle \quad (2.10)$$

por ende, tenemos la relación,

$$\langle \phi_k | \dot{\phi}_n \rangle = \frac{\langle \phi_k | \dot{H} | \phi_n \rangle}{E_n - E_k} \quad (2.11)$$

sustituimos (2.11) en (2.8),

$$i\hbar \dot{a}_k = (E_k - i\hbar \langle \phi_k | \dot{\phi}_k \rangle) a_k - i\hbar \sum_{n \neq k} a_n \frac{\langle \phi_k | \dot{H} | \phi_n \rangle}{E_n - E_k} \quad (2.12)$$

Notemos de esta última expresión que si el término  $\frac{\langle \phi_k | \dot{H} | \phi_n \rangle}{E_n - E_k}$ , se vuelve cero, entonces  $|a_k| = 1$ , y entonces la función de onda que empieza en  $|\phi_k\rangle$  permanecerá en  $|\phi_k\rangle$ . Si ignoramos este término extra tenemos,

$$a_k(t) = a_k(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t [E_k(t') dt' - i\hbar \langle \phi_k(t) | \dot{\phi}_k(t) \rangle]\right) \quad (2.13)$$

donde  $\vartheta(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_k(t') dt'$ , es la fase dinámica y  $\gamma(t) = i \int_0^t \langle \phi_k(t') | \dot{\phi}_k(t') \rangle dt'$ , es la fase geométrica. Entonces, podemos reexpresar a nuestra función de onda como,

$$|\psi(t)\rangle = a_k(0) e^{i\vartheta(t)} e^{i\gamma(t)} |\phi_n(t)\rangle \quad (2.14)$$

Tenemos qué mencionar que a diferencia de la fase dinámica que se puede remover mediante un cambio de coordenadas, la fase geométrica es una invariante de norma y no puede ser removida y solamente dependerá de la geometría del espacio, tal que funciona a partir del transporte paralelo del eigenestado sobre la trayectoria paramétrica. En la figura (2.3), se dibuja la evolución paramétrica de un estado puro definido en el espacio de Hilbert en una curva cerrada.

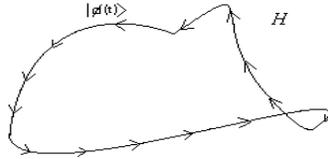


Figura 2.2. Evolución paramétrica en una trayectoria cerrada por un estado puro  $|\phi(t)\rangle$ .

Por otra parte, la aproximación adiabática se dará cuando el término,

$$\frac{\langle \phi_k | \dot{H} | \phi_n \rangle}{E_n - E_k} \ll 1 \quad (2.15)$$

o bien, si consideramos el eigenestado base y el primer estado excitado, esta relación se puede entender de manera análoga como,

$$|\langle \phi_1 | \dot{H} | \phi_0 \rangle| \ll \Delta_{10}(t) \quad (2.16)$$

donde  $\Delta_{10}$  representa el gap de energía más pequeño entre los eigenestados instantáneos  $|\phi_1(t)\rangle$  y  $|\phi_0(t)\rangle$ . Por lo tanto, la variación en la energía respecto al parámetro  $t$  tiene que ser mucho menor al gap  $\Delta_{10}$  para que el eigenestado permanezca estacionario, (2.16) es también conocida como la condición de adiabaticidad y que como vemos ésta trae una consecuencia en un cambio en la fase cuyo valor es invariante y depende solamente de la topología del sistema.

### 2.2.2. Fase de Berry

Dentro del marco de fases geométricas hay una gran variedad y estas dependerán del tipo de trayectoria, la forma del eigenestado que evoluciona y el espacio en que nos encontremos, entre otras cosas. La fase geométrica más conocida posiblemente es la fase de Berry y ésta se basa en la evolución de un eigenestado puro sobre una trayectoria cerrada y adiabática (Berry & A, 1984). Consideremos un eigenestado puro  $|n, \mathcal{R}\rangle$ , tal que, el Hamiltoniano  $H = H(\mathcal{R})$  depende de un conjunto de parámetros  $\mathcal{R} = (\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_2, \dots)$ , los cuales, definen una trayectoria cerrada  $\mathcal{C}$ , y, realicemos una deformación suave de este espacio paramétrico  $\mathcal{R}(\alpha)$ , donde  $\alpha$  es el parámetro que variamos adiabáticamente y puede ser el tiempo, el momento de la zona de Brillouin, etc. Identificamos de la ecuación (2.14) a la fase de Berry como,

$$\gamma_n^B = \oint_{\mathcal{C}} d\mathcal{R} \cdot \mathcal{A}_n(\mathcal{R}), \text{ mod } 2\pi \quad (2.17)$$

En donde tenemos que  $\mathcal{A}_n(\mathcal{R}) = i \left\langle n, \mathcal{R} \left| \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} \right| n, \mathcal{R} \right\rangle$ , también conocido como el “conector de Berry” y es a partir de éste donde se generara el transporte paralelo. La ecuación 2.17, también puede reexpresarse de otra forma y esto lo podemos lograr mediante el teorema de Stokes como,

$$\gamma_n^B = \oint_{\mathcal{S}} d\mathcal{S} \cdot \Omega_n(\mathcal{R}) \quad (2.18)$$

donde  $\Omega_n$  es la “curvatura de Berry” (Shen, 2011). Se encuentra definida de forma tensorial como,  $\Omega_n^{\mu\nu} = \nabla_\mu \mathcal{A}_n^\nu(\mathcal{R}) - \nabla_\nu \mathcal{A}_n^\mu(\mathcal{R}) = i[\langle \nabla_\mu(n, \mathcal{R}) | \nabla_\nu(n, \mathcal{R}) \rangle - \langle \nabla_\nu(n, \mathcal{R}) | \nabla_\mu(n, \mathcal{R}) \rangle]$ , donde  $\nabla_\mu = \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}_\mu}$  es el gradiente.

Como se ha mencionado, la evolución paramétrica no necesariamente se debe de dar respecto del tiempo sino que puede ser en términos de otro parámetro. Por ejemplo, en un arreglo cristalino la fase de Berry se puede definir a partir de la evolución de uno de los eigenestados sobre el espacio de Brillouin (Qi & Zhang, 2011) y en este caso el parámetro sería el vector de onda  $\vec{k}$ . En este espacio la fase de Berry respecto de un eigenestado  $|u_{n,k}\rangle$  puede tomar la forma,

$$\gamma_n^B = i \oint_{BZ} \langle u_{n,k} | \nabla_k | u_{n,k} \rangle \cdot d\vec{k} \quad (2.19)$$

donde  $\nabla_k$  es el gradiente del vector de onda  $k$ .

En trabajos previos (Thouless, 1983), se logró determinar, bajo una deformación adiabática, la polarización eléctrica en un cristal, cuya expresión es,

$$\mathbb{P}_e = -e \sum_n \int_{BZ} \frac{1}{(2\pi)^d} d\vec{k} \cdot \langle u_{nk} | i \nabla_k | u_{nk} \rangle \quad (2.20)$$

donde “ $e$ ” es la carga del electrón, la suma se realiza sobre “ $n$ ” (etiqueta para el número de bandas de los estados ocupados) y  $|u_{nk}\rangle$  son los eigenestados sobre la zona o espacio de Brillouin (BZ) de dimensión “ $d$ ”.

Si comparamos (2.19) y (2.20) encontramos que la polarización eléctrica es proporcional a la fase de Berry, y de acuerdo a la teoría descrita, podemos aseverar que  $\mathbb{P}_e = -e \frac{\gamma_B}{(2\pi)^d}$ . Entonces, a partir de ahora podemos pensar a la fase de Berry en un sistema cuántico como una observable salvo factores de proporcionalidad, y he aquí, la importancia intrínseca de las fases geométricas, ya que no solamente es una herramienta matemática, sino que se ha demostrado que es una propiedad fundamental de la mecánica cuántica. Por esta razón, en todo sistema adiabático o topológico, la descripción más realista será considerando fases geométricas debido a que están vinculadas a las observables y estas invariantes adiabáticas serán propiedades muy importantes en el sistema que determinarán su evolución.

También podemos calcular la polarización eléctrica en el espacio real “ $R$ ” de las energías. Simplemente es un cambio de base a partir de los estados de Wannier, los cuales son la transformada de Fourier de los estados  $|u_{nk}\rangle$  de la zona de Brillouin (Xiao et al., 2010) y tomando el operador canónico conjugado,  $i\hat{\nabla}_k = \hat{X}$ , el operador de posiciones, tenemos que (2.20) cambia como,

$$\mathbb{P}_e = -e \sum_n \int_R \frac{dR}{(2\pi)^d} \langle w_{nR} | \hat{X} | w_{nR} \rangle. \quad (2.21)$$

La ecuación (2.21) para fines prácticos en sistemas compuestos resulta aproximada y en otras ocasiones no funciona. Esto se debe a la forma del operador de posición de una sola partícula  $\hat{X}$ . Existe una mejor forma para formular a la polarización eléctrica en sistemas compuestos (Resta, 1998), donde el Hamiltoniano de una partícula puede estar definido por subsistemas y se encuentra bajo condiciones de frontera periódicas.

### 2.2.3. Fase geométrica y polarización eléctrica de Resta

En sistemas 1D, la fase de Berry, también es conocida como la fase de Zak. En este apartado no entraremos en mucho detalle en la parte teórica sino más bien nos centraremos en hacer una conexión con observables e interpretaremos sus propiedades. Las fases geométricas o topológicas surgen después de realizar un proceso de deformación adiabática sobre algún parámetro del Hamiltoniano y este proceso, deberá de cumplir el principio de adiabaticidad que básicamente consiste en que el gap del Hamiltoniano permanezca finito, lo cual se logra variando muy lentamente el parámetro de deformación del Hamiltoniano sobre un tiempo prolongado, tal que sea mucho mayor al orden de magnitud del gap.

A partir de las funciones de onda  $|u_{nk}\rangle$ , definimos a la polarización eléctrica, que como ya vimos está relacionada directamente con la fase de Berry después de realizar un ciclo adiabático sobre la cadena cerrada. Hacemos uso de la definición de la polarización eléctrica, definida por (Resta, 2000a; Resta & Sorella, 1999) en un sistema con condiciones de frontera periódicas y teniendo en mente que se trata de un sistema compuesto. Entonces tenemos,

$$\mathbb{P}_e = \frac{e}{2\pi} \text{Im} \ln \langle \psi | e^{i\delta\hat{X}} | \psi \rangle \quad (2.22)$$

donde  $\hat{X} = \sum_i^N \hat{x}_i$  es el operador de posición para el sistema compuesto, “e” es la carga del electrón y  $\delta = \frac{2\pi}{Na}$ . Sea  $\hat{\chi} = e^{i\delta\hat{X}}$  un operador compuesto, vemos que la parte imaginaria del valor esperado de este operador estará relacionada con la polarización eléctrica. De aquí fácilmente podemos distinguir que la magnitud,

$$\gamma = \text{Im} \ln \langle \psi | e^{i\delta\hat{X}} | \psi \rangle \quad (2.23)$$

es la fase de Berry. Por lo tanto, podemos decir que la fase de Berry es una observable salvo unas constantes de proporcionalidad y que se puede medir por algún método como resonancia nuclear (Haider, 2017). Tenemos que aclarar que la ecuación (2.22) solo es válida para eigenestados puros, con  $d = 1$  y considerando condiciones de frontera periódicas.

#### 2.2.4. Fase geométrica y polarización eléctrica en un ensamble

Dado que en un ensamble térmico el sistema se encuentra en una mezcla estadística de estados, no se puede utilizar la fase de Berry para determinar la fase geométrica, ya que este sistema colectivo no está descrito por un estado puro sino más bien por una matriz de densidad mixta. Por lo tanto, de acuerdo a (Resta, 2000) y su formulación para la obtención de la fase geométrica, extrapolamos esta idea a sistemas tipo ensamble (Bardyn et al., 2018) y análogamente obtenemos una ecuación similar a (2.22) en la forma,

$$\mathbb{P}_e = \frac{e}{2\pi} \text{Im} \ln \text{Tr}(\rho_E e^{i\delta\hat{X}}) \quad (2.24)$$

donde  $\rho_E$  es la matriz de densidad del ensamble,  $\rho_E = \sum_i^{\dim\{\mathcal{H}\}} \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$  donde  $\lambda_i$  es el eigenvalor correspondiente al eigenestado  $|\psi_i\rangle$  de la descomposición espectral, “e” es la carga del electrón,  $e^{i\delta\hat{X}}$  es el operador de Resta, siendo  $\hat{X}$  el operador de posición del sistema compuesto. Por lo tanto, la ecuación (2.24), determina la polarización eléctrica de un ensamble.

### III. Modelo y resultados

En este capítulo describimos el modelo de estudio y describimos sus principales características, enfocándonos en la estructura de bandas y los estados borde de un aislante topológico simple. En la primera parte, nos centramos en la información relacionada a los eigenestados, simetría y topología, entre otras cosas. En la segunda parte, exponemos el comportamiento del entrelazamiento intrínseco al del número de Schmidt, así como su conexión con la geometría del espacio cuántico. En la tercera parte y última, hacemos una extensión en el estudio de las fases geométricas conociendo el efecto térmico y las correlaciones cuánticas que se tienen en el sistema.

#### 3.1. Modelo Su-Schrieffer-Heeger

El modelo SSH (Su-Schrieffer-Heeger) (Su et al., 1979) consiste en una red cristalina de  $N$  celdas unitarias en las cuales existen dos sitios internos de posición atómica, tipo  $A$  o tipo  $B$ , las cuales se van alternando simétricamente a lo largo de la cadena, y se encuentran conectadas por enlaces dobles o sencillos (Asbóth et al., 2015).

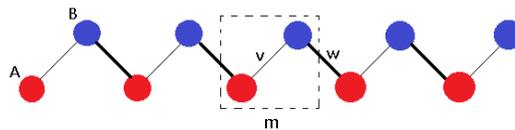


Figura 3.1. Modelo SSH 1D. Estructura de  $N = 5$  uniceldas alternando átomos tipo  $A$  (rojo) y átomos tipo  $B$  (azul) en cada celda unitaria “ $m$ ” con amplitudes de transición “ $v$ ” (enlace sencillo) y “ $w$ ” (enlace doble) correspondientes a los tunelajes de intracelda e intercelda respectivamente.

En la figura 3.1, se esquematiza el modelo SSH el cual es una cadena 1D compuesta por átomos tipo  $A$  (rojos) o tipo  $B$  (azules) y que se van alternando a lo largo de la cadena, cada celda unitaria está compuesta por un átomo rojo y uno azul. La cadena se encuentra conectada por dos tipos de enlaces o amplitudes de tunelaje, los cuales son las amplitudes de tuneo intracelda  $v$  o intercelda  $w$ , y es por medio de estos parámetros con los cuales se forma el sistema compuesto.

### 3.1.1. Hamiltoniano SSH simple

El Hamiltoniano de este modelo (Apéndice 6) se puede escribir como,

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

donde  $v$  y  $w$ , son los parámetros correspondientes a las amplitudes de tunelaje cuántico de transición intra-celda e inter-celda, respectivamente, y representan una cuantificación de la probabilidad de que un electrón brinque hacia su vecino correspondiente.

Este sistema compuesto puede verse como dos subespacios conjuntos, el espacio de dimensión externa  $\mathcal{H}_{ext}$  asociado a la posición “ $m$ ” de las celdas unitarias sobre la red y el espacio interno  $\mathcal{H}_{int}$  que corresponde al tipo de átomo  $A$  o  $B$  en cada unicelda. Por lo tanto, la dimensión total del espacio de Hilbert es:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ext} \otimes \mathcal{H}_{int} = N \otimes 2$ .

La expresión (3.1), también puede ser reexpresada utilizando las matrices de Pauli  $SU(2)$  para el espacio de cada celda,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

Estas matrices cumplen el álgebra conmutativa  $[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$ , además  $\hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i$  es un operador hermitiano y unitario  $\hat{\sigma}_i^2 = 1$ .

A partir de la base de sitio  $\{A, B\}$  y con un poco de álgebra llegamos a la siguiente expresión del Hamiltoniano,

$$\hat{H}_{SSH} = v \sum_{m=1}^N |m\rangle\langle m| \otimes \hat{\sigma}_x + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1\rangle\langle m| \otimes \hat{\sigma}_+ + |m\rangle\langle m+1| \otimes \hat{\sigma}_-) \quad (3.3)$$

Donde  $\hat{\sigma}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y)$ . Como vemos, en esta última ecuación se logra apreciar de manera más clara el papel que juega cada parte, el término acompañado por “ $v$ ” está definido a partir de  $\sigma_x$  puesto que es el encargado del acoplamiento intra-celda mientras que los que están acompañados por “ $w$ ” son acoplamientos inter-celda y se manifiesta en la aparición de los operadores  $\hat{\sigma}_+$  y  $\hat{\sigma}_-$ , los cuales son los encargados de mover al electrón sobre la red.

Cabe mencionar que el tratamiento que desarrollamos está limitado a considerar a  $v, w \geq 0$ , todo esto para fines de simplicidad.

### 3.1.2. Espectro de energías SSH simple

Debido a la simetría quirál del sistema (Batra & Sheet, 2019) existe un desdoblamiento de las energías de valencia y conducción. Además existen unos estados muy particulares los “estados borde” los cuales se encuentran en la interface entre la banda de conducción y la banda de valencia y cuyas energías son  $E = 0$  en la región  $v < w$  y en la región  $v > w$  se comportan exponencialmente crecientes.

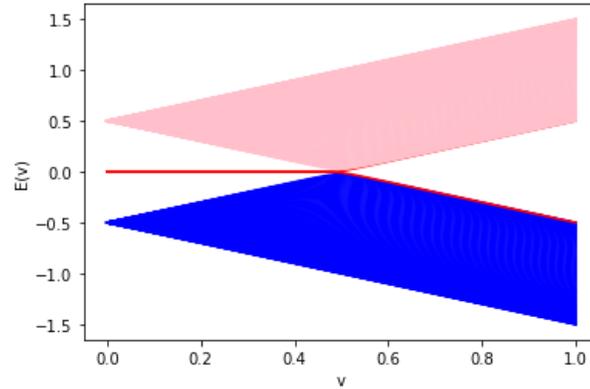


Figura 3.2. Espectro de energías SSH en el espacio real Las energías dispersadas por la banda de valencia son negativas (curvas azules) y las energías dispersadas en la banda de conducción son positivas (curvas rosas). Se observa en medio de las dos bandas que existen unos estados de borde (curvas rojas) que se mantienen con energía cero para  $v < w$  y que a partir de  $v = w$  se separan exponencialmente, para  $N = 100$  celdas unitarias y  $w = 0.5$ .

En la figura 3.2, se presenta el espectro de energías en función del parámetro “ $v$ ” (amplitud de tunelaje intracelda) para el Hamiltoniano (3.1) y hemos fijado a  $w = 0.5$  (amplitud de tunelaje intercelda). Se utilizaron 100 celdas unitarias en la cadena. Debido a la simetría quirál del modelo SSH simple, hay un desdoblamiento en las energías en  $E = 0$ , por lo cual tenemos  $2N$  estados resultantes, es decir, para 100 uniceldas sobre la cadena dadas tenemos 200 estados. Justo en el punto de simetría  $E = 0$ , graficamos en rojo a los 2 estados bordes y como vemos en la región  $v < w$  estos estados se mantienen en una energía cero pero al llegar al punto  $v = w$  comienzan a separarse. La aparición de estos estados bordes o estados topológicos, es la motivación u objeto de estudio más importante en estos sistemas ya que se ha visto que son la razón de la protección topológica en el sistema la cual promueve una robustez en las observables.

Así mismo, en el límite termodinámico, cuando  $N \rightarrow \infty$ , las propiedades del bulto de la cadena dominan sobre los efectos de los estados de conducción o de borde, por lo que, en

este límite podemos considerar al sistema como una cadena infinita y aproximarla a un anillo utilizando condiciones de frontera periódicas mediante una transformación de Fourier al espacio  $k$  o de momentos.

### 3.1.3. Hamiltoniano del bulto SSH simple

En el límite termodinámico, las propiedades del sistema se ven gobernadas por el bulto. Es de interés conocer la forma del Hamiltoniano en este espacio. En este proceso usamos una expansión para la base  $|m, \alpha\rangle = \text{sitio} \otimes \text{átomo}$  en series de potencias, cuyas funciones sean ondas planas,

$$|m, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikma} |k, \alpha\rangle, \quad k \equiv k_j = \frac{2\pi j}{Na} \quad (3.4)$$

donde  $\alpha \in \{A, B\}$  es la etiqueta para el tipo de átomo y  $k$  es el momento cristalino en el espacio de Bloch de nuestro sistema que es invariante traslacional.

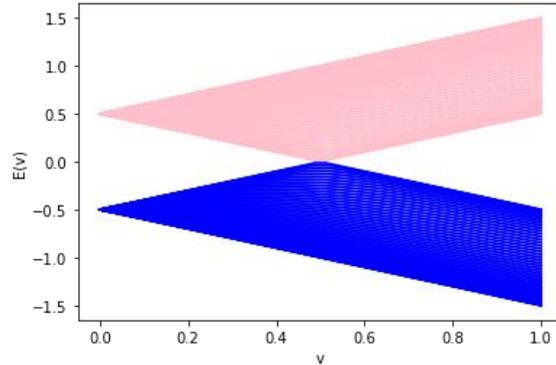


Figura 3.3. Espectro de Energías del bulk SSH. En este caso se aprecia que los estados metálicos han desaparecido al usar condiciones de frontera periódicas para  $N = 100$  celdas unitarias y  $w = 0.5$ .

En la figura 3.3, se presenta el espectro de energías en función del parámetro “ $\nu$ ” para la cadena unidimensional con condiciones de frontera periódicas, o sea convirtiendo la cadena en un anillo de  $N = 100$  uniceldas, con el tunelaje  $w = 0.5$  y como se observa desaparecen en la dispersión de las energías los estados bordes. Es importante resaltar que aún se sigue preservando la simetría quiral en el desdoblamiento de las energías a lo largo de la energía  $E = 0$ .

Dado a la composición de la estructura cristalina del SSH y por el teorema de Bloch es fácil transformar el Hamiltoniano (3.1) a un espacio reducido que depende del grado interno, de

tal manera que obtenemos dos espinores asociados a cada una de las dos bandas de los pseudo-espines,

$$H_{SSH} = \sum_k \psi_k^\dagger H(k) \psi_k \quad (3.5)$$

donde  $\psi_k = (a_k, b_k)^T$  es el espinor de Nambu y la matriz Hamiltoniana en el espacio  $k$  es,

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

La matriz Hamiltoniana del espacio de momentos o matriz del bulto también la podemos reexpresar de manera vectorial haciendo uso de las matrices de Pauli y obtenemos,

$$H(k) = \vec{h}(k) \cdot \vec{\sigma} \quad (3.7)$$

en donde el ‘winding vector’  $\vec{h}(k) \equiv \vec{h}(x) + \vec{h}(y) = (v + w \cos k)\hat{x} + w \sin k \hat{y} = (v + w \cos k, w \sin k, 0)$  y  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ .

En el apéndice (A.6) se describe con detalle el modelo de amarre fuerte para el modelo SSH simple así como también se determinan los eigenvalores de la estructura de bandas, siendo estos,  $\varepsilon_k^\pm = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k} = |v + we^{ik}|$  (Apéndice 6.15). Haciendo uso de los eigenvalores calculamos los eigenestados asociados,

$$\begin{pmatrix} -\varepsilon_k^\pm & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & -\varepsilon_k^\pm \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Con  $|a_k|^2 + |b_k|^2 = 1$  obtenemos,

$$-\varepsilon_k^\pm a_k + (v + we^{-ik})b_k = 0 \rightarrow b_k = \frac{a_k \varepsilon_k^\pm}{v + we^{-ik}} \quad (3.9)$$

sustituimos (3.9) en la relación de ortonormalidad y obtenemos que,  $a_k = \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Por lo tanto, el eigenestado resultante lo podemos expresar como,

$$\begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{v + we^{-ik}}{\varepsilon_k^\pm} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{h_x - ih_y}{\pm \sqrt{h_x^2 + h_y^2}} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Por trigonometría, identificamos las relaciones,  $\cos(\phi(k)) = \frac{h_x}{\sqrt{h_x^2+h_y^2}}$  y  $\sin(\phi(k)) = \frac{h_y}{\sqrt{h_x^2+h_y^2}}$ , donde  $\phi(k) = \tan^{-1}\left(\frac{h_y}{h_x}\right)$ . Haciendo uso de esta notación (3.10) se simplifica como,

$$|u_k^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\phi(k)} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

El signo hace referencia a la banda de conducción “+” o a la banda de valencia “-”.

Es importante reconocer que de acuerdo a la forma Hamiltoniana (3.6) el modelo SSH, cae en la categoría de aislante topológico BDI (quiral-ortonormal) ya que este conmuta con el operador de inversión temporal  $[T, H] = 0$  así como su potencia cuadrada  $[T^2, H] = [T, H] = 0$ . También conmuta con el operador partícula-hueco  $[S, H] = 0$ , y su potencia cuadrada  $[S^2, H] = [S, H] = 0$ , y esto repercute directamente en la presencia de simetría quirral; tenemos la regla de anticonmutación  $\{S, H\} = 0$ , o bien,  $SHS^\dagger = -H$ .

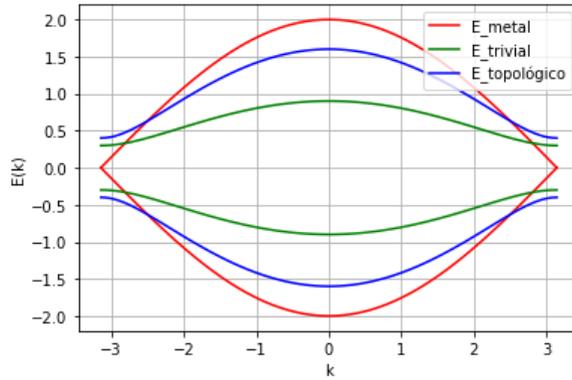


Figura 3.4. Espectro de energías en el espacio  $\mathbf{k}$ . Para el caso trivial (curva verde)  $v = 0.6, w = 0.3$ , caso topológico (curva azul)  $v = 0.6, w = 0.3$  y para el caso metálico (curva roja)  $v = 0.5, w = 0.5$  el gap se cierra.

En la figura 3.4, se presenta el valor de los eigenvalores en el espacio  $k$  para la primera zona de Brillouin  $k \in \{-\pi, \pi\}$ , se consideró para la curva roja a  $v = w = 0.5$ , en el caso de la curva verde fijamos  $v = 0.6$  y  $w = 0.3$ , mientras que en la curva azul tomamos a  $v = 0.3$  y  $w = 0.6$ . Tenemos que hacer notar las dos regiones en nuestro sistema, ya que para  $v > w$  tenemos un gap abierto correspondiente a un aislante trivial, mientras que en  $v < w$  un gap de igual forma se trata de un aislante pero en esta situación se trata de un aislante

topológico, puesto que, en este régimen aparecen los estados de borde. Hay que hacer notar que en ambos casos el gap permanece finito separando la banda de conducción y la banda de valencia. En cuanto al caso metálico se trata de una singularidad y ocurre en el punto crítico  $v = w$ , como veremos más adelante estas regiones quedan enteramente caracterizadas por la topología de la estructura de bandas.

### 3.1.4. Diferencia entre los estados borde y estados de bulto: Distribución de probabilidades

Es importante conocer los estados que se encuentran presentes en el sistema ya que a partir de estos calcularemos el entrelazamiento y la polarización eléctrica, para esto analizaremos la distribución de sus probabilidades. Como ya se ha mencionado existen dos tipos de estados presentes en el sistema los estados del bulto que forman las bandas de valencia (azul) y conducción (rosa) (figura 3.2), y los estados borde los cuales se encuentran en la superficie y son los encargados de conducir en la región topológica  $v < w$ , pero en la región trivial  $v > w$  se vuelven aislantes como los estados del bulto.

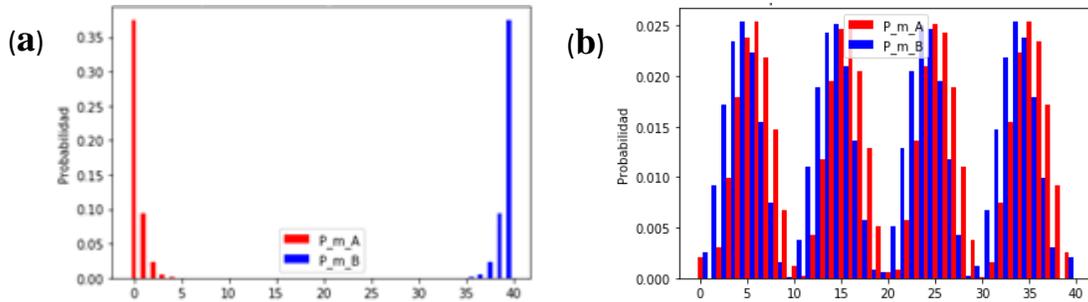


Figura 3.5. Distribución de probabilidades en función de la posición sobre la cadena. (a) Estado borde y (b) estado del bulk, con  $v = 0.1$ ,  $w = 0.5$  y  $N = 40$  uniceldas.

En este apartado solo analizamos la diferencia entre los estados borde y estados bulto. Más adelante, como veremos, dentro de los estados bulto existen diferencias en su distribución de amplitudes, teniendo distintos valores para el entrelazamiento y polarización eléctrica. Sin entrar mucho en detalle sobre los estados bulto analicemos uno de estos estados y comparémoslo con un estado borde.

La motivación de la figura 3.5 es identificar la clara diferencia en la localización de la probabilidad para los estados borde y estados bulk. Con respecto a la distribución de

probabilidades, podemos apreciar en la figura 3.5(a) que los estados borde se encuentran localizados en los bordes de la cadena, de aquí la denominación y su interpretación. Por otro lado, en la figura 3.5(b) se grafica la distribución de probabilidad de uno de los estados del bulto la cual se encuentra distribuida a lo largo de la cadena y no parece haber una localización de la probabilidad en algún sitio de la cadena. Es importante mencionar que solo graficamos la distribución de probabilidad de un estado del bulto y que en principio la distribución de otro estado de bulto será distinta a la figura 3.5 (b).

### 3.1.5. Dimerizado trivial y topológico para los estados borde

Estos estados borde tienen una peculiaridad en sus límites dimerizados. Existen dos casos límites que les llamaremos “dimerizados” en el que una de las amplitudes de tuneleo se hace igual a cero. Estos casos son:  $v = 0$  y  $w \neq 0$  (dimerizado topológico) y  $v \neq 0$  y  $w = 0$  (dimerizado trivial).

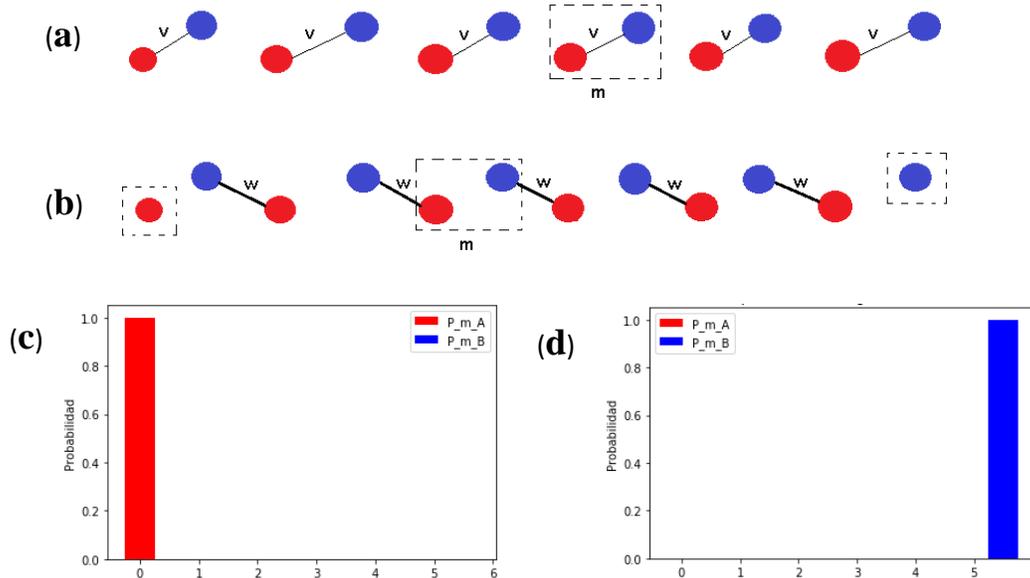


Figura 3.6. Cadena completamente dimerizada. (a) Dimerizado trivial con  $v = 1$ ,  $w = 0$  y (b) dimerizado topológico con  $v = 0$ ,  $w = 1$ , los cuadros punteados al final de la cadena indican los estados aislados del resto, para  $N = 6$  celdas unitarias. (c) y (d) representan la máxima probabilidad de localización de estos estados bordes.

Como se puede observar en la figura 3.6 (a) cuando estamos en el dimerizado trivial las uniceldas se desconectan y quedan  $N$  singletes, mientras que, en el caso topológico (figura 3.6 (b)) quedan  $N$  singletes y un sitio aislado en cada uno de los extremos de la cadena con

una probabilidad de 1 en ambos lados de la cadena (figura 3.6 (c)-(d)). Estos estados son robustos a deformaciones que mantienen al winding number invariante, de tal forma que, la corrección a la energía a primer orden debido a una pequeña perturbación en el Hamiltoniano se quedará invariante sobre estas eigenenergías siendo todavía igual a cero (Kane, 2013).

La ecuación de eigenvalores que cumplen estos dímeros son,

$$\hat{H}(|m, A\rangle \pm |m, B\rangle) = \pm(|m, A\rangle \pm |m, B\rangle) \quad (3.12)$$

$$\hat{H}(|m, B\rangle \pm |m + 1, A\rangle) = \pm(|m, B\rangle \pm |m + 1, A\rangle) \quad (3.13)$$

La ecuación (3.12) corresponde al caso trivial y la ecuación (3.13) al caso topológico, a partir de estas relaciones podemos llegar a sus Hamiltonianos en el espacio  $k$ . Estos son  $H(k) = \hat{\sigma}_x$  y  $H(k) = \hat{\sigma}_x \cos k + \hat{\sigma}_y \sin k$  respectivamente y cuyas energías de los singletes son  $E = \pm 1$ , esto es, son independientes del número de onda y si colocamos a una partícula en estos estados, su función de onda no se distribuirá a lo largo de la cadena (Meier et al., 2016). En el caso topológico tenemos también dos estados aislados al final de la cadena, que tienen energía cero y cumplen la igualdad  $\hat{H}|1, A\rangle = \hat{H}|N, B\rangle = 0$ .

### 3.1.6. Correspondencia borde-bulto

Se ha demostrado que existe una relación entre los estados bordes y la invariancia topológica del bulto. Por lo cual, cuando tengamos un winding number  $\xi \neq 0$ , ésto se ve reflejado físicamente en la aparición de estos estados bordes y entonces se trata de un aislante topológico, mientras que para  $\xi = 0$  no hay estados borde y el aislante es trivial. Vemos ahora como la geometría del espacio cuántico se conecta y funciona en estos sistemas topológicos. Esto también puede imaginarse como un proceso adiabático en el que el gap del Hamiltoniano ha sido deformado de una región  $v < w$  a otra  $v > w$  y que en el punto  $v = w$  el gap se ha colapsado, pero al reabrirse han emergido estos estados topológicos. Cabe mencionar que los Hamiltonianos en las regiones  $v < w$  y  $v > w$  no son topológicamente equivalentes, ya que el gap se ha cerrado y esto se trata como una discontinuidad no integrable.

### 3.2. Caracterización topológica en el modelo SSH simple

Los aislantes topológicos se encuentran categorizados de acuerdo a sus simetrías y también debido al rompimiento de éstas se puede determinar qué aislantes topológicos son equivalentes entre sí. En el caso del modelo SSH, este posee simetría partícula-hueco y de inversión temporal, lo que automáticamente le induce simetría quiral. De tal forma, que el Hamiltoniano del SSH 1D entra en la clase topológica BDI (Velasco & Paredes, 2017) y es descrita por la invariante topológica  $\mathbb{Z}$ .

En el capítulo 2, se habló sobre deformaciones en el gap de un Hamiltoniano y se demostró que mientras este se mantenga finito existirán algunas cantidades que caracterizan la estructura de bandas en su totalidad. Estas cantidades o índices se llaman invariantes topológicas. Dependiendo de la dimensionalidad y geometría del espacio cuántico, estas invariantes serán distintas, por ejemplo, en sistemas de dimensión 2D la invariante topológica será el número de Chern ya que ésta se puede asociar fácilmente al flujo producido entre los dos grados de libertad; sin embargo, para sistemas con dimensión impar la invariante de Chern no podrá caracterizar al sistema. Así que, podemos decir que dependerá del sistema el tipo de invariante topológica que surgirá.

#### 3.2.1. Winding number y el modelo SSH simple

Para sistemas de 1D como el SSH la invariante topológica asociada es el número de giro o mejor conocido en inglés como winding number. Ésta se puede visualizar fácilmente en el espacio  $k$  a partir de una trayectoria cerrada sobre el plano  $h_x - h_y$  formada por el vector  $\vec{h}(k) \equiv \vec{h}(x) + \vec{h}(y) = (v + w \cos k)\hat{x} + w \sin k \hat{y} = (v + w \cos k, w \sin k, 0)$  que ya hemos definido previamente en el Hamiltoniano (3.7) el cual se encuentra construido en el espacio de momentos (Kane, 2013).

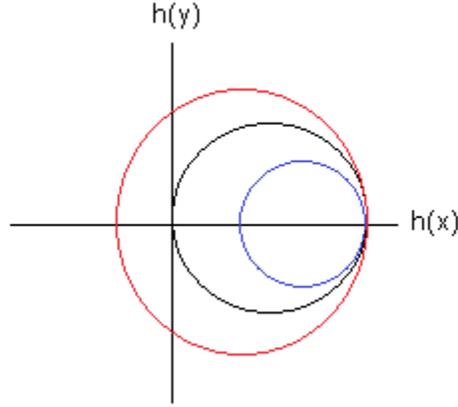


Figura 3.7. Winding number en el plano  $h_x - h_y$ . En el caso  $v < w$  observamos que la trayectoria cerrada asociada encierra el punto crítico (curva roja) mientras que para  $v > w$  se queda afuera este punto (curva azul), en  $v = w$  se interpreta geoméricamente la singularidad (curva negra).

La trayectoria que define  $\vec{h}(k)$  es un círculo de radio  $w$  que se encuentra desplazado del origen una distancia  $v$  y es en esta curva donde se define el winding number (Ecuación 2.4), siendo,  $\vec{h}(k): [-\pi, \pi] \rightarrow \mathbb{C}$ , una trayectoria cerrada paramétrica en  $k$  sobre la primera zona de Brillouin y que define si encierra al punto  $z_0 = 0$  en el plano complejo.

En la figura 3.7, se pueden distinguir dos regiones las cuales están separadas a partir de la singularidad  $v = w$  (curva negra). Si  $v > w$  (curva azul) el círculo no encerrará la singularidad que se encuentra en el origen, mientras que para  $v < w$  (curva roja) sí encerrará a la singularidad o polo definido en la ecuación (2.4). Entonces el winding number es un índice complejo, que nos determina la existencia o no, de puntos polares dentro de una trayectoria cerrada después de realizar una ciclo sobre la curva.

El winding number lo podemos calcular a partir de la expresión (Asbóth et al., 2015),

$$\begin{aligned}
 \xi &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{-\pi}^{\pi} \frac{h'(k)}{h(k) - z_0} dk = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d}{dk} \ln h(k) dk \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} d \ln(v + we^{ik}) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} d \left( \ln|v + we^{ik}| + i \text{Arg}(v + we^{ik}) \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d \left( \text{Arg}(v + we^{ik}) \right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d \left( 2\pi - \text{Arctan} \left( \frac{w \sin k}{v + w \cos k} \right) \right) = \begin{cases} 1, v < w \\ 0, v > w \\ !, v = w \end{cases} \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

donde hemos redefinido convenientemente  $h(k) = h(x) + ih(y) = v + we^{ik}$ , para integrar en el plano complejo. Aquí  $Arg(z)$  hace referencia al valor principal del argumento o fase del número complejo  $z$  (Asbóth et al., 2015; Schnyder et al., 2008). Conviene reescribir en términos del valor principal como,  $Arg(h_x, h_y) = 2\pi n - Arctan\left(\frac{h_y}{h_x}\right)$ , donde  $arg(h_x, h_y) = Arctan\left(\frac{h_y}{h_x}\right)$  es el ángulo formado entre el eje  $h_x$  y  $h_y$ ,  $n$  es el número de vueltas efectuadas sobre la curva en sentido de las manecillas del reloj, en nuestro análisis consideramos  $n = 1$ , es decir, solo realizamos un giro. Aquí hemos también considerado una descomposición polar del tipo  $z = re^{i\phi}$ , tomando el logaritmo natural,  $\ln z = \ln r + i\phi = \ln|z| + iArg(z) = \ln|z| + i(2\pi n - arg(z))$ . Es importante tener en cuenta que el valor principal del argumento  $Arg(z)$ , se encuentra restringido al intervalo  $[-\pi, \pi)$ . En la ecuación (3.14), tendremos que el winding number,  $\xi = 1$  cuando se encierra al origen del plano  $h_x - h_y$  después de una evolución sobre la curva  $h(k)$ , por otro lado,  $\xi = 0$  será cuando no la encierre, y en el punto de la singularidad  $v = w$  el winding number  $\xi = !$ , no estará definido.

### 3.2.2. Polarización eléctrica en el modelo SSH simple

Como ya hemos hablado tenemos que distinguir entre los estados del bulto y los estados bordes de la cadena finita, puesto que, estos últimos poseen propiedades distintas al resto de los estados. En la aproximación de una cadena periódica los estados borde desaparecen, por lo que, para estudiar las propiedades de estos estados nos quedaremos con el Hamiltoniano de la expresión (3.1) que describe una cadena finita o abierta. En este análisis debido al interés por describir a estos peculiares estados, hay que hacer notar que su presencia o no, en la dispersión de energías del aislante juega un papel clave en la topología del sistema. Cabe mencionar que, el número de estados bordes estará directamente relacionado con la invariancia topológica.

Dado que los eigenestados del Hamiltoniano (3.1) son reales podemos expresarlos como,

$$|\psi_n\rangle = \sum_{m=1}^N [C_{m,n}^A |m, A\rangle + C_{m,n}^B |m, B\rangle]. \quad (3.15)$$

Aquí los factores  $C_{m,n}^A$  y  $C_{m,n}^B$ , son las amplitudes asociadas a cada posición sobre la cadena para el eigenestado  $|\psi_n\rangle$  correspondiente.

Sustituyendo adecuadamente (3.15) en la polarización eléctrica,  $P_e = \frac{e}{2\pi} \text{Im} \ln \langle \psi | e^{i\delta \hat{X}} | \psi \rangle$  (2.22) y haciendo uso de su descomposición espectral, obtenemos una expresión explícita para la polarización eléctrica del estado  $\alpha$ ,

$$P_e = \frac{e}{2\pi} \text{Im} \ln \left( \sum_{m=1}^N e^{i\delta m} \left[ |C_{m,\alpha}^A|^2 + |C_{m,\alpha}^B|^2 \right] \right) \quad (3.16)$$

donde  $\hat{X} = \sum_i^N \hat{x}_i = \sum_{m=1}^N m [ |m, A\rangle \langle m, A| + |m, B\rangle \langle m, B| ]$ , es el operador de posición para el sistema compuesto, “ $e$ ” es la carga del electrón y  $\delta = \frac{2\pi}{Na}$ . Sea  $\hat{\chi} = e^{i\delta \hat{X}}$  un operador de muchos cuerpos, vemos que la parte imaginaria del valor esperado de este operador estará relacionada con la polarización eléctrica, de aquí fácilmente podemos distinguir que la magnitud  $\gamma = \text{Im} \ln \langle \psi | e^{i\delta \hat{X}} | \psi \rangle$  es la fase de Berry. Por lo tanto, podemos decir que la fase de Berry es una observable salvo unas constantes de proporcionalidad y que se puede medir por algún método como resonancia nuclear (Haider, 2017). Tenemos que aclarar que la ecuación (3.16) solo es válida para eigenestados puros y considerando condiciones de frontera periódicas.

Para poder caracterizar globalmente el modelo SSH tenemos que seleccionar de forma conveniente algunos de sus eigenestados y calcularles sus propiedades, tales como la polarización eléctrica o entrelazamiento, de esta forma se capturara la tendencia general. El sistema SSH es un sistema de  $2N$  eigenestados, debido a su espectro de energía quiral los etiquetamos ordenadamente como,  $E = \{E_{-N}, E_{-N+1}, \dots, E_{-1}, E_{-0}, E_0, E_1, \dots, E_{N-1}, E_N\}$ , sin embargo,  $E_{-i} = -E_i$  entonces,  $E = \{-E_N, -E_{N-1}, \dots, -E_1, -E_0, E_0, E_1, \dots, E_{N-1}, E_N\}$ . En la región  $v > w$  (régimen trivial) no hay estados borde, entonces tenemos  $E_0 \neq 0$ , mientras que en la región  $v < w$  (régimen topológico) sí hay estados borde y tenemos que  $E_0 = E_B \approx 0$ , bajo esta condición  $E = \{-E_N, -E_{N-1}, \dots, -E_1, 0, 0, E_1, \dots, E_{N-1}, E_N\}$ . Las energías negativas corresponden a la banda de valencia (curvas azules) (figura 3.2), las energías positivas (curvas rosas) (figura 3.2) corresponden a la banda de conducción. También es importante mencionar que se cumple la relación  $E_N > E_{N-1} > \dots > E_2 > E_1$ .

Como objeto de estudio consideremos una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias. Para caracterizar a la polarización eléctrica elegimos del conjunto de los posibles eigenestados,  $E = \{-E_{40}, -E_{39}, \dots, -E_1, -E_B, E_B, E_1, \dots, E_{39}, E_{40}\}$  solo los eigenestados  $E_B, E_1, E_{10}$  y  $E_{30}$ .

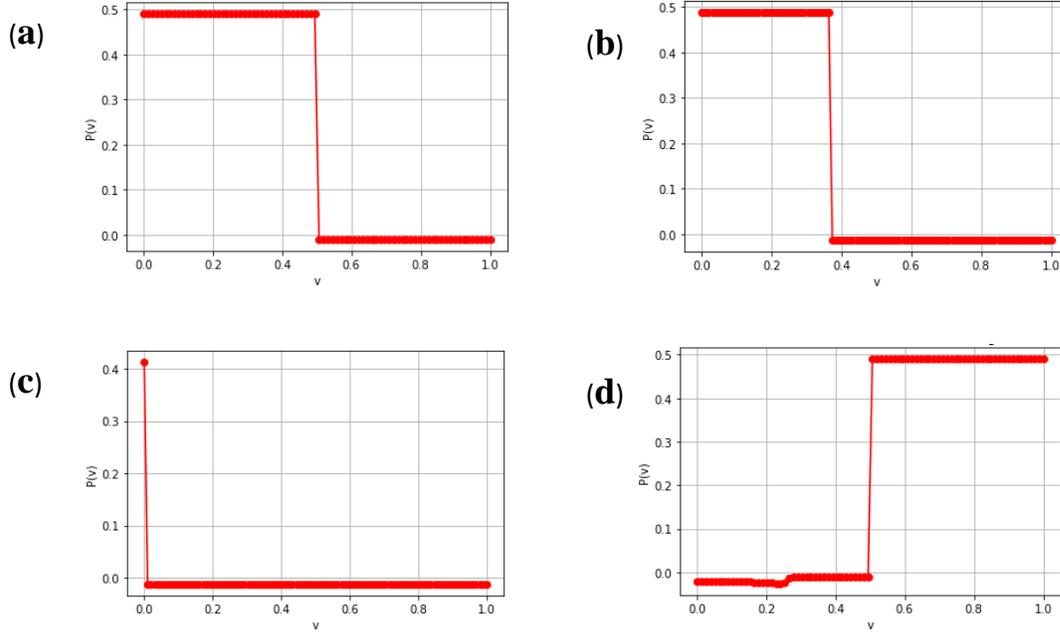


Figura 3.8. Fase geométrica acumulada o polarización eléctrica en el modelo SSH simple en función de las amplitudes de tuneo  $v$  para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias. En la figura 3.8 (a)-(d) se presenta la polarización eléctrica para (a) el estado del bultp  $E_1$ , (b) el estado del bultp  $E_{10}$ , (c) el estado del bulto  $E_{30}$  y (d) el estado borde  $E_B$ , para todos los estados se fijó el tunelaje intercelda  $w = 0.5$ .

Estamos interesados en calcular la polarización eléctrica ya que hemos visto que esta observable se encuentra relacionada con la fase de Berry vía el winding number y de esta manera tendremos una forma de saber cómo influyen estas fases geométricas en el sistema. En la figura 3.8 (a), se muestra la polarización eléctrica (2.22) en función de la amplitud de tuneo  $v$  para el estado del bulto  $E_1$  y se fijó a la amplitud de tuneo  $w = 0.5$ . Como se observa cuando  $v < w$  (región topológica) tenemos  $P_e = \frac{e}{2}$ , por otro lado cuando  $v > w$  (región trivial) tenemos  $P_e = 0$ , (“ $e$ ” es la carga del electrón) donde hemos considerado unidades naturales  $e = 1$ . En 3.8 (b) se presenta la polarización eléctrica para el estado del bulto  $E_{10}$  y en 3.8 (c) para el estado del bulto  $E_{30}$  y donde se seleccionó  $w = 0.5$ . Si comparamos las polarizaciones 3.8 (b) y 3.8 (c) con 3.8(a) vemos que al aumentar el nivel energético de los estados bulto,  $E_1 < E_{10} < E_{30}$ , se pierde el grado de la polarización eléctrica en la región  $v < w$  (régimen topológico) como se observa para el estado  $E_{10}$  (figura 3.8 (b)) y si seguimos incrementando hacia estados del bulto más energéticos  $E_{30}$  vemos que solo hay polarización eléctrica en el punto de dimerizado topológico (figura 3.8(c)), cuando  $v = 0$  y  $w \neq 0$ . Por otro lado, el comportamiento para el estado borde  $E_B$  es bastante diferente a los estados del bulto, ya que como se aprecia en la figura 3.8 (d), el

estado borde  $E_B$  tienen la polarización invertida respecto a los estados del bulto. Cabe destacar que esta peculiar propiedad la plasmamos aquí pero no profundizamos en este hecho. Por lo tanto, en 3.8 (d) para el estado borde tenemos que en la región  $v < w$  tiene una polarización eléctrica  $P_e = 0$  y en la región  $v > w$  se tiene una polarización eléctrica  $P_e = \frac{e}{2}$ . Es importante mencionar que debido al espectro quirral de las energías, la polarización de un estado del bulto positivo  $E_i$  correspondiente a la banda de conducción tiene una polarización análoga e igual en su polarización para el estado del bulto negativo  $-E_i$  correspondiente a la banda de valencia. Esto también se ha comprobado numéricamente, y tiene un fundamento teórico en la ecuación (3.16) ya que queda determinada por el cuadrado de los elementos de matriz de los eigenestados y por lo tanto no depende del cambio de signo de la función de onda. Es por esto que solo nos enfocaremos en describir las propiedades de los eigenestados  $E_B, E_1, E_{10}$  y  $E_{30}$ , ya que debido a la quiralidad del sistema tendremos que las propiedades de la polarización y del entrelazamiento serán iguales a la de los eigenestados  $-E_B, -E_1, -E_{10}$  y  $-E_{30}$ .

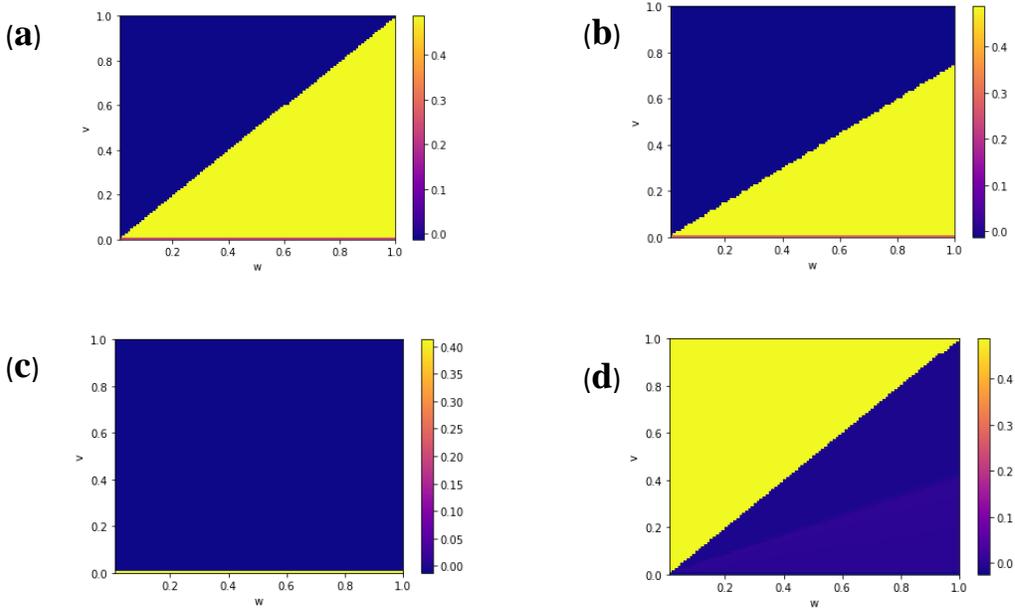


Figura 3.9. Diagrama de fase geométrica acumulada o polarización eléctrica en el modelo SSH simple en función de las amplitudes de tunelamiento  $v$  y  $w$ , para  $N = 40$  celdas unitarias. Polarización eléctrica para los estados (a)  $E_1$ , (b)  $E_{10}$ , (c)  $E_{30}$  y (d) el estado borde  $E_B$ .

En la figura 3.9 (a)-(d), se presenta la polarización eléctrica en función de los hoppings  $v$  y  $w$ , como se observa en la figura 3.9 (a) para el estado del bulto  $E_1$  la región  $v < w$

(régimen topológico) queda bien definida con una polarización eléctrica  $P_e = \frac{e}{2}$  y la región  $v > w$  (régimen trivial) tiene una polarización eléctrica  $P_e = 0$ , por otro lado, en las figuras 3.9 (b) y 3.9 (c) se observa como la polarización eléctrica se va perdiendo conforme tendemos hacia estados del bulto más energéticos. Este patrón ya lo vimos en la figura 3.8 (a)-(d). En la figura 3.9 (c), vemos como se ha perdido casi toda la polarización eléctrica en la región  $v < w$  (régimen topológico) y sólo en el punto de dimerización topológica en donde el tunelaje intracelda  $v = 0$  tenemos presencia de fase topológica y aunque la polarización eléctrica se preserva diremos que se trata de un caso de polarización trivial  $P_e(v = 0) = \frac{e}{2}$ .

El comportamiento para el estado borde  $E_B$  es bastante diferente a los estados del bulto, ya que como se aprecia en la figura 3.9 (d), los estados bordes tienen la polarización invertida respecto a los estados del bulto. Cabe destacar que esta propiedad ya la plasmamos en la figura 3.8 (d) para un tunelaje intercelda fijo en  $w = 0.5$ ; sin embargo, en la figura 3.9 (d) vemos que se cumple esto en principio para distintos valores del tunelaje  $w$ , por ende, para el estado borde tenemos que en la región  $v < w$  se tiene una polarización eléctrica  $P_e = 0$  y en la región  $v > w$  se tiene una polarización eléctrica  $P_e = \frac{e}{2}$ .

### 3.3. Entrelazamiento en el modelo SSH simple

A causa, de la forma del espacio compuesto bipartito *sitio*⊗*átomo* del SSH simple utilizamos la métrica de Schmidt para medir el grado de entrelazamiento, debido a su naturaleza, la cual, mide el entrelazamiento en sistemas bipartitos. El modelo SSH es una cadena compuesta por átomos tipo *A* ó *B* que se van alternando y se encuentran presentes en cada celda unitaria. Al medir el entrelazamiento en este sistema determinamos como cada subred se encuentra entrelazada o no respecto a la otra subred.

#### 3.3.1. Condición de máximo entrelazamiento y separabilidad

Para identificar cuando el sistema se encuentra máximamente entrelazado o pierde todo el entrelazamiento y se vuelve un sistema separable conviene partir de la matriz densidad en la forma,  $\rho_\lambda^{AB} = |\psi_\lambda^{AB}\rangle\langle\psi_\lambda^{AB}|$ . Tenemos entonces,

$$\rho_\lambda^{AB} = \sum_{m,n}^N [C_m^A C_n^A |m, A\rangle \langle n, A| + C_m^A C_n^B |m, A\rangle \langle n, B| + C_m^B C_n^A |m, B\rangle \langle n, A| + C_m^B C_n^B |m, B\rangle \langle n, B|] \quad (3.17)$$

En donde,  $|\psi_\lambda^{AB}\rangle = \sum_{m=1}^N [C_{m,\lambda}^A |m, A\rangle + C_{m,\lambda}^B |m, B\rangle]$ , es el eigenestado  $\lambda$  del sistema y cada  $C_m^\alpha$  es real, debido a que el Hamiltoniano es hermitiano. En la ecuación (3.17) hemos omitido el índice  $\lambda$  para simplificar la notación, pero es importante resaltar que la matriz densidad es propia de cada eigenestado del sistema. Ahora, calculamos la matriz reducida sobre la dimensión externa del sistema o el número de celda sobre la cadena, y de esta manera solo nos quedaremos con el grado interno del sistema el cual corresponde al tipo de átomo  $A$  ó  $B$ , calculamos la traza reducida  $\rho_{r,\lambda} = Tr_m[\rho_\lambda^{AB}]$ , y obtenemos,

$$\rho_{r,\lambda} = \begin{pmatrix} \sum_m^N |C_{m,\lambda}^A|^2 & \sum_m^N C_{m,\lambda}^A C_{m,\lambda}^B \\ \sum_m^N C_{m,\lambda}^B C_{m,\lambda}^A & \sum_m^N |C_{m,\lambda}^B|^2 \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

En este punto podemos calcular el entrelazamiento vía la expresión (1.12) para el número de Schmidt haciendo uso de la matriz densidad reducida (3.18). Para esto calculamos  $Tr(\rho_{r,\lambda}^2)$ , obtenemos,

$$Tr(\rho_{r,\lambda}^2) = \left(\sum_m^N |C_{m,\lambda}^A|^2\right)^2 + \left(\sum_m^N |C_{m,\lambda}^B|^2\right)^2 + 2\left(\sum_m^N C_{m,\lambda}^A C_{m,\lambda}^B\right)^2 \quad (3.19)$$

Por lo tanto, el número de Schmidt para el eigenestado  $\lambda$  queda definido como,

$$K_\lambda = \left( \left(\sum_m^N |C_{m,\lambda}^A|^2\right)^2 + \left(\sum_m^N |C_{m,\lambda}^B|^2\right)^2 + 2\left(\sum_m^N C_{m,\lambda}^A C_{m,\lambda}^B\right)^2 \right)^{-1} \quad (3.20)$$

El máximo entrelazamiento se dará cuando  $K_\lambda = 2$  y el sistema será separable cuando  $K_\lambda = 1$ . Esta condición se puede apreciar desde la matriz densidad reducida (3.18). En estos términos, el sistema se encontrara máximamente entrelazado si tenemos estados tipo Bell, por lo tanto,

$$\sum_m^N |C_{m,\lambda}^A|^2 = \sum_m^N |C_{m,\lambda}^B|^2 = \frac{1}{2}, \quad (3.21)$$

y también,

$$\sum_m^N C_{m,\lambda}^A C_{m,\lambda}^B = 0, \quad (3.22)$$

un estado tipo Bell puede escribirse en la forma,  $|\psi_\lambda^{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\psi_m^A, A\rangle + |\psi_m^B, B\rangle]$ , con  $|\psi_m^A\rangle = \sqrt{2} \sum_m C_m^A |m\rangle$  y  $|\psi_m^B\rangle = \sqrt{2} \sum_m C_m^B |m\rangle$ .

### 3.3.2. Número de Schmidt y vector de Bloch

Para poder tener una visualización del entrelazamiento en el sistema, calculamos el número de Schmidt en función de la amplitud de tunelaje intracelda “ $v$ ”, considerando una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias. Análogamente como en el análisis de la polarización eléctrica, para caracterizar al entrelazamiento elegimos del conjunto de los posibles eigenestados,  $E = \{-E_{40}, -E_{39}, \dots, -E_1, -E_B, E_B, E_1, \dots, E_{39}, E_{40}\}$  solo los eigenestados  $E_B, E_1, E_{10}$  y  $E_{30}$ .

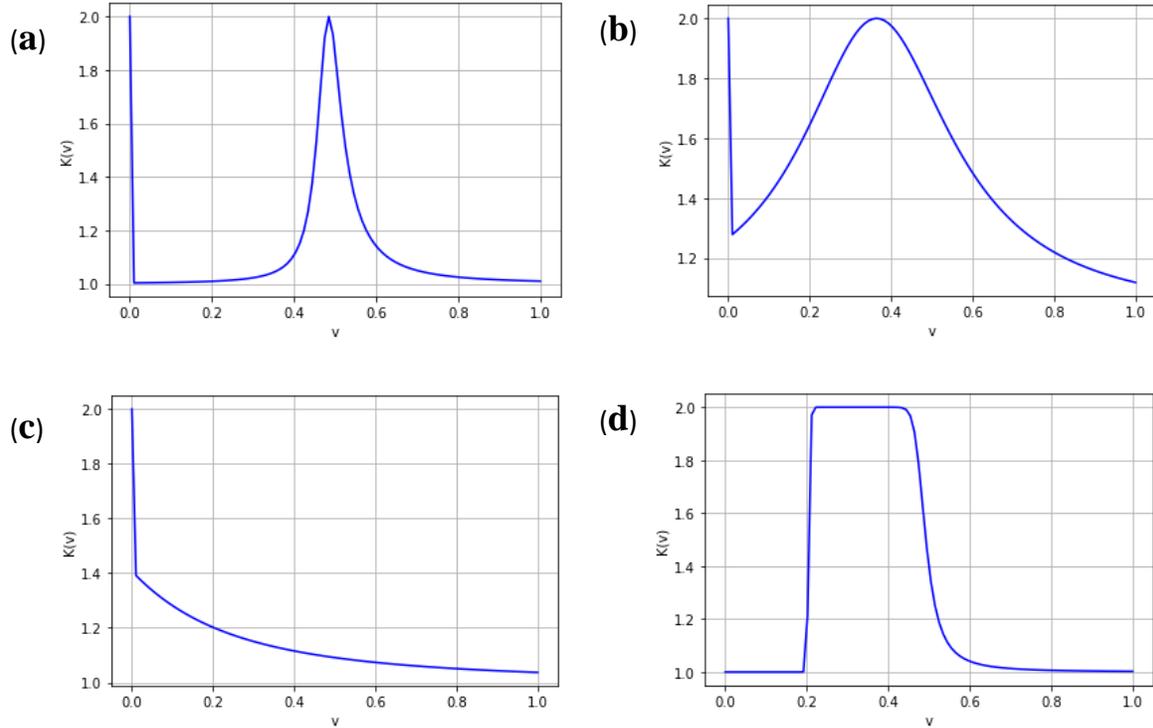


Figura 3.10. Entrelazamiento o número de Schmidt en función de la amplitud de tunelaje intracelda  $v$  para el sistema bipartito *sitio*⊗*átomo* del modelo SSH simple para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias. En las figuras 3.10 (a)-(d) se presentan los entrelazamientos con una amplitud de tunelaje  $w = 0.5$  para los estados de bulto (a)  $E_1$ , (b)  $E_{10}$ , (c)  $E_{30}$  y el estado borde (d)  $E_B$ .

En la figura 3.10 (a), se presenta el número de Schmidt para el eigenestado bulto  $E_1$  en función del tunelaje  $v$  para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias, como se aprecia el pico de máximo entrelazamiento se encuentra justo en el punto  $v = w$ , y no se trata de ninguna casualidad ya que es el punto de la transición de fase topológica o singularidad en el

winding number (figura 3.8 (a)). Además notemos que cuando  $v = 0$ ,  $w \neq 0$ , tenemos un máximo entrelazamiento. Esto se debe a que nos encontramos en el límite del dimerizado topológico. Vale la pena mencionar que conforme hacemos a  $N$  más grande, observamos que este pico se ajusta más como una delta de Dirac justo en el punto  $v = w$ . Aquí podemos mencionar que es por esta razón entre otras, que el entrelazamiento es un buen caracterizador de la transición de fase topológica en el sistema y por lo tanto resulta interesante encontrar una analogía con las fases geométricas. En la figura 3.10 (b), para el estado bulto  $E_{10}$  vemos que todavía está presente el máximo entrelazamiento para el caso extremo del dimerizado topológico, sin embargo, el pico de máximo entrelazamiento que antes estaba justo en el punto  $v = w$  (figura 3.10 (a)) ahora ya no se encuentra bien definido y se ha recorrido hacia la izquierda (figura 3.10 (b)). Esto se encuentra relacionado con el hecho de que la región  $v < w$  (régimen topológico) en el que hay polarización eléctrica o fase geométrica, se ha acotado para el estado bulto  $E_{10}$  (figura 3.8 (b)). Para la figura 3.10 (c) vemos como prácticamente el estado bulto  $E_{30}$  casi ya no tiene entrelazamiento y esto lo podemos relacionar con la polarización eléctrica del estado  $E_{30}$  (figura 3.8 (c)) donde se tiene el mismo comportamiento que el número de Schmidt. Además, notemos que para el estado  $E_{30}$  en el punto de dimerizado topológico  $v = 0$  y  $w \neq 0$  se preserva el máximo entrelazamiento, pero así como la polarización trivial  $P_e(v = 0) = \frac{e}{2}$ , nos referiremos al entrelazamiento en el punto de dimerizado topológico como un entrelazamiento trivial,  $K(v = 0) = 2$ .

En la figura 3.10 (d), se presenta el número de Schmidt para el estado borde  $E_B$  y como se observa tiene una robustez en el entrelazamiento debido a que en la región  $v < w$  (region topológica) se tiene entrelazamiento máximo  $K = 2$  para varios valores del tunelaje  $w$ . Cabe destacar que en la región  $v > w$  (región trivial) el entrelazamiento se pierde y el sistema se vuelve separable ya que  $K = 1$ . Es importante notar que para el estado borde parece que el entrelazamiento (figura 3.10 (d)) y la polarización eléctrica (figura 3.8 (d)) no guardan una relación intrínseca y por lo tanto, aunque el entrelazamiento en el estado borde es más robusto este no es un caracterizador de la fase geométrica y viceversa. Sin embargo, resulta interesante seguir estudiando su comportamiento en otros casos para ver si esto es una regla general y de qué manera se relaciona con los otros estados del bulto. Al igual que

la polarización eléctrica debido al espectro quirral de las energías el número de Schmidt o entrelazamiento de formación bipartito en el modelo SSH de un estado del bulto positivo  $E_i$  (banda de conducción) tiene una polarización análoga e igual en su polarización para el estado del bulto negativo  $-E_i$  (banda de valencia). Esto también se ha comprobado numéricamente, y tiene un fundamento teórico en la ecuación (3.20) ya que queda determinada por el cuadrado de los elementos de matriz de los eigenestados y por lo tanto no depende del cambio de signo de la función de onda. Es por esto que solo nos enfocaremos en describir las propiedades de los eigenestados  $E_B, E_1, E_{10}$  y  $E_{30}$ , ya que debido a la quiralidad del sistema tendremos que las propiedades de la polarización y del entrelazamiento serán iguales a la de los eigenestados  $-E_B, -E_1, -E_{10}$  y  $-E_{30}$ .

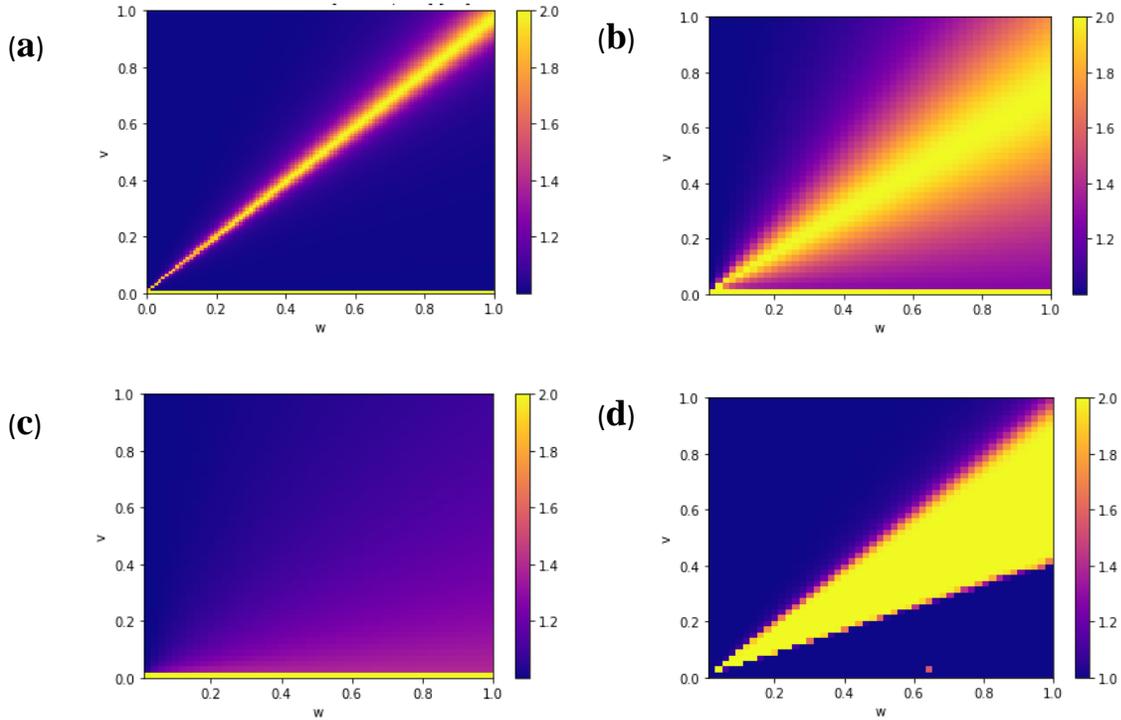


Figura 3.11. Diagrama de entrelazamiento o número de Schmidt en el modelo SSH en función de las amplitudes de tunelaje  $v$  y  $w$ , para una cadena con  $N = 40$  celdas unitarias. Entrelazamiento de formación o número de Schmidt para los estados de bulto (a)  $E_1$ , (b)  $E_{10}$ , (c)  $E_{30}$  y el estado borde (d)  $E_B$ .

En la figura 3.11(a)-(d), de forma más general hacemos un diagrama del entrelazamiento o el número de Schmidt para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias. En la figura 3.11 (a) se presenta el número de Schmidt para el estado  $E_1$  y como se observa para cualquier par de tunelajes que cumplan  $v = w$  (singularidad) se tendrá un número de Schmidt máximo  $K = 2$ , por lo que se ve una conexión intrínseca entre el entrelazamiento con la fase

geométrica involucrada (figura 3.9 (a)) ya que el número de Schmidt caracteriza la transición de fase topológica que presenta el winding number. Notemos que en  $v = 0$  y  $w \neq 0$  tenemos presencia de entrelazamiento por el dimerizado topológico. Por otro lado, notemos que está mejor definida la transición de fase para  $v$  y  $w$  pequeñas, y que conforme nos alejamos de la transición de fase el entrelazamiento se pierde en el modelo SSH simple. En la figura 3.11 (b) vemos como la transición de fase ya no está tan bien definida y el entrelazamiento sigue presente en la región  $v < w$  (régimen topológico) pero con menor intensidad. En la figura 3.11 (c) por otro lado, vemos como el entrelazamiento se ha perdido completamente, sin embargo, hay que notar que aún se ha preservado el entrelazamiento del punto de dimerizado topológico. Para el estado borde (figura 3.11 (d)) vemos que el entrelazamiento es máximo en la transición de fase topológica, sin embargo, debido a su robustez, en la figura 3.11 (d) no queda aún claro en este punto si el estado borde puede caracterizar la transición de fase topológica. Para solucionar esto seguiremos calculando el entrelazamiento en otros casos para determinar si se trata de una regla general.

Por ende, hemos capturado la tendencia del entrelazamiento o número de Schmidt (figura 3.11 (a)-(d)) y este es que se va perdiendo para estados bulto más energéticos. El estado borde es el más robusto en entrelazamiento pero el que mejor se relaciona con las fases geométricas o polarización eléctrica es el estado bulto  $E_1$  de menor energía.

El número de Schmidt se encuentra ligado a la geometría de la esfera de Bloch y la relación está dada en términos del vector de Bloch como,  $K = \frac{2}{(1+|r|^2)}$ , por lo tanto, resulta interesante entender cómo estas dos magnitudes varían entre sí. Una excepción a esta regla es cuando  $|r| = 0$ . Esto quiere decir que se contrae en el origen, hay máximo entrelazamiento y surgen los estados de Bell. Para un eigenestado particular  $|\psi_n\rangle$  podemos calcular el vector de Bloch asociado como,

$$r = \sqrt{\left( \text{tr}[\rho_n \sigma_x]^2 + \text{tr}[\rho_n \sigma_y]^2 + \text{tr}[\rho_n \sigma_z]^2 \right)} \quad (3.23)$$

donde  $\rho_n \equiv \text{Tr}_m(|\psi_n\rangle\langle\psi_n|)$  es la matriz densidad reducida sobre el espacio de sitio del eigenestado  $|\psi_n\rangle$ .

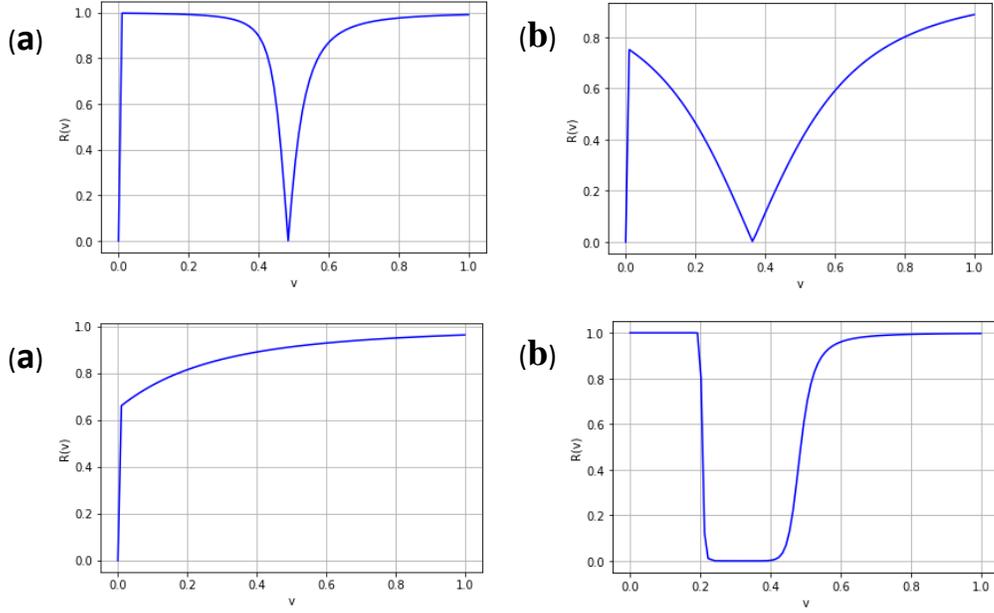


Figura 3.12 Vector de Bloch en función de la amplitud de tunelaje  $v$  para el sistema bipartito *sitio* $\otimes$ *átomo* del modelo SSH simple para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias. En las figuras 3.11 (a)-(d) se presentan las magnitudes del vector de Bloch con un tunelaje intercelda  $w = 0.5$  para los estados del bulto (a)  $E_1$ , (b)  $E_{10}$ , (c)  $E_{30}$  y el estado borde (d)  $E_B$ .

En la figura 3.12 (a)-(d) se presenta el vector de Bloch en función del hopping  $v$  y se ha fijado al tunelaje  $w = 0.5$ , para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias. En la figura 3.12 (a), se graficó el vector de Bloch para el estado bulto  $E_1$  y se observa que en el punto de transición topológico  $v = w$  se tiene que  $|r| = 0$  y si comparamos con la figura 3.10 (a), el entrelazamiento es máximo en ese mismo punto  $K = 2$ . Además, al igual que el número de Schmidt, el vector de Bloch en el punto de dimerizado topológico  $v = 0$  y  $w \neq 0$ , tiene un valor mínimo es  $|r| = 0$ , el vector de Bloch se colapsa al origen hay máximo entrelazamiento. En cambio, cuando el vector de Bloch  $|r| \rightarrow 1$  tendremos un entrelazamiento  $K = 1$ , y el sistema será separable. Si comparamos las figura 3.12 (b) con 3.10 (b), figura 3.12 (c) con 3.10 (c) y la figura 3.12 (d) con 3.10 (d), vemos la clara relación entre el vector de Bloch y el número de Schmidt.

En principio, el vector de Bloch (Ecuación 3.23) caracteriza al número de Schmidt debido a su definición del espacio geométrico de la esfera de Bloch que es la misma que caracteriza a un qubit o un sistema de dos niveles y que en el modelo SSH simple puede emplearse muy bien este enfoque debido al espacio interno o tipo de átomo  $A$  ó  $B$  (qubit) el cual es básicamente un sistema de dos niveles.

### 3.4. SSH extendido

Además de estudiar el modelo SSH simple que tiene dos amplitudes de tunelaje  $v$  y  $w$  a primeros vecinos, también consideramos un caso más general con una amplitud de tuneleo extra “ $z$ ” a segundos vecinos (C. Li & Miroshnichenko, 2018; Pérez-González et al., 2018), lo cual generará acoplamiento no local.

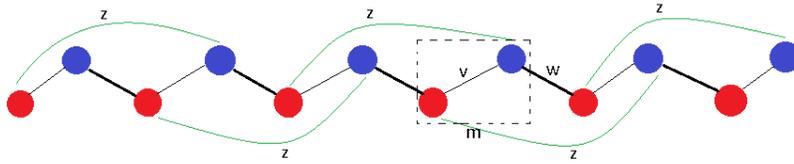


Figura 3.13. SSH extendido 1D. Esta cadena para  $N = 6$  uniceldas va alternando átomos tipo **A** (rojo) y átomos tipo **B** (azul) en cada celda unitaria  $m$  con amplitudes de transición  $v$  (enlaces sencillos) y  $w$  (enlaces dobles) correspondientes a los tunelajes intracelda e intercelda respectivamente y además tiene tunelaje “ $z$ ” a segundos vecinos con  $z \geq 0$  (líneas verdes).

En la figura 3.13, se esquematiza el modelo SSH extendido y al igual que el SSH simple posee un parámetro de tuneleo intracelda  $v$  y uno de intercelda  $w$ , sin embargo, en este caso además tenemos un tunelaje a segundos vecinos (líneas verdes) el cual es no local en el sentido de que no se conecta con sus vecinos directos. A diferencia del SSH simple, el caso extendido posee estados más robustos y una topología más rica y que como veremos el winding number tiene valores  $\xi = 0, 1, -1$ .

#### 3.4.1. Hamiltoniano SSH extendido

En este caso, al incluir un tunelaje extra  $z$  al Hamiltoniano (3.1) se obtiene,

$$\hat{H}_{SSH}^{ext} = \hat{H}_{SSH} + z \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1, B\rangle\langle m, A| + h.c) \quad (3.24)$$

Esta última ecuación, representa el Hamiltoniano en el espacio real con tunelaje a segundos vecinos.

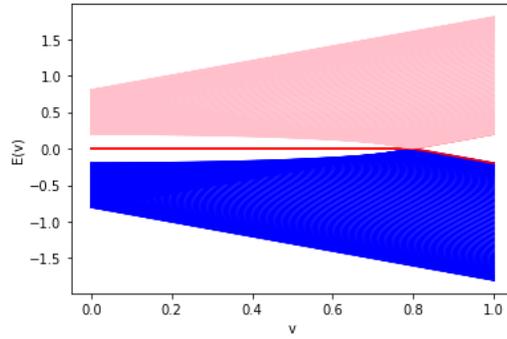


Figura 3.14. Espectro de energías SSH extendido en el espacio real. Las energías dispersadas por la banda de valencia son negativas (curvas azules) y las energías dispersadas en la banda de conducción son positivas (curvas rosas). Se observa entre las dos bandas que existen unos estados de borde (curvas rojas) que se mantienen con energía cero para  $v < w + z$ , y que a partir de  $v = w + z$  se separan exponencialmente para  $N = 100$  celdas unitarias,  $w = 0.5$  y  $z = 0.3$ .

Análogamente como en la figura 3.2, la relación de dispersión de las energías asociadas en función del parámetro de tuneo intracelda  $v$ , se puede observar en la figura 3.14 para el SSH extendido. Aquí la gran diferencia recae en que ahora los estados bordes aparecen en la región  $v < w + z$  (región topológica). Además, se observa que en  $v > w + z$  (región trivial), los estados borde comienzan a comportarse como los estados del bulto y se pierde la robustez topológica debido a que los modos de energía cero desaparecen.

### 3.4.2. Hamiltoniano del bulto SSH extendido

Realizando un procedimiento análogo como el caso SSH simple, podemos enfocarnos en estudiar las propiedades del bulto considerando condiciones de frontera periódicas. Para eso implementamos la misma transformación de Fourier descrita en 3.1.3.

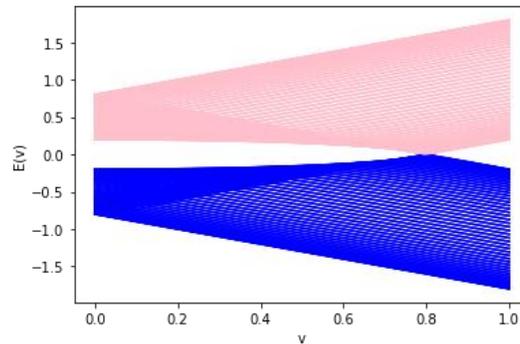


Figura 3. 15. Espectro de Energías del bulto SSH extendido. En este caso se aprecia que los estados metálicos han desaparecido al usar condiciones de frontera periódicas para  $N = 100$  celdas unitarias,  $w = 0.5$  y  $z = 0.3$ .

Es importante notar las diferencias entre la cadena cerrada y la cadena finita, para entender la correspondencia borde-bulto. En la figura 3.15, los estados borde desaparecen ya que se trata de un sistema periódico, sin embargo, aún se preserva la simetría quirál en el espectro de energías.

La matriz  $H(k)$  análoga para este caso después de realizar la transformación queda en la forma,

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} + ze^{ik} \\ v + we^{ik} + ze^{-ik} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Esta matriz Hamiltoniana en el espacio de momentos o matriz del bulto también la podemos reexpresar de manera vectorial como,

$$H(k) = (v + (w + z) \cos k, (w - z) \sin k, 0) \cdot (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (3.26)$$

En donde el winding vector asociado en este caso es  $\vec{h}(k) \equiv \vec{h}(x) + \vec{h}(y) = (v + (w + z) \cos k)\hat{x} + (w - z) \sin k \hat{y} = (v + (w + z) \cos k, (w - z) \sin k, 0)$ . Siendo ahora la trayectoria formada en el plano  $h_x - h_y$  no un círculo sino una elipse con semieje mayor  $w + z$  y semieje menor  $w - z$ .

Con respecto a los eigenvalores en el SSH extendido tenemos,

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon_k^\pm & v + we^{-ik} + ze^{ik} \\ v + we^{ik} + ze^{-ik} & -\varepsilon_k^\pm \end{vmatrix} = 0 \quad (3.27)$$

Entonces simplificando tenemos,

$$\varepsilon_k^\pm = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + z^2 + 2v(w + z) \cos k + 2wz \cos 2k} \quad (3.28)$$

Al igual que en el SSH simple el SSH extendido tendrá la misma forma en los eigenestados la única distinción es el factor que acompaña al eigenestado, aprovechando los resultados previos (3.11) tenemos,

$$|u_k^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \frac{v + we^{ik} + ze^{-ik}}{\varepsilon_k^\pm} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\phi(k)} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

donde  $\phi(k) = \tan^{-1}\left(\frac{h_y}{h_x}\right)$ , cuyas componentes del vector son  $h_x = v + (w + z) \cos k$  y  $h_y = (w - z) \sin k$ , por lo tanto, en el modelo SSH extendido la curva que se trata es un elipsoide centrado en  $v$ , con semieje mayor  $(w + z)$  y semieje menor  $(w - z)$ .

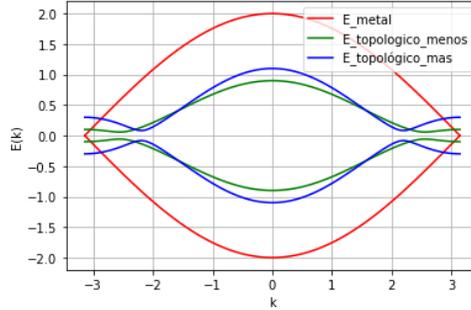


Figura 3.16. Espectro de energías SSH extendido en el espacio  $k$ . Para el caso topológico  $w > z$  (curva azul) con  $v = 0.4$ ,  $w = 0.2$ ,  $z = 0.1$  y para el caso topológico  $w < z$  (curva verde) con  $v = 0.4$ ,  $w = 0.4$ ,  $z = 0.3$ , hay un gap abierto, sin embargo, para el caso metálico (curva roja)  $v = 0.6$ ,  $w = 0.3$ ,  $z = 0.3$  el gap se cierra.

En la figura 3.16, hay que notar las ahora tres regiones en nuestro sistema, ya que para  $v > w + z$  (región trivial) tenemos un gap abierto correspondiente a un aislante trivial, mientras que en  $v < w + z$  (región topológica) tenemos un gap de igual forma. Pero en este caso, se trata de un aislante topológico, puesto que, en este régimen aparecen los estados de borde. Pero no sólo tenemos una clase de aislante topológico, sino que ahora tenemos dos regiones topológicas, el caso  $w > z$  con  $\xi = 1$  (curva azul) y el caso  $w < z$  con  $\xi = -1$  (curva verde). Para el caso que se cierra el gap (curva roja) el aislante pasa a ser un metal y nos encontramos en el límite  $v = w + z$ . Todavía tenemos qué señalar que en los dos primeros casos el gap permanece finito, sin embargo, no son topológicamente equivalentes entre sí, ya que no se pueden conectar mediante una transformación adiabática sin cerrar el gap, además de que esto provoca una ruptura de simetría y por lo tanto es un punto crítico no diferenciable.

### 3.4.3. Diferencia entre estados borde y estados del bulto en el modelo SSH extendido: Distribución de probabilidades y modos de energía

Para entender el efecto que provoca el agregar un tunelaje a  $2^{do}$  vecinos en la distribución de probabilidad. Consideramos los mismos eigenestados usados en los histogramas de la figura 3.5 (a)-(b).

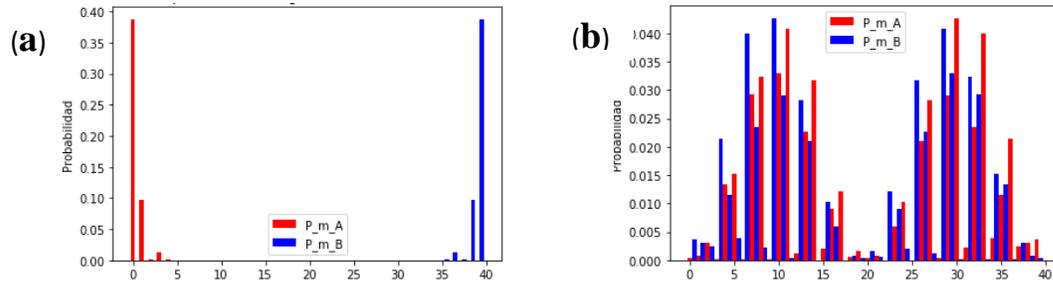


Figura 3.17. Distribución de Probabilidades para la cadena 1D SSH extendida. Estado borde (a) y estado de bulto (b) con parámetros  $v = 0.5$ ,  $w = 1$ ,  $z = 0.3$  para  $N = 40$  uniceldas.

Como se aprecia en la figura 3.17 (a) la distribución de probabilidad de los estados bordes se encuentra aún más localizada en sus extremos del final de la cadena. Por esta razón, al agregar este tunelaje “z” a segundos vecinos se genera una mayor localización de los estados borde y evita que su probabilidad de encontrar a la partícula se distribuya sobre la cadena. Con respecto a el estado del bulto (figura 3.17 (b)), sigue siendo una distribución delocalizada a lo largo de la cadena similar a la observada en la figura 3.5 (b) para el SSH simple. Como veremos más adelante, el agregar este tunelaje a  $2^{do}$  vecinos genera un mayor grado de entrelazamiento en el sistema y esto se encuentra estrechamente relacionado con el hecho de que ahora se tiene una variedad topológica más rica.

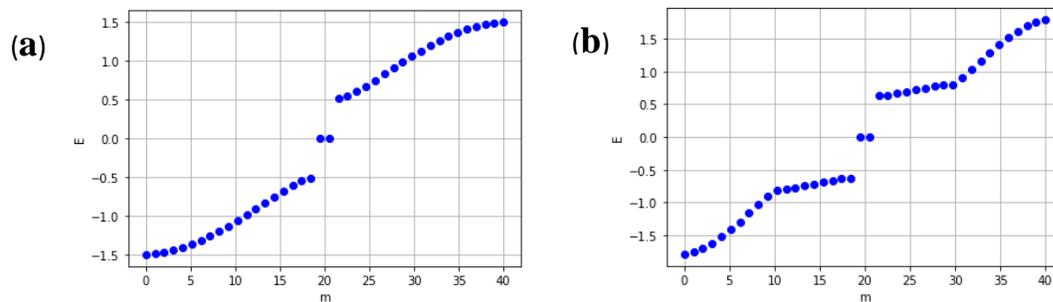


Figura 3.18. Dispersión de energías en contra del número  $m$  de modos de energía sobre la cadena abierta con  $N=20$  celdas unitarias. Con parámetros (a)  $v = 0.5$ ,  $w = 1$ ,  $z = 0$  y (b)  $v = 0.5$ ,  $w = 1$ ,  $z = 0.3$ .

En la figura 3.18(a)-(b), se pueden observar las energías cero de los estados bordes en el régimen topológico  $v < w$  (SSH simple,  $z = 0$ ) 3.18 (a) y  $v < w + z$  (SSH extendido) 3.18 (b) en función del número o etiqueta “m” de modos de energía sobre la cadena abierta con  $N = 20$  celdas unitarias. Debido a la quiralidad del SSH tenemos un total de  $2N = 40$  modos de energía. En ambos casos, SSH simple y SSH extendido, aparecen los modos de energía cero bajo las condiciones  $v < w$  ó  $v < w + z$ , respectivamente, siempre en las regiones topológicas.

#### 3.4.4. Winding number y el modelo SSH extendido

La trayectoria cerrada en el espacio  $k$  ya no será más un círculo. Como ya vimos, el winding number asociado al SSH simple está dado por la ecuación (3.14), la única diferencia ahora es la estructura del vector  $\vec{h}(k)$ . Entonces, podemos escribirlo de la forma (C. Li & Miroshnichenko, 2018),

$$\begin{aligned}
\xi &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{-\pi}^{\pi} \frac{h'(k)}{h(k) - z_0} dk = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d}{dk} \ln h(k) dk \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d}{dk} \ln(v + we^{ik} + ze^{-ik}) \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} d \left( \ln|v + we^{ik} + ze^{-ik}| + i \text{Arg}(v + we^{ik} + ze^{-ik}) \right) \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d \left( \text{Arg}(v + we^{ik} + ze^{-ik}) \right) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d \left( 2\pi - \text{Arctan} \left( \frac{(w-z) \sin k}{v+(w+z) \cos k} \right) \right) \\
&= \begin{cases} 0, & v > w + z \\ 1, & v < w + z, w > z \\ -1, & v < w + z, w < z \end{cases} \quad (3.30)
\end{aligned}$$

Donde hemos redefinido convenientemente  $h(k) = h(x) + ih(y) = v + we^{ik} + ze^{-ik}$ , para integrar en el plano complejo. Este análisis es idéntico al SSH simple. en la ecuación (3.30), obtendremos que el winding number será  $\xi = 1$  (topológico) cuando se encierra al

origen del plano  $h_x - h_y$  después de una evolución sobre la curva  $h(k)$  en contra de las manecillas del reloj, por otro lado,  $\xi = 0$  (trivial) será cuando no la encierre. El valor menos intuitivo del winding number es  $\xi = -1$  (topológico), el cual tiene un valor negativo dado a que la evolución de la trayectoria  $h(k)$  está en sentido contrario al convencional.

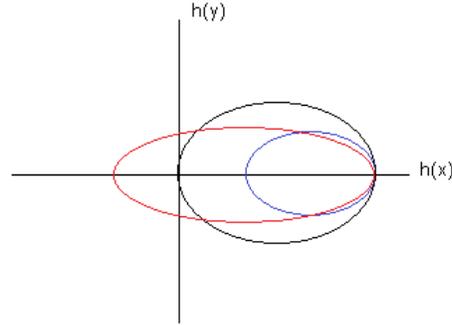


Figura 3.19. Winding number SSH extendido. Como se puede apreciar las trayectorias ahora con un  $\mathbf{z} \neq \mathbf{0}$  serán unas elipses, con  $\mathbf{v} < \mathbf{w} + \mathbf{z}$  un aislante topológico (curva roja),  $\mathbf{v} > \mathbf{w} + \mathbf{z}$  un aislante trivial (curva azul) y en el caso metálico la singularidad se dará en el punto  $\mathbf{v} = \mathbf{w} + \mathbf{z}$  (curva negra).

Notemos ahora en la figura 3.19 que hay puntos críticos para todo par de tunelajes que cumplan las igualdades  $\mathbf{v} = \mathbf{w} + \mathbf{z}$  y  $\mathbf{w} = \mathbf{z}$ . Además, tenemos que mencionar que existe un caso indefinido para  $\mathbf{v} < \mathbf{w} + \mathbf{z}$  que sucede cuando  $\mathbf{w} = \mathbf{z}$ . Esto en la estructura de bandas se interpreta como un colapso del gap en un punto intermedio de la banda e inmediatamente se reabre antes de terminar el período.

### 3.4.5. Entrelazamiento y polarización eléctrica en el modelo SSH extendido

De acuerdo con los resultados en el SSH simple las fases geométricas o polarización eléctrica están relacionadas con el entrelazamiento involucrado y parece ser un buen indicador de las transiciones de fase topológicas. A continuación realizamos una descripción del entrelazamiento para el sistema SSH al agregar un tunelaje a  $2^{do}$  vecinos mediante la definición del número de Schmidt (3.20) y también calculamos la polarización eléctrica de este modelo extendido usando la ecuación (3.16). Mencionamos que la importancia de relacionar estas dos cantidades recae en la necesidad de conectar métricas de no clasicidad y observables, en este caso se trata del número de Schmidt y la polarización eléctrica. Un dato importante en estos sistemas topológicos es que las

invariantes topológicas son la conexión entre estas dos mediciones y esto es debido a la forma del tensor del espacio geométrico de Hilbert (Cheng, 2010).

Antes de continuar con el análisis de las polarizaciones eléctricas y el entrelazamiento en el modelo SSH extendido conviene realizar unas aclaraciones y simplificaciones, producto de los resultados y observaciones del modelo SSH simple. A partir de esta sección realizaremos sólo el cálculo de la polarización eléctrica y el número de Schmidt de los eigenestados  $E_1$  y  $E_B$ . Esto es debido a que nuestro interés recae en caracterizar la topología y las fases geométricas a partir de métricas del entrelazamiento como el número de Schmidt, y como ya vimos en los resultados anteriores conforme nos alejamos de los estados de más baja energía,  $E_1 < E_2 < \dots < E_{N-1} < E_N$ , no hay una relación entre métricas de no clasicidad y topología. Conviene etiquetar a partir de ahora al estado bulto  $E_1$  como el “estado bulto base”  $E_g$  y para el estado borde permaneceremos con la notación  $E_B$  y seguiremos refiriéndonos al mismo como estado borde o estado de superficie.

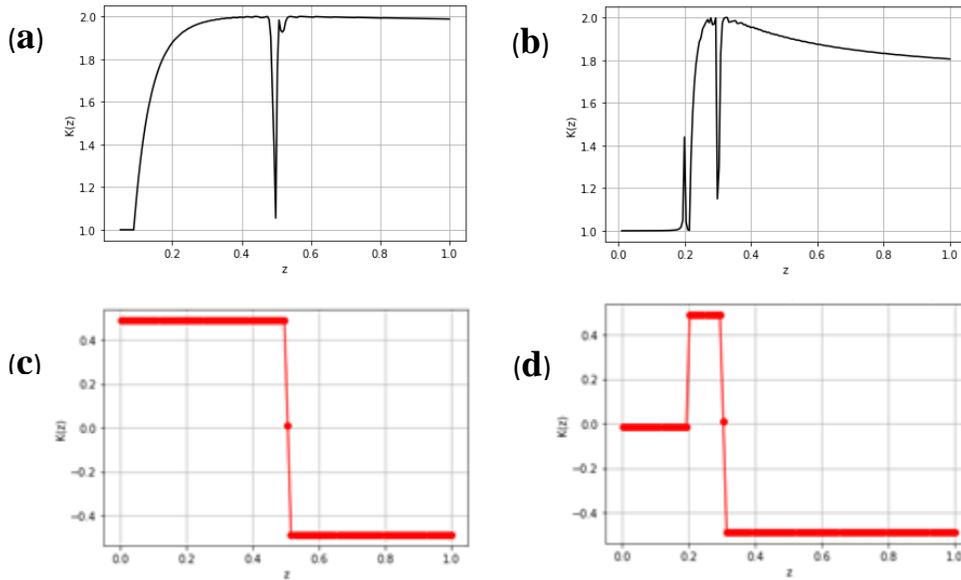


Figura 3.20. Entrelazamiento y polarización eléctrica del sistema SSH extendido en función del tunelaje a segundos vecinos  $z$  para el estado bulto base  $E_g$ . (a) Número de Schmidt y (c) polarización con parámetros  $v = 0.3$ ,  $w = 0.5$ , (b) número de Schmidt y (d) polarización con parámetros  $v = 0.5$ ,  $w = 0.3$ . Para  $N = 300$  celdas unitarias.

En la figura 3.20 (a)-(b) se presenta el número de Schmidt en función del tunelaje a segundos vecinos “ $z$ ” para el estado bulto base  $E_g$  para una cadena de  $N = 300$  celdas

unitarias. Se graficó en función de “ $z$ ” debido a que este captura mejor el cambio de fase topológica o winding number para el modelo SSH extendido. En la figura 3.20 (a), utilizamos los parámetros  $v = 0.3$  y  $w = 0.5$ . Como se observa en la zona para  $z < 0.1$ , el sistema se encuentra separable ya que el número de Schmidt  $K = 1$ , pero este comienza a incrementar cuando hacemos más grande la amplitud de tunelaje “ $z$ ”, entonces, hasta alcanzar un valor máximo en 0.3. Es importante resaltar, que a pesar de que el sistema se encontraba inicialmente en la región  $v < w + z$  (región topológica,  $\xi = 1$ ) (figura 3.20(c)) se tenía bajo entrelazamiento y que en el SSH extendido la condición de máximo entrelazamiento depende siempre del hopping  $z$ , cuando  $z > 0.3$  en la región  $v < w + z$  con  $z < w$  (región topológica,  $\xi = 1$ ) se mantiene el número de Schmidt en  $K = 2$ , sin embargo, cuando  $w = z$  tenemos una caída del entrelazamiento ya que en este punto el sistema sufre una transición topológica y se cierra el gap, en la región  $v < w + z$  con  $w < z$  (región topológica,  $\xi = -1$ ) aun se preserva máximo entrelazamiento.

Por otra parte notemos el comportamiento de la figura 3.20 (b)-(d), en donde los parámetros que aquí utilizamos son  $v = 0.5$  y  $w = 0.3$  para una cadena de  $N = 300$  celdas unitarias. En esta situación tenemos más cambios de fase (figura 3.20 (d)). Inicialmente, el sistema se encuentra en la región  $v > w + z$  (región trivial) con una polarización eléctrica  $P_e = 0$  y donde se tiene un número de Schmidt  $K = 1$ . Cuando  $z = 0.2$  tenemos la transición de fase topológica entre la zona  $v > w + z$  (región trivial,  $\xi = 0$ ), y la zona  $v < w + z$  con  $z < w$  (región topológica,  $\xi = 1$ ). Aquí la polarización eléctrica o fase geométrica tiene un valor  $P_e = \frac{e}{2}$  (figura 3.20 (d)),  $e = 1$  por unidades naturales. En la región  $0.2 < z < 0.3$  tenemos que  $z < w$  y el entrelazamiento con  $1 < K < 2$  (figura 3.20 (b)). Cuando  $z = w$  tendremos la transición de fase entre las zonas  $z < w$  (región topológica,  $\xi = 1$ ) y  $z > w$  (región topológica,  $\xi = -1$ ) (figura 3.20 (d)). En esta transición topológica se pierde el entrelazamiento debido al cierre del gap y se reabre cuando  $z > w$  con polarización eléctrica  $P_e = -\frac{e}{2}$ , debido al valor negativo del winding number. Con lo que respecta al entrelazamiento, decae lentamente (figura 3.20 (b)) conforme “ $z$ ” incrementa.

En conclusión, en este sistema extendido se obtuvo un comportamiento interesante puesto que no solamente el número de Schmidt nos indica estas transiciones en los puntos críticos, sino que, además, se observa que en las regiones topológicas es donde hay más

entrelazamiento, siendo este un medidor del grado de entrelazamiento y mostrando que de alguna forma el carácter topológico del espacio cuántico genera un mayor grado de coherencia en las métricas de no clasicidad, que en este caso se trata de entrelazamiento bipartito o número de Schmidt.

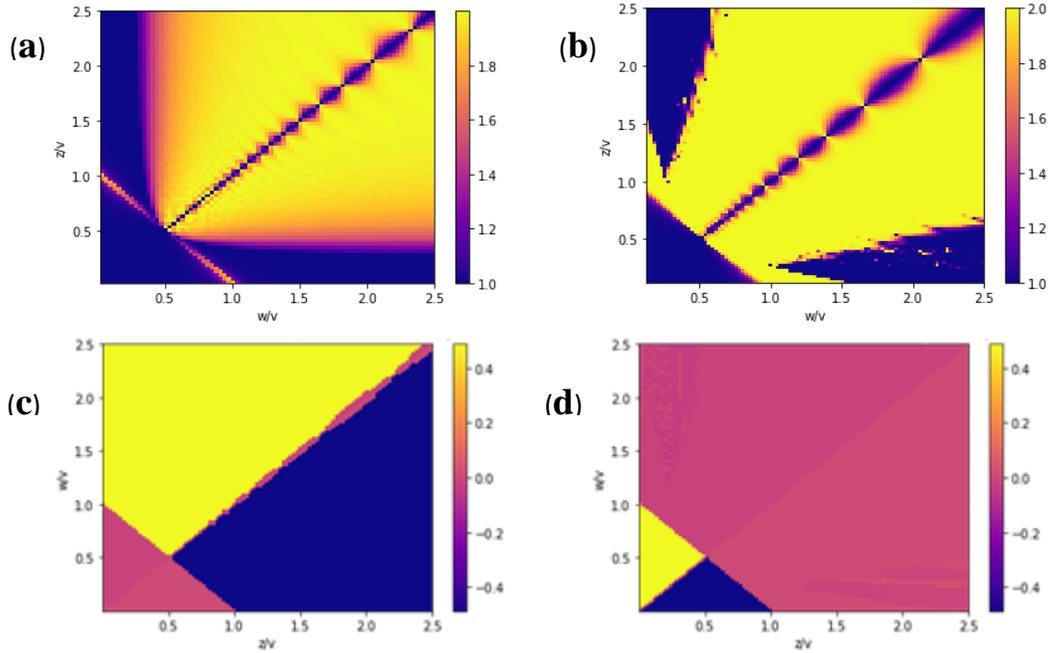


Figura 3.21. Diagramas de entrelazamiento y polarización eléctrica en función de las amplitudes de tunelaje  $\mathbf{z}$  y  $\mathbf{w}$ . Diagramas de entrelazamiento para (a) el estado bulto base  $\mathbf{E}_g$  y (b) para el estado borde  $\mathbf{E}_B$ , los correspondientes diagramas de polarización eléctrica para (c) el estado bulto base  $\mathbf{E}_g$  y (d) para el estado borde  $\mathbf{E}_B$ , se usó un parámetro de tunelaje intracelda  $\nu = 0.4$  y  $N = 100$  celdas unitarias.

En la figura 3.21 (a)-(b), se observa la relación del entrelazamiento para una cadena de  $N = 100$  celdas unitarias en función de los tunelajes  $z$  y  $w$  con  $\nu = 0.4$ , para el estado bulto base  $E_g$  y el estado borde  $E_B$ , respectivamente. A su vez en las figuras 3.21 (c)-(d), se presentan los diagramas de polarización eléctrica para el estado bulto base  $E_g$  y el estado borde  $E_B$ , respectivamente. En la figura 3.21 (a) vemos que en la condición  $z = w$  se pierde el entrelazamiento y el sistema se vuelve separable. En ese mismo punto en la figura 3.21 (c) la polarización eléctrica tiene una divergencia debido a que se trata de una singularidad del winding number. Por otra parte se aprecia la división de las 3 regiones tanto en el entrelazamiento (figura 3.21 (a)) como en la polarización (figura 3.21 (c)). En la región  $0.4 > w + z$  (región trivial,  $\xi = 0$ ) tenemos una polarización eléctrica  $P_e = 0$  y entrelazamiento o número de Schmidt  $K = 1$  siendo este un sistema separable, mientras

que en las regiones topológicas se logra un entrelazamiento máximo  $K = 2$  sin distinción entre las dos región topológicas, sin embargo, esto no sucede con la polarización eléctrica ya que en la región  $0.4 < w + z$  con  $w > z$  (región trivial,  $\xi = 1$ ) (figura 3.21 (c)) se tiene  $P_e = \frac{e}{2}$  y en la región  $0.4 < w + z$  con  $w < z$  (región trivial,  $\xi = -1$ ) (figura 3.21 (c)) se tiene  $P_e = -\frac{e}{2}$ . En la figura 3.21 (b) se presenta el número de Schmidt para el estado borde  $E_B$ . Como se observa, podemos notar que tiene un comportamiento similar al estado bulto base  $E_B$  pero en este caso tenemos un entrelazamiento más robusto  $K = 2$  en casi toda la región topológica y de  $K = 1$  para la región trivial, sin embargo, no sucede lo mismo con la polarización eléctrica (figura 3.21 (d)) debido a que su comportamiento es opuesto al del estado bulto base  $E_g$ , ya que en ambas regiones topológicas tenemos una polarización eléctrica,  $P_e = 0$  y en la región  $v > w + z$  (región trivial) se tiene dos valores para la polarización, cuando  $z > w$  (winding number,  $\xi = -1$ ) (figura 3.21 (d)) y  $w > z$  (winding number,  $\xi = 1$ ) (figura 3.21 (d)). Por estos diagramas notamos que aunque nos encontremos en la región topológica, eso no garantiza que haya entrelazamiento para toda conjunto de  $w$  y  $z$ , sino que hay una región por encima de la cual se vuelve máximo el entrelazamiento. Tenemos que aclarar aquí, que a diferencia del entrelazamiento que en su comportamiento parece ser similar entre el estado bulto base  $E_g$  y el del estado borde  $E_B$ , en la polarización eléctrica el estado borde  $E_B$  tiene un comportamiento inverso al estado bulto base  $E_g$ .

### 3.5. Modelo SSH simple y extendido parametrizado adiabático $\vartheta$

En las secciones previas hemos descrito al modelo SSH simple y SSH extendido así como también caracterizamos sus entrelazamientos y polarizaciones eléctricas que se relacionan con su topología. Además, se ha encontrado una relación estrecha entre el número de Schmidt y el winding number, sin embargo, queda la cuestión de qué pasaría si parametrizamos a los hoppings  $v(\vartheta)$ ,  $w(\vartheta)$  y  $z(\vartheta)$  bajo una transformación dependiente de otro parámetro  $\vartheta$ . A grandes rasgos podemos decir que tendríamos una descripción del modelo más completa (Lang et al., 2018; Lieu, 2018; Pérez-González et al., 2018), tanto en la parte de la topología o fases geométricas y por otro lado, tendríamos más cambios en el entrelazamiento.

Para considerar una modelación paramétrica, hacemos que los tunelajes del Hamiltoniano sean dependientes de una variable  $\vartheta$ . El Hamiltoniano se puede escribir entonces,

$$\hat{H}(\vartheta) = v(\vartheta) \sum_{m=1}^N (|m, A\rangle\langle m, B| + h. c) + w(\vartheta) \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1, A\rangle\langle m, B| + h. c) \quad (3.31)$$

Por fines de simplicidad, parametrizamos a  $v(\vartheta) = v_p + \cos(\vartheta)$  y fijamos  $w(\vartheta) = 1$ , y donde, tenemos la relación  $\vartheta = \omega t$ . Por condición adiabática imponemos  $\omega \ll \frac{2\pi}{T}$ , o bien,  $T \rightarrow \infty$  tal que el periodo de la evolución en  $\vartheta$  es lo suficientemente prolongado o suave, y se siga cumpliendo el teorema adiabático en que el sistema no colapse el gap y permanezca en un estado estacionario invariante.

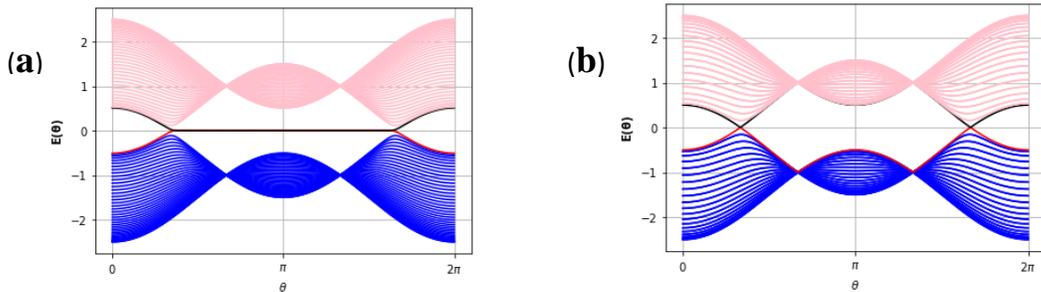


Figura 3.22. Dispersión de energías para el SSH simple con dependencia  $\vartheta$ . Consideramos  $N=40$  celdas unitarias,  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0$ . (a) Cadena abierta y (b) cadena con condiciones de frontera periódicas.

Graficamos los eigenvalores de la ecuación (3.31) y se aprecia en la figura 3.22 (a) para una cadena abierta de  $N=40$  celdas unitarias, como los estados topológicos o estados borde (curva negra y roja) se protegen durante un intervalo  $\vartheta$  y llegan a un punto crítico en el que

desaparecen (figura 3.22 (a)). Conforme mayor sea el periodo de evolución en  $\vartheta$  estarán presentes los estados borde. De igual forma, en este modelo (3.31) si consideramos condiciones de frontera periódicas (figura 3.22 (b)) los estados borde desaparecerán como sucedió en la figura 3.3 debido a la transformada de Fourier.

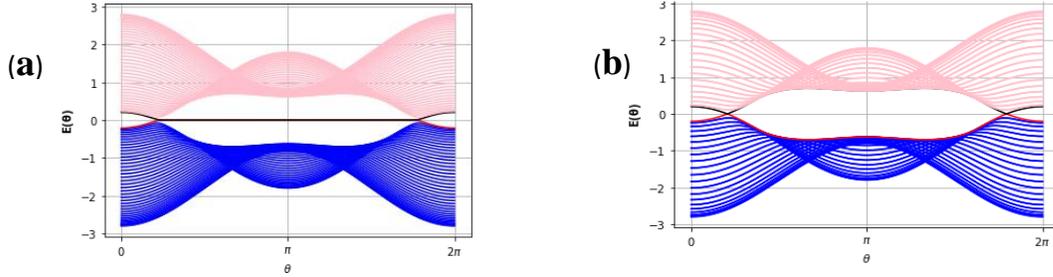


Figura 3.23. Dispersión de energías SSH extendido con dependencia  $\vartheta$ . Consideramos  $N=40$  celdas unitarias,  $\mathbf{v}_p = \mathbf{0.5}$  y un tunelajes  $\mathbf{w}(\vartheta) = \mathbf{1}$ ,  $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.3}$ . (a) Cadena abierta y (b) cadena con condiciones de frontera periódicas.

También se hizo un proceso análogo para el SSH extendido como se observa en la figura 3.23 (a)-(b) para una cadena de  $N=40$  celdas unitarias y se sigue observando esta protección de los estados topológicos (curva negra y roja) (figura 3.23 (a)) para una cadena abierta, aunque ahora los puntos de colapso de los estados del bulto en los intervalos  $[\frac{\pi}{2}, \pi]$  y  $[\pi, \frac{3\pi}{2}]$  desaparecieron (figura 3.23 (a)) y más bien se trata de una distorsión en las energías en esa región, en la figura 3.23 (b) se presenta el espectro de energías para el caso de una cadena cerrada.

### 3.5.1. Entrelazamiento y vector de Bloch dependiente de $\vartheta$ para el modelo SSH simple y extendido

Considerando el Hamiltoniano de la ecuación (3.31), tendremos funciones de onda que varían en  $\vartheta$  y que podemos expresar como,

$$|\psi_n(\vartheta)\rangle = \sum_{m=1}^N [C_{m,n}^A(\vartheta)|m, A\rangle + C_{m,n}^B(\vartheta)|m, B\rangle] \quad (3.32)$$

donde ahora los coeficientes de la expansión  $C_{m,n}^A(\vartheta)$  y  $C_{m,n}^B(\vartheta)$  cambiarán en función de  $\vartheta$ .

El número de Schmidt de un eigenestado puro puede expresarse análogamente como la expresión (3.20) quedando de la forma,

$$K_\lambda(\vartheta) = \left( \left( \sum_m^N |C_{m,\lambda}^A(\vartheta)|^2 \right)^2 + \left( \sum_m^N |C_{m,\lambda}^B(\vartheta)|^2 \right)^2 + 2 \left( \sum_m^N C_{m,\lambda}^A(\vartheta) C_{m,\lambda}^B(\vartheta) \right)^2 \right)^{-1} \quad (3.33)$$

Donde ahora el número de Schmidt es dependiente del parámetro  $\vartheta$  via los coeficientes  $C_{m,\lambda}^A(\vartheta)$  y  $C_{m,\lambda}^B(\vartheta)$ .

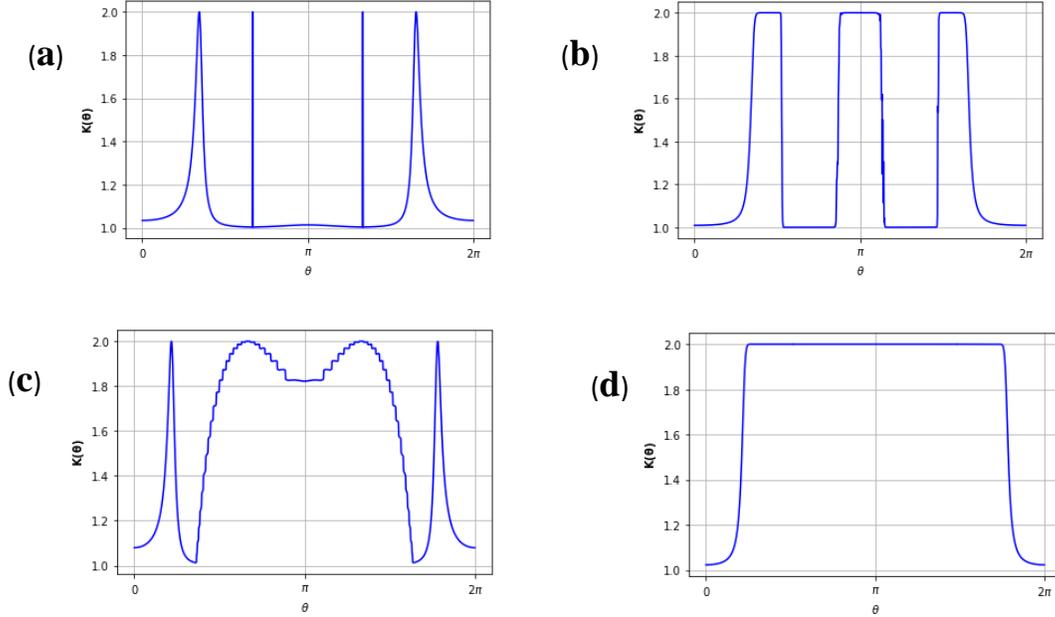


Figura 3.24. Número de Schmidt dependiente de  $\vartheta$ . Se consideró una cadena abierta con  $N=40$  celdas unitarias, para el caso SSH simple con parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0$  se presenta para (a) el estado bulto base  $E_g$  y (b) el estado borde  $E_B$ , para el caso SSH extendido con parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$  se presenta (c) estado bulto y (d) estado borde.

Haciendo uso de la ecuación (3.20) calculamos el número de Schmidt con dependencia en  $\vartheta$  de una cadena de  $N=40$  celdas unitarias. En la figura 3.24 (a), se presenta el entrelazamiento para el estado bulto base  $E_g$  donde se tienen los parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0$ , en la figura 3.24 (b) se presenta el entrelazamiento para el estado borde  $E_B$  bajo los mismos parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0$ . En la figura 3.24 (c) se presenta el entrelazamiento para el estado bulto base  $E_g$  donde se tienen los parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ , en la figura 3.24 (d) se presenta el entrelazamiento para el estado borde  $E_B$  bajo los mismos parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ .

Existen dos tipos de entrelazamiento máximo en la figura 3.24 (a)-(d) y estos están determinados por, la condición de transición de fase topológica  $v(\vartheta) = w(\vartheta)$  y la condición de dimerización topológica cuando  $v(\vartheta) = 0$ . Analizando la figura 3.24 (a)

vemos que hay cuatro picos de máximo entrelazamiento, los picos en los ángulos  $\vartheta'_{1,2} = \frac{\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$  corresponden a entrelazamientos que caracterizan la transición de fase topológica cuando  $v(\vartheta) = w(\vartheta)$ , entonces se cumple que  $1 = v_p + \cos \vartheta'_{1,2} \rightarrow \vartheta'_{1,2} = \cos^{-1}(1 - v_p)$ . Para los otros picos de máximo entrelazamiento en los ángulos  $\vartheta_{1,2} = \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$  estos ocurrirán en la condición de dimerización topológica, es decir, cuando  $v(\vartheta) = 0 = v_p + \cos \vartheta_{1,2} \rightarrow \vartheta_{1,2} = \cos^{-1}(-v_p)$ . Por lo tanto, los picos de las subsiguientes figuras corresponderán a estas situaciones, en la siguiente sección analizamos con más detalle la diferencia de los estados presentes en ambas situaciones de máximo entrelazamiento.

Si comparamos la figura 3.24 (a) con 3.22 (a) y la figura 3.24 (c) con 3.23 (a), vemos que el estado bulto base  $E_g$  tiene sus picos de máximo entrelazamiento en los puntos en el que el gap se cierra, en estos puntos el estado bulto base se colapsa a una energía  $E = 0$ . Con lo que respecta al entrelazamiento en el caso del sistema extendido (figura 3.24 (c)) se observa un mayor grado de entrelazamiento durante el periodo de evolución, comportamiento que ya habíamos observado en las figuras 3.19-3.20. Con respecto al estado borde  $E_B$  en el modelo SSH simple  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0$ , observamos en la figura 3.24 (b) tres regiones de máximo entrelazamiento mientras que en el modelo SSH extendido con  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ .

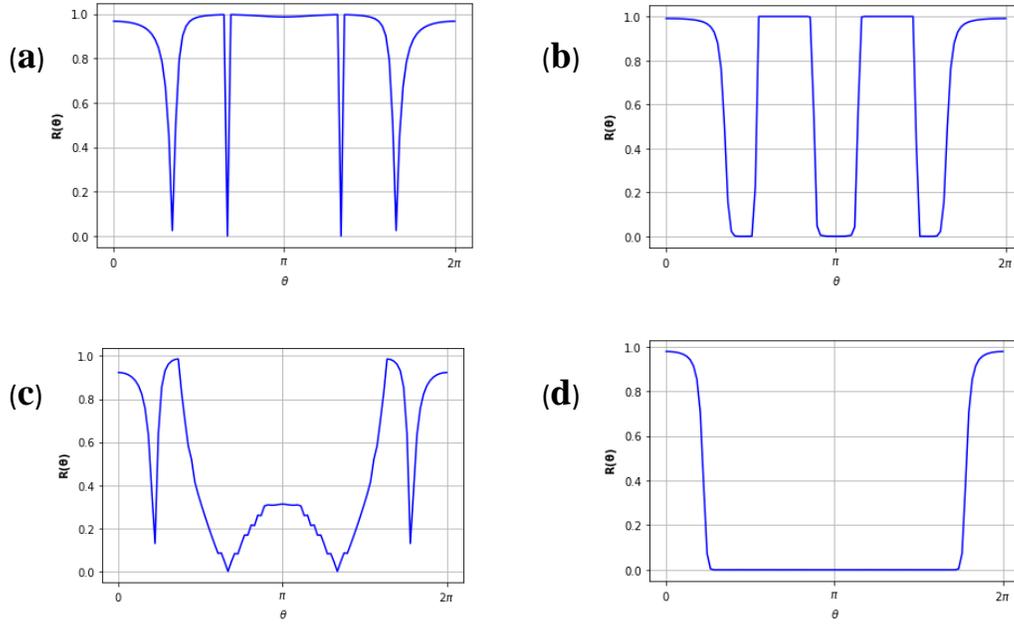


Figura 3.25. Vector de Bloch dependiente de  $\vartheta$ . (a) Vector de Bloch para el estado bulto base  $E_g$  y (b) estado borde  $E_B$ , con  $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ . (c) Vector de Bloch para estado del bulto y (d) estado borde, con  $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.3}$ . Con parámetros  $N=40$  celdas unitarias y  $v_p = \mathbf{0.5}$ .

A su vez se calculó el vector de Bloch (3.23), en la figura 3.25 (a)-(d) se observa que el vector de Bloch de una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias asociado a estos casos y se tiene una correspondencia directa con el número de Schmidt siendo esta inversamente proporcional, o sea que en el punto de máximo entrelazamiento será correspondiente a un punto mínimo  $R(\vartheta) = 0$ , por lo tanto, el vector de la esfera de Bloch se colapsa al origen. En la figura 3.25 (a), se presenta el vector de Bloch para el estado bulto base  $E_g$  donde se tienen los parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0$ , en la figura 3.25 (b) se presenta el vector de Bloch para el estado borde  $E_B$  bajo los mismos parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0$ . En la figura 3.25 (c) se presenta el vector de Bloch para el estado bulto base  $E_g$  donde se tienen los parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ , en la figura 3.25 (d) se presenta el vector de Bloch para el estado borde  $E_B$  con los mismos parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ . Comparando la figura 3.24 (a)-3.25 (a), 3.24 (b)-3.25 (b), 3.24 (c)-3.25 (c) y 3.24 (d)-3.25 (d), vemos que cumplen con la condición  $R(\vartheta) = 0$ , para  $K = 2$  sistema máximamente entrelazado y  $R(\vartheta) = 1$ , para  $K = 1$  sistema separable.

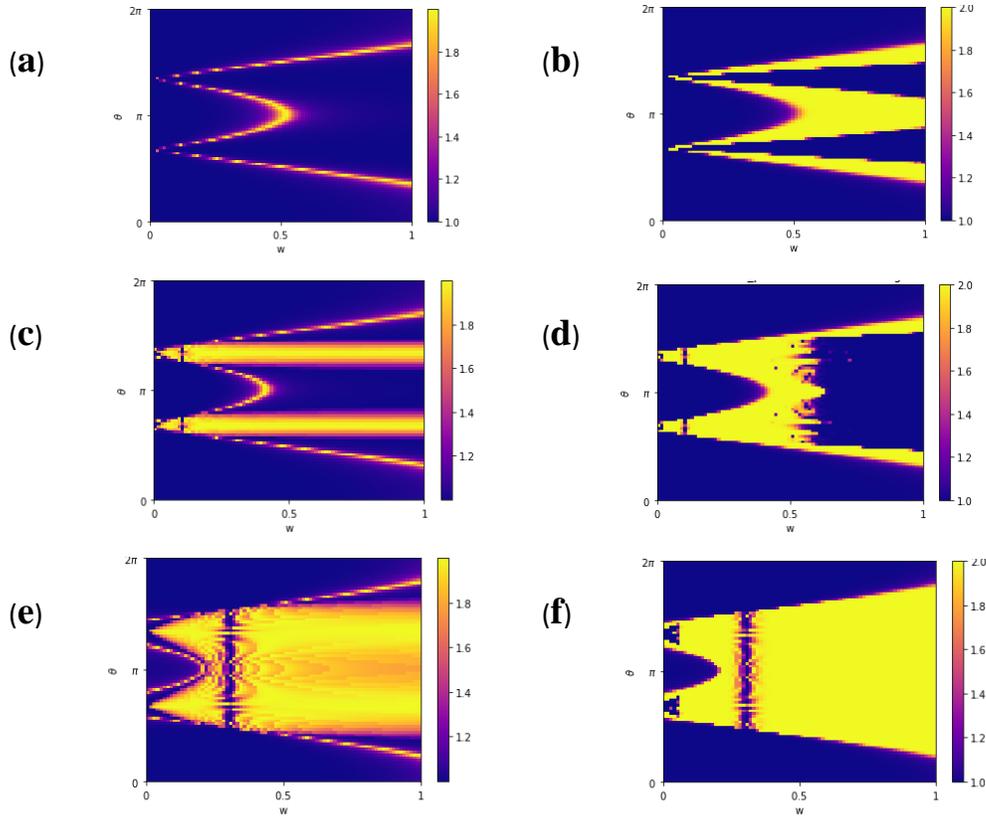


Figura 3.26. Diagramas de entrelazamiento variando  $\vartheta$  y  $w$ . (a) estado bulto base  $E_g$  y (b) estado borde  $E_B$ , con  $z(\vartheta) = 0$ , (c) estado bulto base  $E_g$  y (d) estado borde  $E_B$ , con  $z(\vartheta) = 0.1$ , (e) estado bulto base  $E_g$  y (f) estado borde  $E_B$ , con  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ . Parámetros fijos,  $N=40$  celdas unitarias y  $v_p = 0.5$ .

Se realizaron los diagramas para el número de Schmidt para una cadena de  $N=40$  celdas unitarias (figura 3.26(a)-(f)) en función del tunelaje paramétrico  $w(\vartheta)$  con valores en un intervalo  $[0,1]$  y el parámetro adiabático  $\vartheta$  como se muestra en la figura 3.26 (a)-(d), donde el tunelaje  $v = 0.5 + \cos \vartheta$ . En la figura 3.26 (a), se presenta el número de Schmidt para el estado bulto base  $E_g$  con  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0$ . En la figura 3.26 (b), se observa el número de Schmidt para el estado borde  $E_B$  bajo los mismos parámetros  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0$ . En la figura 3.26 (c), se obtuvo el número de Schmidt para el estado bulto base  $E_g$  con  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0.1$ . En la figura 3.26 (d) tenemos un número de Schmidt para el estado borde  $E_B$  con  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0.1$ . En la figura 3.26 (e), se tiene el número de Schmidt para el estado bulto base con  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0$ . En la figura 3.26 (f), se presenta el número de Schmidt para el estado borde con  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0$ .

En conclusión, se aprecia que conforme el tunelaje  $z(\vartheta)$  incrementa, el entrelazamiento se vuelve más robusto, es importante hacer notar también que el entrelazamiento en los estados bordes es mayor que en los estados presentes en el bulto.

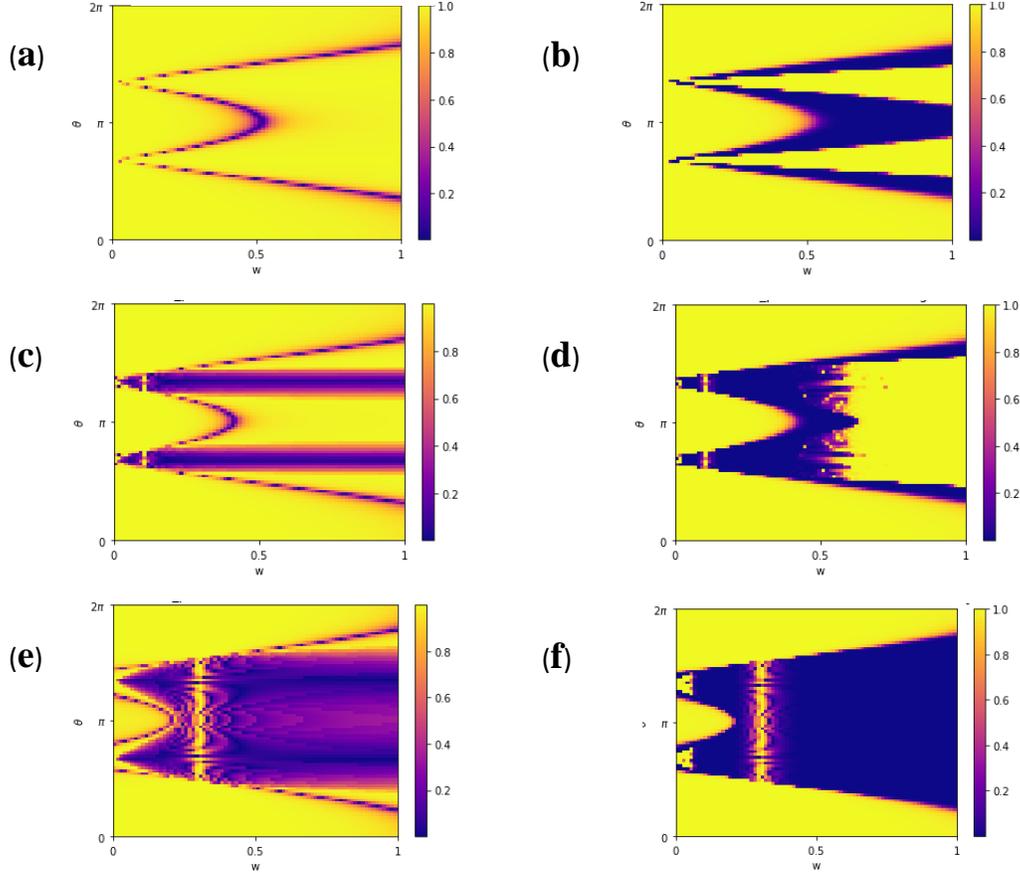


Figura 3.27. Diagramas del vector de Bloch variando  $\vartheta$  y  $w$ . (a) estado bulto base  $E_g$  y (b) estado borde  $E_B$ , con  $z(\vartheta) = 0$ , (c) estado bulto base  $E_g$  y (d) estado borde  $E_B$ , con  $z(\vartheta) = 0.1$ , (e) estado bulto base  $E_g$  y (f) estado borde  $E_B$ , con  $z(\vartheta) = 0.3$ . Parámetros fijos,  $N=40$  celdas unitarias y  $v_p = 0.5$ .

En la figura 3.27 (a)-(d), se presenta el vector de Bloch bajo los mismo casos de la figura 3.26 (a)-(d) y como hemos encontrado anteriormente al comparar la figura 3.24 y 3.25, en este caso tenemos la misma relación directa entre el vector de Bloch y el entrelazamiento. Comparando la figura 3.27 (a)-3.26 (a), 3.27 (b)-3.26 (b), 3.27 (c)-3.26 (c), 3.27 (d)-3.26 (d), 3.27 (e)-3.26 (e) y 3.27 (f)-3.26 (f), vemos que se cumple la condición,  $R(\vartheta) = 0$  para  $K = 2$  sistema máximamente entrelazado y  $R(\vartheta) = 1$  para  $K = 1$  sistema separable, tanto para los estados del bulto y los estados borde.

### 3.5.2. Polarización eléctrica dependiente de $\vartheta$ para el modelo SSH simple y extendido

Con lo que respecta a las fases geométricas también se calculó la polarización eléctrica (3.16), pero en este caso se modulo a la función de onda  $|\psi_n(\vartheta)\rangle$ , de tal forma que,

$$P_e(\vartheta) = \frac{e}{2\pi} \text{Im} \ln \left( \sum_{m=1}^N e^{i\delta m} \left[ |C_{m,\alpha}^A(\vartheta)|^2 + |C_{m,\alpha}^B(\vartheta)|^2 \right] \right) \quad (3.34)$$

Donde ahora la polarización eléctrica es dependiente del parámetro  $\vartheta$  via los coeficientes  $C_{m,\lambda}^A(\vartheta)$  y  $C_{m,\lambda}^B(\vartheta)$ .

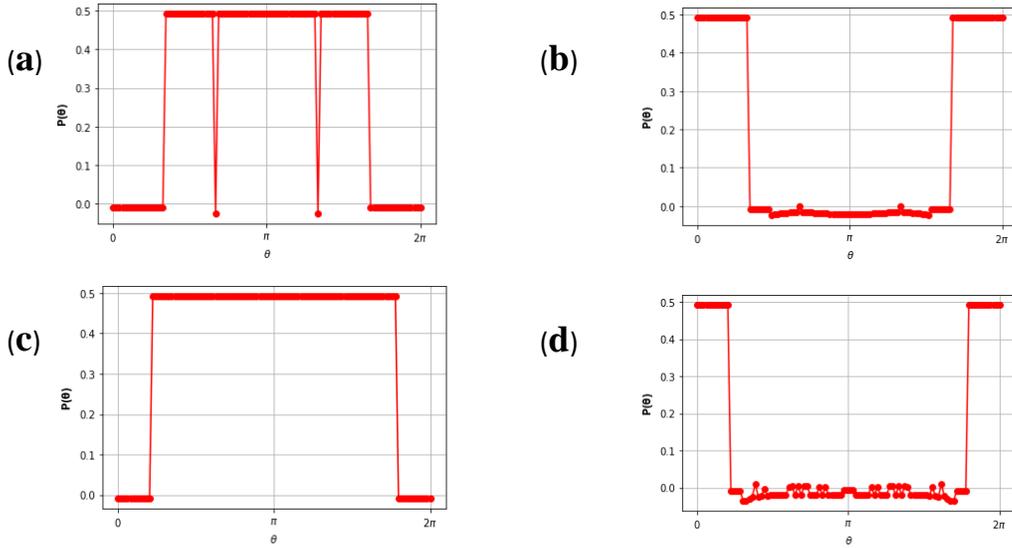


Figura 3.28. Polarización eléctrica modulando  $\vartheta$ . (a) Estado bulto base  $E_g$  y (b) estado borde  $E_B$ , con  $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0}$ , (c) estado bulto y (d) estado borde, con  $\mathbf{z}(\vartheta) = \mathbf{0.3}$ . Parámetros fijos,  $N=40$  celdas unitarias y  $v_p = \mathbf{0.5}$ .

En la figura 3.38 (a)-(d), se presenta la polarización eléctrica para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias en función del parámetro  $\vartheta$ . En la figura 3.28 (a) se presenta la polarización eléctrica para el estado bulto base  $E_g$  con  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0$ . En la figura 3.28 (b), se tiene la polarización para el estado borde  $E_B$  con  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0$ . En la figura 3.28 (c), se presenta la polarización para el estado bulto base  $E_g$  con parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ . En la figura 3.28 (d), polarización del estado borde  $E_B$  con  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ . En la figura 3.28 (a), hay unos puntos especiales que analizaremos con más detalle, así como también, los estados presentes y amplitudes.

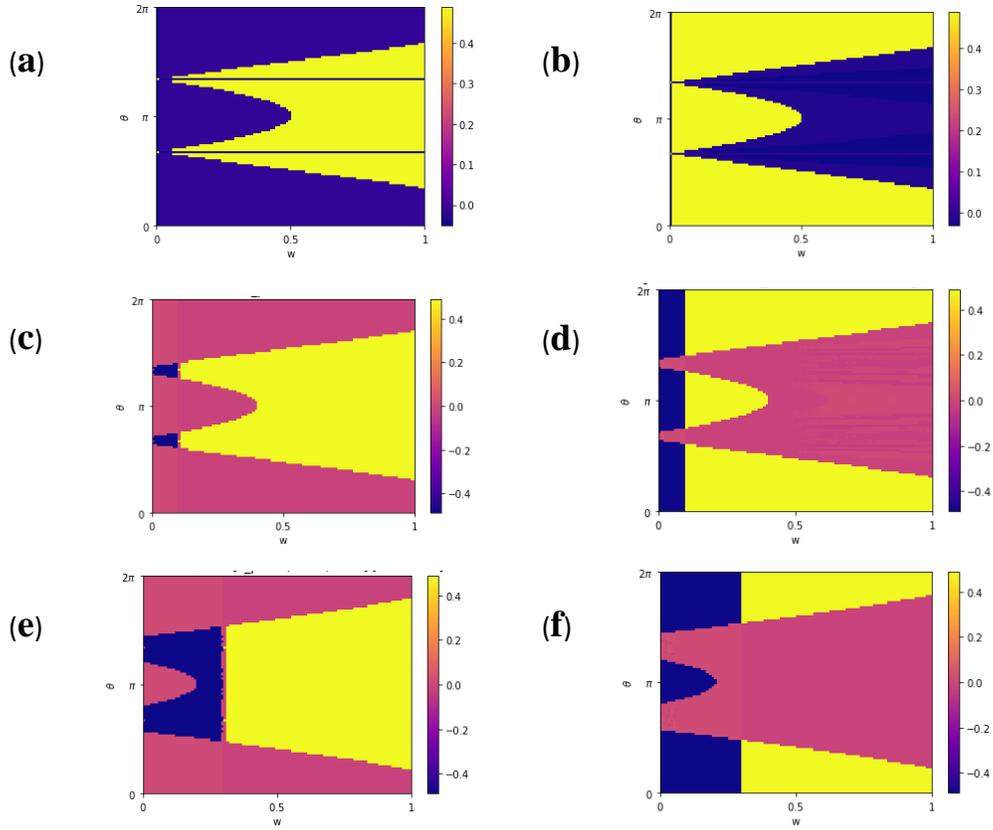


Figura 3.29. Diagramas de fase variando  $\vartheta$  y  $w$ . (a) estado bulto base  $E_g$  y (b) estado borde  $E_B$ , con  $z = 0$ , (c) estado bulto y (d) estado borde, con  $z = 0.1$ , (e) estado bulto y (f) estado borde, con  $z = 0.3$ . Parámetros fijos,  $N=40$  celdas unitarias y  $v_p = 0.5$ .

En la figura 3.29 (a)-(d), se determinaron los diagramas de fase geométrica o polarización eléctrica para los mismos casos correspondientes a la figura 3.26-3.27. Si comparamos la figura 3.29 (a)-3.26 (a), 3.29 (b)-3.26 (b), 3.29 (c)-3.26 (c), 3.29 (d)-3.26 (d), 3.29 (e)-3.26 (e) y 3.29 (f)-3.26 (f), encontramos un comportamiento muy parecido, siendo las regiones topológicas con fase acumulada  $\pi$  o  $-\pi$  las que estarán asociadas a un número de Schmidt máximo, esto se cumple para los estados del bulto, sin embargo, en el caso de que se traten estados borde vemos en que al comparar 3.29 (b)-3.26 (b), 3.29 (d)-3.26 (d) y 3.29 (f)-3.26 (f) hay una relación opuesta entre la polarización eléctrica y su entrelazamiento, debido a que las condiciones de fase geométrica en la polarización para los estados borde se han invertido, situación similar a la previamente descrita en la figura 3.20 (a)-(d).

### 3.6. Análisis de las amplitudes de los estados y condiciones de entrelazamiento para los modelos SSH simple, extendido y modulado $\vartheta$

Es importante conocer qué tipo de estados hay en el sistema y como estos se comportan, para esto estudiamos la distribución de la función de onda a lo largo de la cadena en función de las amplitudes de tuneleo  $v$  y  $w$  en el modelo SSH simple y en función de las amplitudes de tuneleo  $v$ ,  $w$  y  $z$  en el modelo SSH extendido. Hemos expuesto previamente que la física de interés relacionada con las transiciones de fase topológica queda caracterizadas por el “estado bulk base”  $E_g$  y el estado borde  $E_B$ , por ende, aquí presentamos para el modelo SSH simple los estados de las figuras 3.10 (a) y 3.10 (d) correspondientes a su número de Schmidt, por otro lado, en el modelo SSH extendido se presentan los estados relacionados a la figura 3.20 (a) y 3.20 (b), y para el modelo SSH modulado  $\vartheta$  los estados relacionados a la figura 3.24 (a)-(d).

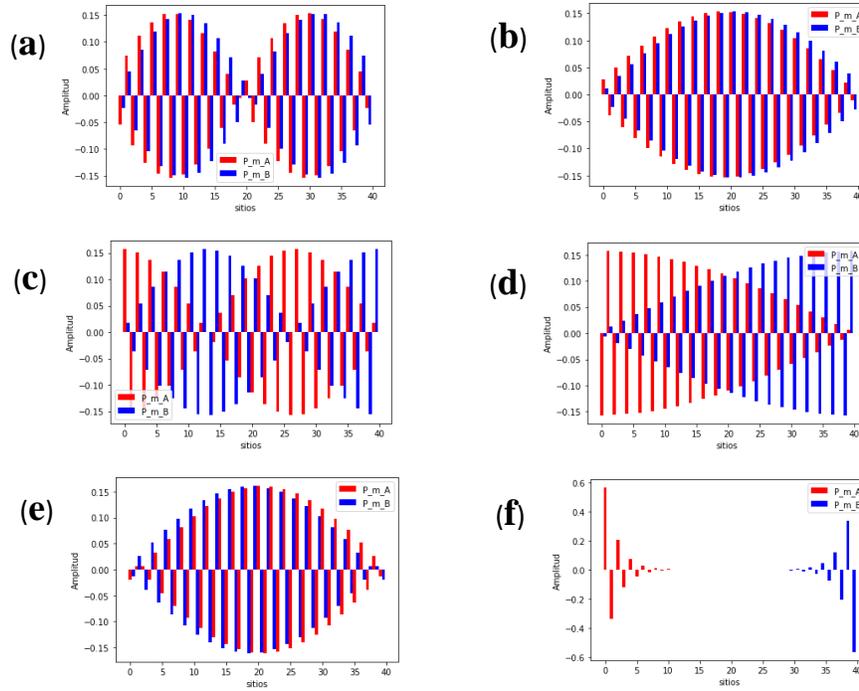


Figura 3.30. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH simple respecto de la figura 3.10 (a) y 3.10 (2). Para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias el estado bulk base  $E_g$  (a)  $w = 0.3, v = 0.5$ , (c)  $w = 0.5, v = 0.5$  y (e)  $w = 0.5, v = 0.3$ , y el estado borde  $E_B$  (b)  $w = 0.3, v = 0.5$ , (d)  $w = 0.5, v = 0.5$  y (f)  $w = 0.5, v = 0.3$ .

En la figura 3.30 (a)-(f), se presenta la distribución de de amplitudes en función de la posición sobre la cadena “ $m$ ”, notamos que para el caso del estado  $E_g$  en la región  $v > w$  (región trivial) (figura 3.30 (a)) presenta un nodo en la parte central de la cadena, cuando  $v < w$  (región topológica) (figura 3.30 (e)) desaparece el nodo y la distribución tiene un comportamiento homogéneo sobre la cadena. En el caso del estado borde vemos que en la región  $v > w$  (región trivial) (figura 3.30 (b)) su distribución es parecida a la del estado  $E_g$  pero cuando  $v < w$  (región topológica) (figura 3.30 (f)) la distribución de la amplitud se encuentra mayoritariamente distribuida en los bordes de la cadena debido a la fase geométrica. En el caso del punto de transición de fase topológico  $v = w$  para ambos estados no esta de todo claro el comportamiento de la amplitud, para entender el tipo de estado presente en cada distribución analizaremos si se cumplen las condiciones de Bell o máximo entrelazamiento (Ecuación 3.21-3.22) mediante la matriz densidad reducida de cada estado (figura 3.30 (a)-(f)) (En el apéndice 7 se analiza con más detalle este punto).

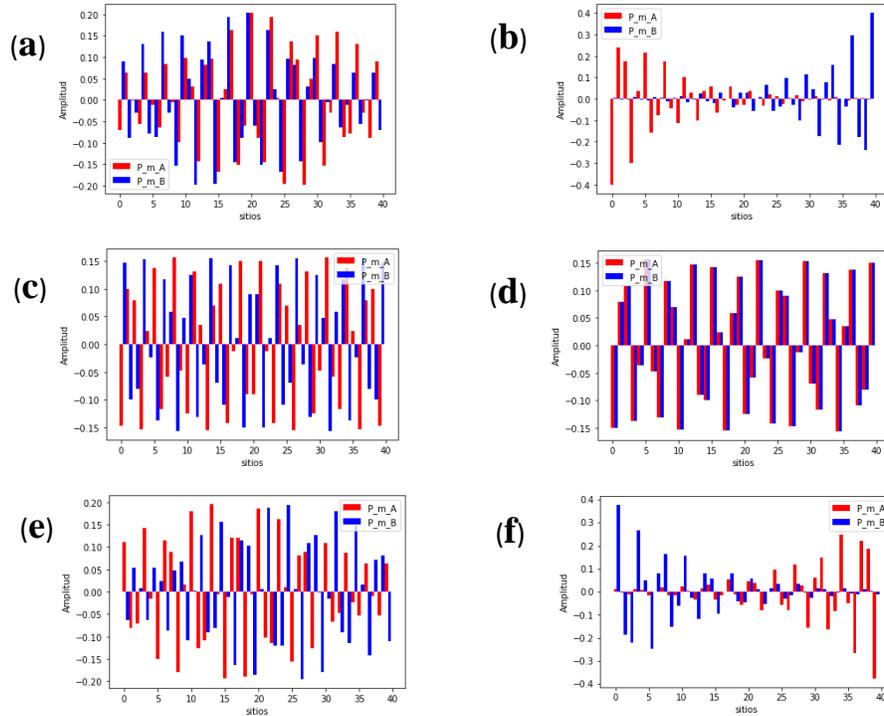


Figura 3.31. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH extendido respecto de la figura 3.20 (a). Para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y tunelajes  $w = 0.5$  y  $v = 0.3$ , para el estado bulto base  $E_g$  con (a)  $z = 0.4$ , (c)  $z = 0.5$  y (e)  $z = 0.6$ , y el estado borde  $E_B$  con (b)  $z = 0.4$ , (d)  $z = 0.5$  y (f)  $z = 0.6$ .

Por otra parte, resulta importante conocer qué tipo de estados son los que se encuentran presentes en el SSH extendido, por esto en las figuras 3.31-3.33 se muestran las

distribuciones de las amplitudes por sitio. Con respecto a la figura 3.31(a)-(f) esta es la distribución de amplitudes por sitio de la figura 3.20 (a), notemos que en esta situación nos encontramos en un intervalo de regiones topológicas que va de una fase geométrica  $\pi \rightarrow -\pi$ , se cálculo la distribución de amplitudes para el estado  $E_g$  y el estado borde  $E_B$ , y se encontró que en ambos estados se presenta una inversión en la distribución de las amplitudes por sitio al sufrir una transición de fase topológica  $\pi \rightarrow -\pi$ , aun más, parece ser que en el punto crítico  $w = z$  la función de onda en ambos estados parece comportarse por cada sitio sobre la cadena como un estado Bell de máximo entrelazamiento  $|\psi\rangle = \sum_i^N \alpha_i |\phi_i\rangle$ , con  $|\phi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|i, A\rangle \pm |i, B\rangle)$  (Apéndice 7), por ende este hecho resulta ser invariante respecto al estado del que se trate.

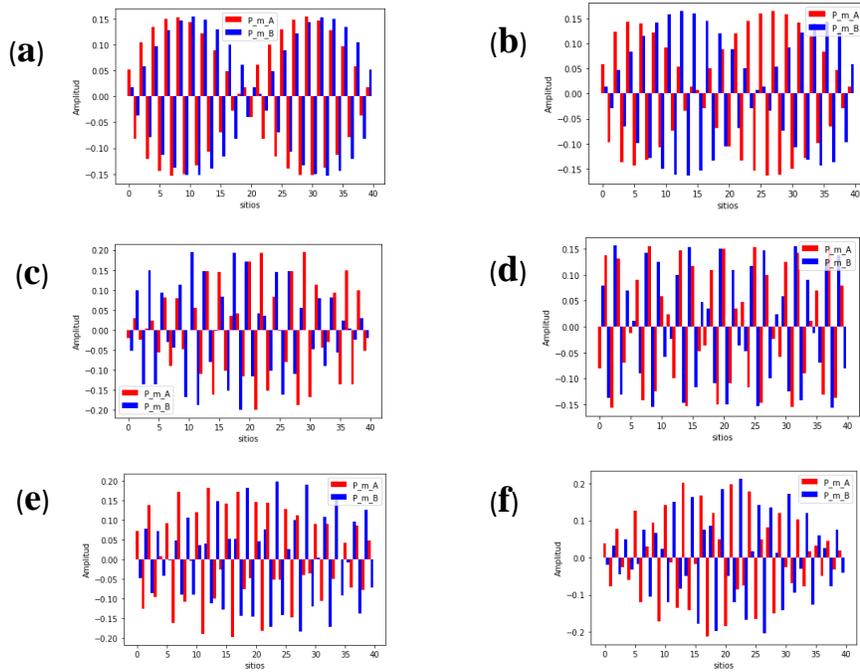


Figura 3.32. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH extendido respecto de la figura 3.20 (b). Para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y tunelajes  $w = 0.3$  y  $v = 0.5$  para el estado bulto base  $E_g$  con (a)  $z = 0.15$ , (b)  $z = 0.2$ , (c)  $z = 0.25$ , (d)  $z = 0.3$ , (e)  $z = 0.35$ , (f)  $z = 0.5$ , con parámetros  $v = 0.5$ ,  $w = 0.3$  y  $N = 50$  sitios.

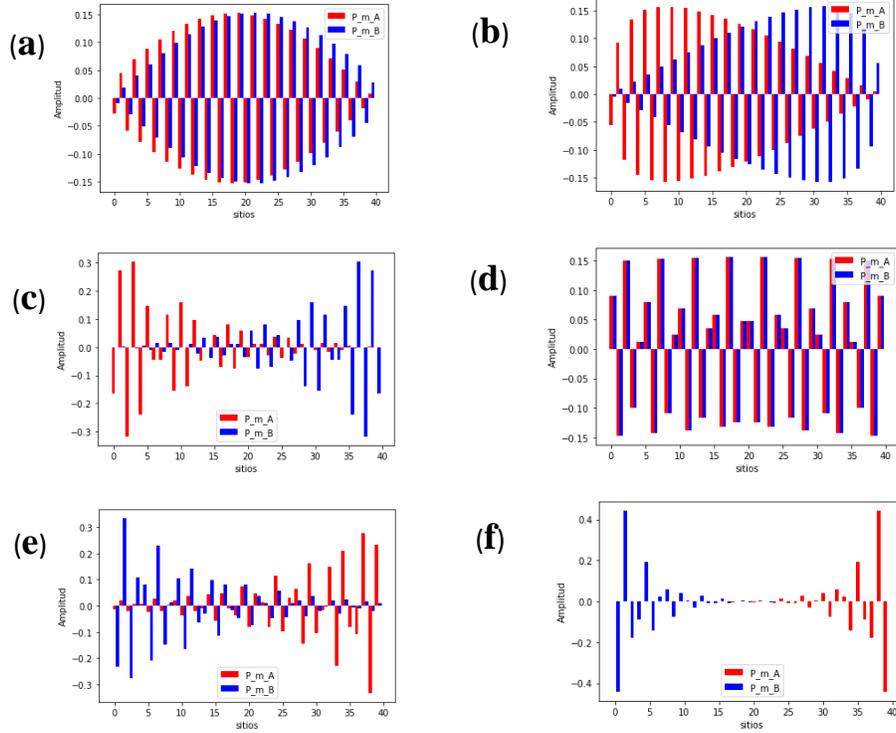


Figura 3.33. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH extendido respecto de la figura 3.20 (b). Para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y tunelajes  $w = 0.3$  y  $v = 0.5$  para el estado borde  $E_B$  con (a)  $z = 0.15$ , (b)  $z = 0.2$ , (c)  $z = 0.25$ , (d)  $z = 0.3$ , (e)  $z = 0.35$ , (f)  $z = 0.5$ , con parámetros  $v = 0.5$ ,  $w = 0.3$  y  $N = 50$  sitios.

El otro caso de interés es la distribución de probabilidades para la figura 3.20 (b), para esto la figura 3.32 (a)-(f) representa la distribución de amplitudes del estado bulto  $E_g$  de dicho caso, de igual manera la figura 3.33 (a)-(f) lo es solo que en esta se trata de un estado borde  $E_B$ . Para estas distribuciones de amplitud nos encontramos en una región más rica en fases ya que tenemos dos transiciones de fase,  $0 \rightarrow \pi$  y  $\pi \rightarrow -\pi$ , tenemos que hacer notar que para ambos estados de bulto  $E_g$  y de borde  $E_B$  tenemos un mismo fenómeno en la distribución por sitio ya que independientemente de la transición de fase, trivial-topológica o topológica-topológica es similar su comportamiento, sin embargo, tenemos que resaltar que en el punto crítico de la transición de fase trivial-topológica,  $v = w + z$ , tiene una distribución compleja debido a que es un punto de degeneración en el sistema y lo más importante es que no se trata de un estado de Bell (figura 3.32 (b)-figura 3.33 (b))(Apéndice 7), por otro lado, en el punto crítico  $w = z$  donde ocurre la transición de fase topológica-topológica aparece nuevamente un estado de máximo entrelazamiento tipo Bell (figura 3.32 (d)-figura 3.33 (d)).

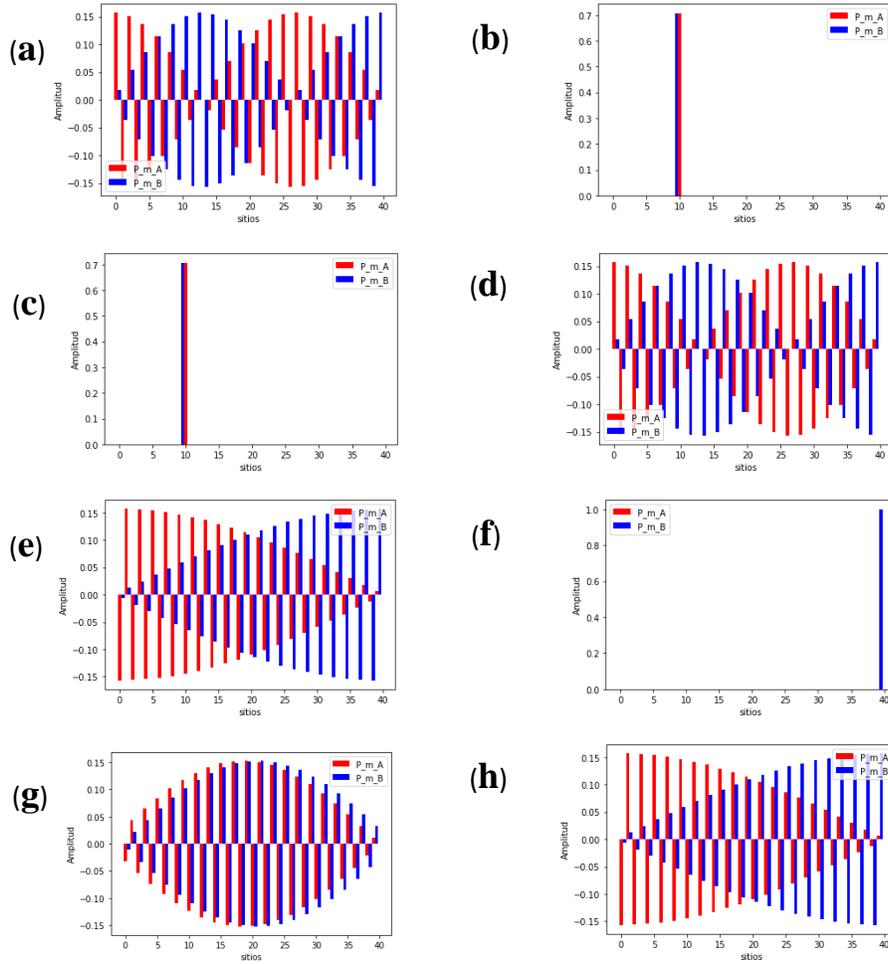


Figura 3.34. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH modulado  $\vartheta$  respecto de la figura 3.24 (a)-(b). Para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y tunelajes  $w(\vartheta) = 1$ ,  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0$ , para el estado bulto base  $E_g$  con (a)  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ , (b)  $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$ , (c)  $\vartheta = \frac{4\pi}{3}$  y (d)  $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$ , y para el estado borde  $E_B$  con (b)  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ , (d)  $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$ , (f)  $\vartheta = 0$  y (h)  $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$ .

Para el modelo SSH simple modulado  $\vartheta$ , en la figura 3.34 (a)-(h) se presenta la distribución de amplitudes por sitio  $m$  sobre la cadena de  $N = 40$  celdas unitarias con tunelajes  $w(\vartheta) = 1$ ,  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0$ . En el caso del estado  $E_g$  a una  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$  (Figura 3.34 (a)) la relación de distribución de amplitud es igual a la que se tiene a una  $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$  (Figura 3.34 (d)) estas dos distribuciones se encuentran relacionadas a los picos de entrelazamiento máximo que se producen a causa de la transición de fase topológica  $v(\vartheta) = w(\vartheta)$  y el cual tiene un entrelazamiento máximo  $K(v(\vartheta) = w(\vartheta)) = 2$ , por otro lado, también vemos que la

distribución de amplitud en  $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$  (Figura 3.34 (b)) y  $\vartheta = \frac{4\pi}{3}$  (Figura 3.34 (c)) son iguales debido a que están relacionados a la misma condición de dimerización topológica  $v(\vartheta) = 0$ , el cual tiene un entrelazamiento máximo  $K(v(\vartheta) = 0) = 2$ . En el caso para el estado borde tenemos que los puntos  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$  (Figura 3.34 (e)) y  $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$  (Figura 3.34 (h)) tiene una distribución de amplitud igual. Esto se debe a que en esos valores de  $\vartheta$  se alcanza el punto de transición de fase topológica  $v(\vartheta) = w(\vartheta)$  donde hay un entrelazamiento máximo  $K(v(\vartheta) = w(\vartheta)) = 2$ , por otro lado, en la figura 3.34 (f) con  $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$  el estado se vuelve separable ya que  $K(\vartheta = \frac{2\pi}{3}) = 1$  y para la figura 3.34 (g) con  $\vartheta = 0$  tenemos una distribución de amplitudes por sitio homogénea sobre la cadena. El entrelazamiento es máximo  $K(\vartheta = 0) = 2$  y los estados presentes son tipo Bell (Apéndice 7).

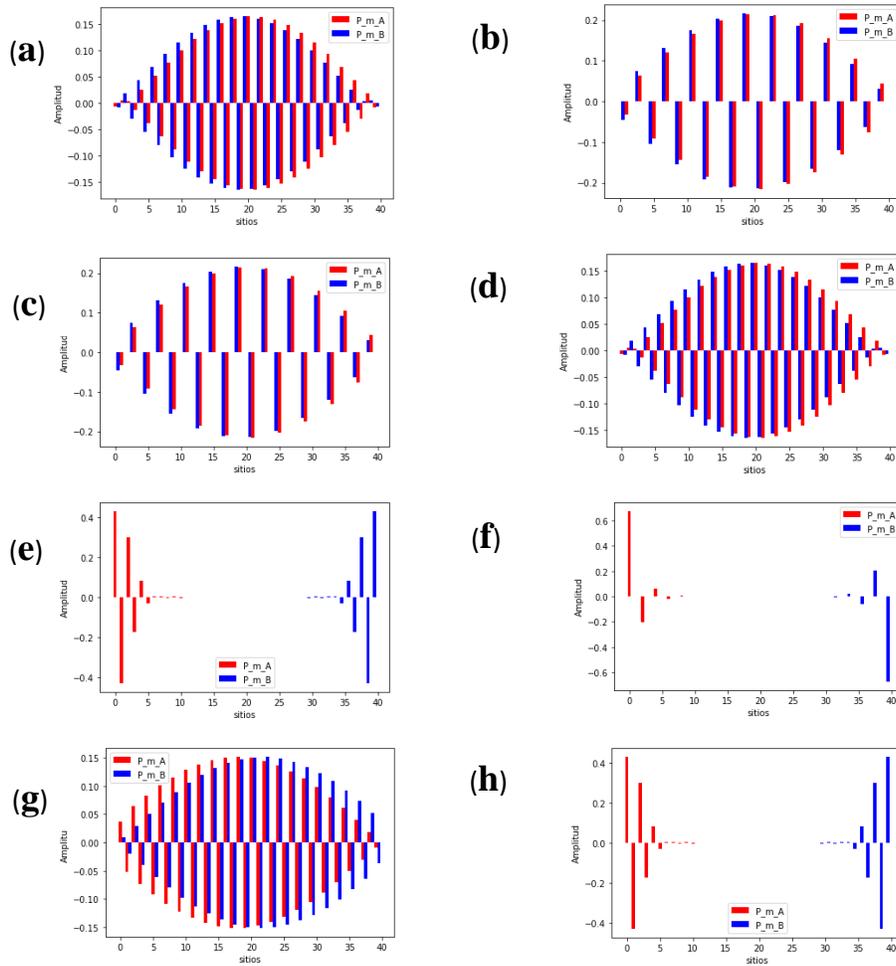


Figura 3.35. Distribución de amplitudes por sitio para el modelo SSH modulado  $\vartheta$  respecto de la figura 3.24 (c)-(d). Para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y tunelaje  $w(\vartheta) = 1$ ,  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ , para el

estado bulto base  $E_g$  con (a)  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ , (b)  $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$ , (c)  $\vartheta = \frac{4\pi}{3}$  y (d)  $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$ , y para el estado borde  $E_B$  con (e)  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$ , (f)  $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$ , (g)  $\vartheta = 0$  y (h)  $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$ .

Para el modelo SSH extendido modulado  $\vartheta$ , en la figura 3.35 (a)-(h) se presenta la distribución de amplitudes por sitio  $m$  sobre la cadena de  $N = 40$  celdas unitarias con tunelaje  $w(\vartheta) = 1$ ,  $v_p = 0.5$  y  $z(\vartheta) = 0.3$ . En el caso del estado  $E_g$  a una  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$  (Figura 3.35 (a)) la relación de distribución de amplitud es igual a la que se tiene a una  $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$  (Figura 3.35 (d)) estas dos distribuciones se encuentran relacionadas a los picos de entrelazamiento máximo que se producen a causa de la transición de fase topológica  $v(\vartheta) = w(\vartheta)$  y el cual tiene un entrelazamiento máximo  $K(v(\vartheta) = w(\vartheta)) = 2$ , por otro lado, también vemos que la distribución de amplitud en  $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$  (Figura 3.35 (b)) y  $\vartheta = \frac{4\pi}{3}$  (Figura 3.35 (c)) son iguales debido a que están relacionados a la misma condición de dimerización topológica  $v(\vartheta) = 0$ , el cual tiene un entrelazamiento máximo  $K(v(\vartheta) = 0) = 2$ . En el caso para el estado borde tenemos que los puntos  $\vartheta = \frac{\pi}{3}$  (Figura 3.35 (e)) y  $\vartheta = \frac{5\pi}{3}$  (Figura 3.35 (h)) tiene una distribución de amplitud igual esto se debe a que en esos valores de  $\vartheta$  se alcanza el punto de transición de fase topológica  $v(\vartheta) = w(\vartheta)$  donde hay un entrelazamiento máximo  $K(v(\vartheta) = w(\vartheta)) = 2$ , por otro lado, en la figura 3.35 (f) con  $\vartheta = \frac{2\pi}{3}$  el estado se vuelve más robusto debido a que el estado se localiza más en los bordes y  $K\left(\vartheta = \frac{2\pi}{3}\right) = 2$ , para la figura 3.35 (g) con  $\vartheta = 0$  tenemos una distribución de amplitudes por sitio homogénea sobre la cadena, en este caso el entrelazamiento es máximo  $K(\vartheta = 0) = 2$  y los estados presentes son tipo Bell (Apéndice 7)

Como conclusiones de esta sección encontramos que los máximos de entrelazamiento en el modelo SSH están representados por estados tipo Bell. Con respecto a estos máximos de entrelazamiento tenemos dos condiciones que los producen, éstas son, la transición de fase topológica  $v(\vartheta) = w(\vartheta)$  y la dimerización topológica  $v(\vartheta) = 0$ . También se encontró que los estados borde en su región topológica producen una distribución de amplitud por sitio mayoritariamente en los bordes de la cadena y éstos generan estados de máximo entrelazamiento tipo Bell debido a la robustez de estos estados. Por otra parte, los máximos de entrelazamiento en el modelo SSH simple y SSH extendido estuvieron caracterizados

por presentar estado tipo Bell, sin embargo, en el modelo SSH extendido se tuvo más regiones de entrelazamiento tipo Bell debido a la presencia de fase geométrica.

### 3.7. Correlaciones cuánticas: ensamble térmico

En sistemas compuestos, resulta interesante entender como estos sistemas cuánticos conjuntos se encuentran compartiendo información entre subsistemas, en particular, los efectos térmicos siempre son de interés puesto que éstos se encuentran presentes en muchos sistemas reales, y es en este contexto donde indagaremos cómo las correlaciones cuánticas se relacionan con ciertas observables y codifican la información cuántica del sistema.

#### 3.7.1. Variables termodinámicas y distribución de probabilidad

Si se considera un ensamble canónico (Apéndice 4), en el cual no hay flujo de materia y la temperatura permanece constante, el sistema SSH bajo este baño térmico está sujeto a correlaciones termodinámicas, las cuales generan excitaciones a altas temperaturas y a bajas temperaturas el sistema primordialmente esta descrito por sus estados de menor energía.

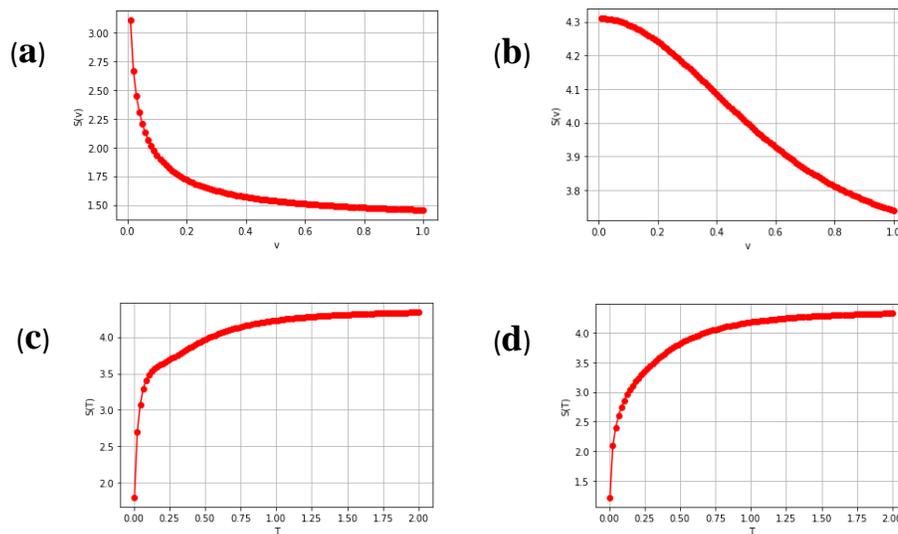


Figura 3.36. Entropías de información termodinámica. (a)  $w = 0.5$ ,  $T = 0.005$  y (b)  $w = 0.5$ ,  $T = 0.5$ , son las entropías en función del tunelaje  $v$ ; (c)  $w = 0.6$ ,  $v = 0.1$  y (d)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.5$ , son las entropías en función de la temperatura,  $N = 40$  uniceldas y el tunelaje a  $2^{\text{do}}$  vecinos  $z = 0$ .

En la entropía termodinámica vía la expresión de Shannon (Apéndice 4) (figura 3.36 (a)-(d)), se observa en la figura 3.36 (a) que la entropía en función de la amplitud de tuneo  $v$  con un tunelaje  $w = 0.5$  y una temperatura muy baja  $T = 0.005$ , decreta conforme  $v$  aumenta. Es importante resaltar que en la región  $v < w$  (régimen topológico) tenemos más entropía que en la región  $v > w$  (régimen trivial); que el aumento en la temperatura provoca mayor grado de mezcla estadística y por ende un aumento en la entropía, además hay que notar que en  $v < w$  hay más entropía.

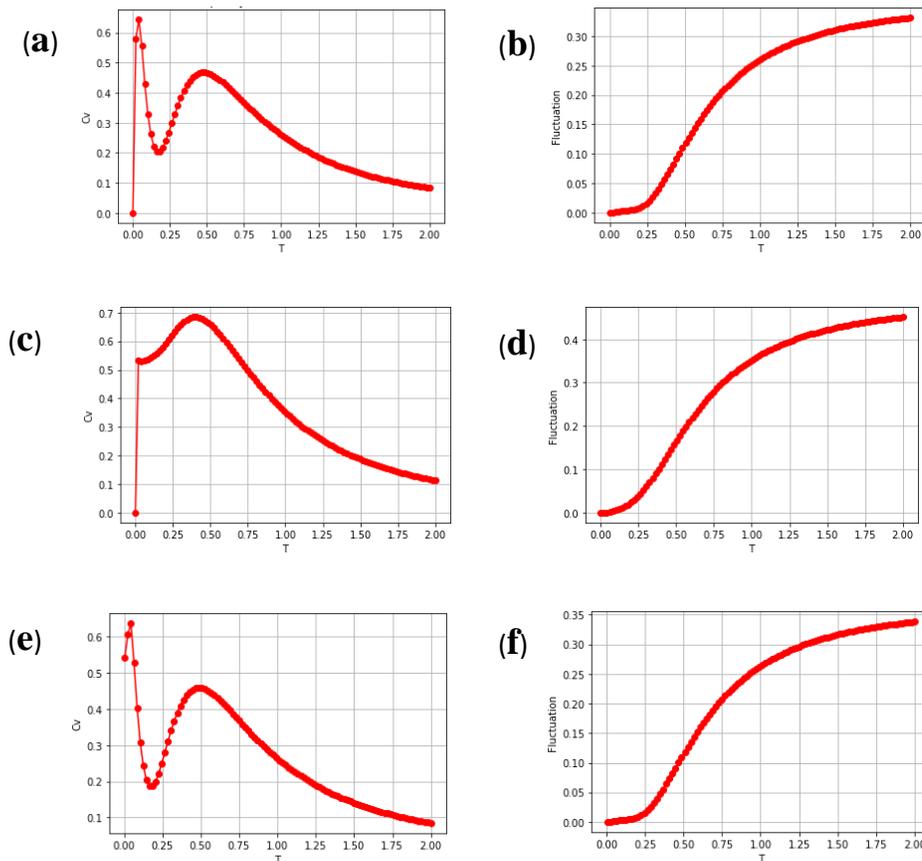


Figura 3.37. Capacidad calorífica y fluctuación de la energía para una cadena de  $N = 40$  uniceldas . (a)  $w = 0.6$ ,  $v = 0.1$ , (c)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.5$  y (e)  $w = 0.1$ ,  $v = 0.6$ , son las capacidades caloríficas en función de la temperatura; (b)  $w = 0.6$ ,  $v = 0.1$ , (d)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.5$  y (f)  $w = 0.1$ ,  $v = 0.6$ , son las fluctuaciones en la energía asociadas. Se considero siempre el tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z = 0$ .

En la figura 3.36 (b), se presenta a la entropía en función de la amplitud de tuneo  $v$  con tunelaje  $w = 0.5$  pero ahora tenemos una temperatura más elevada que en la figura 3.36 (a) y como se aprecia vemos que la entropía decae más lentamente conforme  $v$  aumenta, todavía vemos que en la región  $v < w$  (régimen topológico) hay mas entropía de

información que en la región  $v > w$  (régimen trivial); sin embargo, el cambio de la entropía entre las dos regiones no es tan diferente y como vemos, el efecto de la temperatura suaviza esta transición topológica. En la figura 3.36 (c) y 3.36 (d) se presentan las entropías en función de la temperatura  $T$  con parámetros  $w = 0.6, v = 0.1$  y  $w = 0.5, v = 0.5$ , respectivamente.

Con respecto a la capacidad calorífica (figura 3.37 (a)-(f)), se ve que hay un comportamiento de tipo Schottky (Souza et al., 2016) en la figura 3.37 (a) la cual se ha graficado en función de la temperatura  $T$  con parámetros de hopping  $v = 0.1$  y  $w = 0.6$  (región topológica,  $v < w$ ). El comportamiento tipo Schottky es el fenómeno en el que la capacidad calorífica tiene picos máximos a bajas temperaturas como se observa en la figura 3.37 (a), estos dos picos en la anomalía Schottky surgen debido a que en el régimen de bajas temperaturas solo los dos estados de más baja energía contribuyen significativamente en la descripción del ensemble a la capacidad calorífica, el primer pico que se observa en  $T < 0.1$  tiene asociado una brecha de energía  $\Delta\varepsilon_2 = \varepsilon_2 - \varepsilon_0$  y el segundo tiene una brecha de energía  $\Delta\varepsilon_1 = \varepsilon_1 - \varepsilon_0$ . El primer pico  $\Delta\varepsilon_2$  desaparece en el régimen de altas temperaturas y sólo la brecha asociada al primer estado excitado y el estado base importa. Por otro lado, para el caso metálico (figura 3.37 (c)) se fijó a los tunelajes en  $v = w = 0.5$ , se observa que cuando el gap se cierra en el punto  $v = w$  la anomalía Schottky desaparece. En la figura 3.37 (e), se utilizaron los tunelajes  $v = 0.6$  y  $w = 0.1$  (región trivial,  $v > w$ ), se aprecia que tiene el mismo comportamiento tipo Schottky que en la figura 3.37 (a), por lo tanto, podemos decir que la anomalía Schottky no es propia de la región topológica sino que es posible que esté presente en ambas regiones del modelo SSH simple. En el caso de la fluctuación de la energía (figura 3.37 (b)-(d)-(f)) se ve que ésta aumenta cuando la temperatura también incrementa para ambos casos, con y sin anomalía de Schottky.

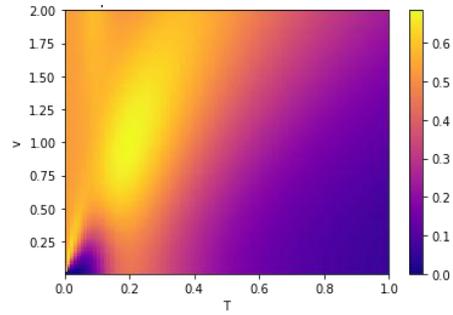


Figura 3.38. Diagrama de la capacidad calorífica en función de la temperatura  $T$  y la amplitud de tunelaje  $v$  para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias. Aquí hemos fijado al tunelaje  $w = 0.5$  y al tunelaje a  $2^{\text{do}}$  vecinos  $z = 0$ .

En la figura 3.38, se presenta el diagrama de la capacidad calorífica para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias en función de la temperatura y el tunelaje intracelda  $v$ , donde se ha fijado al tunelaje intercelda  $w = 0.5$  y se consideró al tunelaje a  $2^{\text{do}}$  vecinos  $z = 0$ . Se puede apreciar que a bajas temperaturas  $T < 0.2$  está presente la anomalía Schottky y que al aumentar la temperatura lo suficiente se pierde la capacidad calorífica, por otro lado, vemos que si mantenemos grande el tunelaje  $v$  la capacidad calorífica perdura más en temperaturas  $T$  altas.

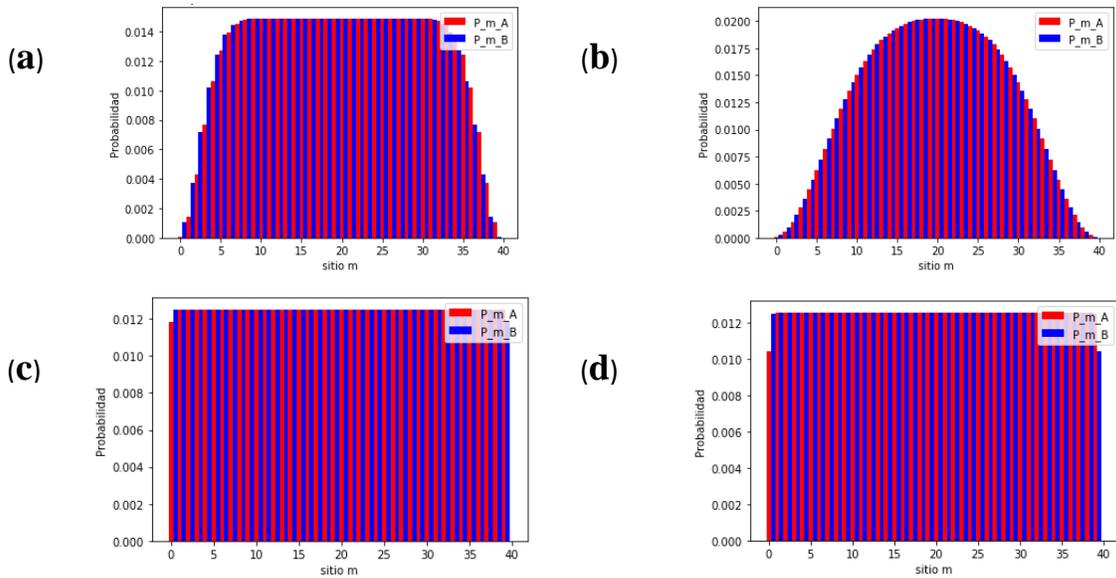


Figura 3.39. Distribución de probabilidades del ensamble térmico por sitio. (a)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.1$  y (b)  $w = 1$ ,  $v = 1$ , con temperatura  $T = 0.003$ ; (c)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.1$  y (d)  $w = 1$ ,  $v = 1$ , con un aumento en la temperatura a  $T = 1.5$ ,  $N = 40$  uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos  $z = 0$ .

En relación con la distribución de probabilidades del ensemble térmico en función de la posición  $m$  sobre la cadena de  $N = 40$  celdas unitarias (figura 3.39 (a)-(d)), con matriz de densidad en su descomposición espectral  $\rho_E = \sum_{i=1}^N p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$  con  $P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\mathbb{Z}}$ , donde el factor de normalización,  $\mathbb{Z} = \sum_j e^{-\beta E_j}$ , es también conocido como la función de partición canónica. Se tiene una distribución de probabilidades por sitio con comportamiento gaussiano a bajas temperaturas (figura 3.39 (a)-(b)) con más definición de una distribución gaussiana cuando  $v = w$  (figura 3.39 (b)), por el contrario, en el régimen de altas temperaturas todos los sitios tienden a una misma probabilidad de ocupación (figura 3.39 (c)-(d)), lo cual se debe a que se alcanza el grado de máximo mezclado estadístico y por ende los estados se vuelven indistinguibles, como se observa en la figura 3.39 (c) con  $w = 0.5$ ,  $v = 0.1$  y en la figura 3.39 (d) con  $w = v = 1$ , los estados están igualmente pesados en función de la posición  $m$  sobre la cadena.

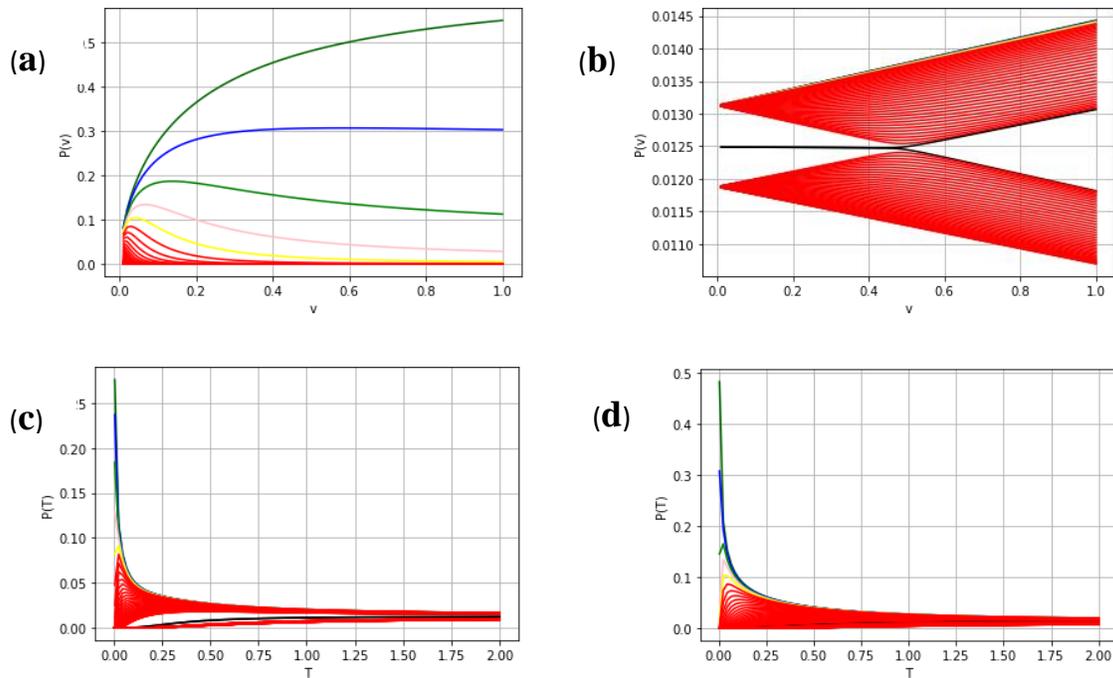


Figura 3.40. Probabilidad de los eigenestados en el ensemble. (a)  $w = 0.5$ ,  $T = 0.005$  y (b)  $w = 0.5$ ,  $T = 10$ , variando el tunelaje  $v$ ; (c)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.1$  y (d)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.5$ , variando la temperatura,  $N = 40$  uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos  $z = 0$ .

En la figura 3.40 (a)-(d), se presenta la probabilidad de los eigenestados del ensemble para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y con tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z = 0$ , en la figura 3.40 (a)-(b) se graficaron los eigenestados en función del tunelaje intracelda  $v$  con tunelaje

intercelda  $w = 0.5$ , en la figura 3.19 (a) se tiene una baja temperatura  $T = 0.005$  y como se aprecia los eigenestados de valencia más negativos, es decir,  $-E_{40}, -E_{39}, -E_{38}$ , etc., son los que dominan la probabilidad del ensemble. En la figura 3.40 (b) se tiene una alta temperatura  $T = 1.5$ , y como se observa todos los eigenestados tanto de la banda de valencia como la banda de conducción contribuyen prácticamente lo mismo a la probabilidad del ensemble. Notemos también que aparecen los estados de borde (curvas negras) con una probabilidad diferente a cero y de orden de magnitud en probabilidad similar a los estados del bulto (figura 3.40 (b)). El comportamiento de los eigenestados bajo el efecto térmico (figura 3.40 (c)-(d)) para bajas temperaturas  $T < 0.1$  esta dominado por los estados de valencia más negativos y conforme la temperatura aumenta los estados asociados a la banda de conducción contribuyen gradualmente a la probabilidad ya que este aumento en la temperatura excita los niveles de energía permitidos en el sistema. En la figura 3.40 (c) se uso un tunelaje  $w = 0.5$  y  $v = 0.1$ , como se observa el gap permanece abierto aun con efectos térmicos, sin embargo, al alcanzar un valor alto de temperatura esto provoca su cierre (figura 3.40 (c)) y en el límite  $T \rightarrow 0$  el sistema se encuentra en el estado de mínima energía, por otro lado, en la figura 3.40 (d) al usar un tunelaje  $w = 0.5$  y  $v = 0.5$ , esta brecha de energía desaparece.

### **3.7.2. Información cuántica de Fisher optimizada y su relación con el vector de Bloch y la capacidad calorífica.**

De acuerdo con la teoría expuesta en la sección 1.3.1, se calculó la no clasicidad por medio de un proceso de optimización mediante la minimización de la información cuántica de Fisher dando lugar a una métrica de las correlaciones cuánticas tipo discordia cuántica en el sistema debido a excitaciones térmicas. En esta sección, calculamos la información cuántica de Fisher optimizada, además, buscamos su relación con el vector de Bloch y la capacidad calorífica como observable.

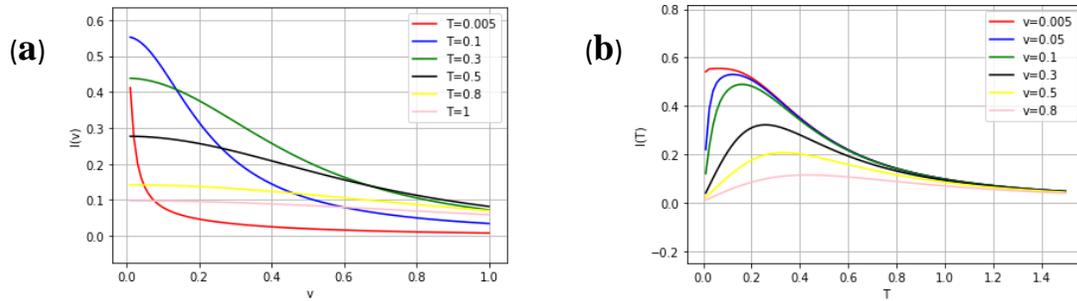


Figura 3.41. Información cuántica de Fisher optimizada. (a) QFI en función del tunelaje  $v$  y (b) variando la temperatura  $T$ , con  $w = 0.5$  y  $N = 40$  uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos  $z = 0$ .

En la figura 3.41 (a), se observa el comportamiento de la información cuántica de Fisher optimizada en función del tunelaje intracelda  $v$  y con un tunelaje intercelda  $w = 0.5$ , para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias con distintos valores en la temperatura. Como se aprecia en la región  $v < w$  (régimen topológico) es mayor la correlación cuántica que en la región  $v > w$  (régimen trivial) y también al aumentar la temperatura la información cuántica decrementa a causa del ruido térmico, el cual genera fluctuaciones en la energía y destruye la coherencia cuántica. En la figura 3.41 (b), se graficó la información cuántica de Fisher optimizada en función de la temperatura  $T$  para distintos valores del tunelaje intracelda  $v$  y un tunelaje intercelda  $w = 0.5$ . Como se puede contemplar el efecto de la temperatura genera que la información cuántica de Fisher optimizada en el sistema SSH simple tienda a perderse conforme la temperatura incrementa. Notemos que en el caso límite  $v = 0.005$  cerca del dimerizado topológico, es decir,  $v = 0$  y  $w \neq 0$ , la información cuántica de Fisher optimizada tiene su valor máximo,  $I(v=0.005) \approx 0.6$ , justo en la temperatura  $T = 0.005$  más pequeña (figura 3.41 (b)), además, cabe mencionar que en  $v = 0$  el sistema se dimeriza topológicamente en singletes y se alcanza un punto de máxima correlación. Aquí radica una relación importante encontrada anteriormente para el número de Schmidt y la polarización eléctrica los cuales eran máximos en este punto de dimerizado topológico, como vemos la QFI optimizada también presenta este punto de máxima correlación.

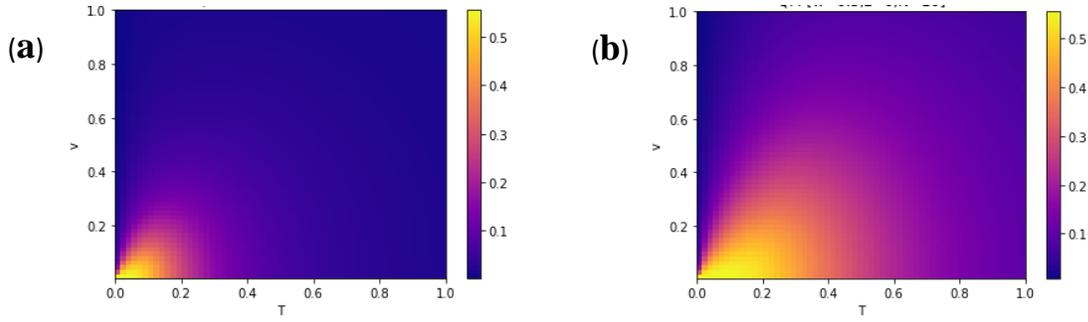


Figura 3.42. Información cuántica de Fisher optimizada. (a) QFI en función del tunelaje  $v$  y (b) variando la temperatura  $T$ , con  $w = 0.5$  y  $N = 40$  uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos  $z = 0$ .

En la figura 3.42 (a)-(b), se examina la información cuántica de Fisher optimizada en función del tunelaje intracelda  $v$  y la temperatura  $T$  para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias para el modelo SSH simple,  $z = 0$ . En la figura 3.42 (a) se fija al hopping intercelda  $w = 0.2$ , se aprecia que la máxima correlación de la QFI optimizada se encuentra en la región  $v < w$  (región topológica) y esto lo podemos adjudicar a la robustez de los estados borde. En la figura 3.42 (b), tenemos un tunelaje  $w = 0.5$  y como se observa la QFI optimizada se ha recorrido más hacia temperaturas más altas, por ende, observamos que al aumentar el tunelaje  $w$  la región topológica aumenta y esto genera una protección en la información cuántica para temperaturas más altas. A diferencia del número de Schmidt (figura 3.42 (a)) que caracteriza a la transición de fase topológica en  $v = w$  vemos que la QFI optimizada no la determina (figura 3.42 (a)-(b)).

Es importante recalcar que a diferencia del número de Schmidt que mide el entrelazamiento puro, la QFI optimizada es un tipo de correlación cuántica tipo discordia y su valor está dado tanto por contribuciones de correlaciones clásicas producto de las fluctuaciones térmicas como correlaciones cuánticas debido al entrelazamiento o discordia cuántica presentes en el modelo SSH, es decir, podemos escribir a la QFI optimizada como una suma de correlaciones,  $F_Q = F_{Clásica} + F_{Discordia}$ , donde  $F_{Clásica}$  es la contribución por parte del ensemble estadístico térmico y  $F_{Discordia}$  es la contribución del entrelazamiento o de forma más general, discordia cuántica.

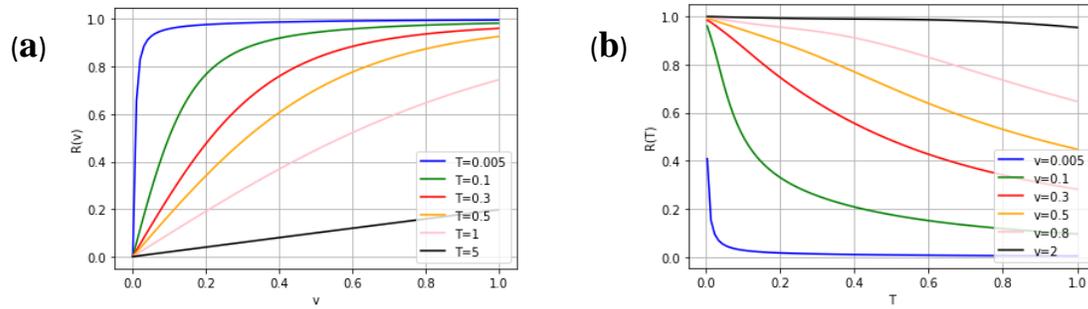


Figura 3.43. Vector de Bloch del ensemble estadístico. (a) Vector de Bloch en función del tunelaje  $v$  y (b) variando la temperatura, con  $w = 0.5$  y  $N = 40$  uniceldas y el tunelaje a segundos vecinos  $z = 0$ .

En la figura 3.43 (a), examinamos el vector de Bloch para el modelo SSH simple (tunelaje a  $2^{do}$  vecinos,  $z = 0$ ) en función del tunelaje intracelda  $v$  para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias donde hemos considerado al tunelaje intercelda  $w = 0.5$ . Como se observa (figura 3.43 (a)) el vector de Bloch tiende a cero,  $|\vec{r}| \rightarrow 0$ , cuando hacemos que  $v \rightarrow 0$ , al aumentar la temperatura vemos que las curvas toman valores más pequeños para el vector de Bloch, por lo tanto, la temperatura induce un mezclado en el sistema y produce a altas temperaturas que el vector de Bloch sea más pequeño, notemos además que la región topológica  $v < w$  siempre tiene un vector de Bloch más bajo que la región trivial  $v > w$ . En la figura 3.43 (b), se presenta el vector de Bloch en función de la temperatura  $T$  para distintos valores del tunelajes intracelda  $v$ , con  $w = 0.5$  y  $z = 0$ , en este caso vemos que al aumentar el tunelaje  $v \rightarrow 0$  el vector de Bloch tiende a cero,  $|\vec{r}| \rightarrow 0$ , y el efecto de la temperatura produce un mezclado estadístico tal que, hace que el vector de Bloch se pierda. En conclusión, el vector de Bloch para el ensemble estadístico queda determinado por la mezclado térmico y el entrelazamiento intrínseco ya que a bajas temperaturas vemos que aún se presenta el punto de máximo entrelazamiento en el dimerizado topológico  $v = 0$  y  $w \neq 0$ , sin embargo, ya no se encuentra presente en el vector de Bloch la transición de fase topológica  $v = w$  en el ensemble estadístico, por lo expuesto previamente tenemos que en el ensemble estadístico no podemos decir que en  $|\vec{r}| = 0$  hay máximo entrelazamiento sino más bien lo correcto es decir que el vector de Bloch en el ensemble estadístico (figura 3.43(a)-(b)) tiene su “máximo mezclado” determinado por la suma de la parte térmica y entrelazamiento, por ende, el vector de Bloch para este ensemble mixto es una suma de correlaciones clásicas y cuánticas.

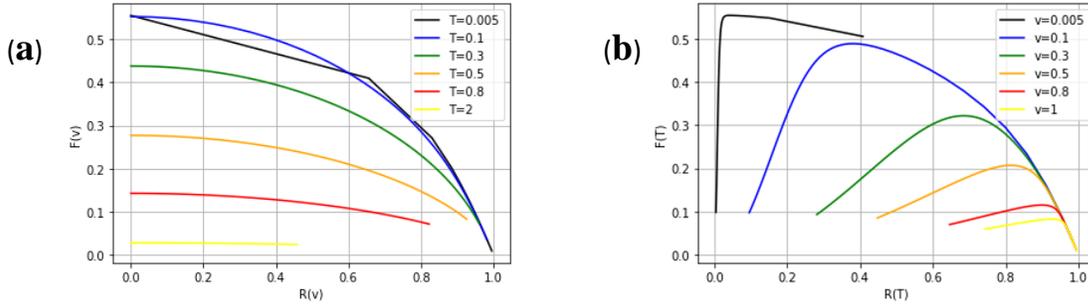


Figura 3.44. QFI optimizada vs Vector de Bloch. (a) En función del tunelaje  $v$  y (b) variando la temperatura  $T$ , con  $w = 0.5$ ,  $z = 0$  y  $N = 40$  uniceldas.

En la figura 3.44 (a)-(b), se gráfico la información cuántica de Fisher optimizada contra el vector de Bloch para encontrar una relacion entre estas dos cantidades. En la figura 3.44 (a), tanto la QFI optimizada y el vector de Bloch se presentan en función del tunelaje intracelda  $v$  y variamos el valor de la temperatura para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias, con el tunelaje intercelda  $w = 0.5$  y el tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z = 0$ , como se aprecia todas las curvas tienen un valor maximo para la QFI optimizada cuando el vector de Bloch es cero,  $|\vec{r}| = 0$ , y estos maximos alcanzan valores más grande en la QFI optimizada al decrementar la temperatura, y esto es debido a que en el régimen de bajas temperaturas se alcanza una maxima correlación cuántica. Por otra parte, en la figura 3.44 (b) se grafico la QFI optimizada y el vector de Bloch en función de la temperatura  $T$  y se vario el tunelaje intracelda  $v$ , con el tunelaje intercelda  $w = 0.5$  y el tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z = 0$ . Como se aprecia en la figura 3.44 (b) las curvas tienen un valor máximo para la QFI optimizada en principio para un vector de Bloch  $|\vec{r}| \neq 0$ , la curva negra que tiene un valor  $v = 0.005$  es el caso limite cercano al dimerizado topológico ( $v = 0, w \neq 0$ ) y su correspondiente vector de Bloch  $|\vec{r}| = 0$ , en este caso el máximo de la QFI optimizada  $I(v = 0) \approx 0.6$ , tiene una relación bien definida con el entrelazamiento trivial  $K(v = 0) = 2$ . Al aumentar el tunelaje intracelda  $v$  vemos que los máximos de la QFI optimizada ocurren en distintos valores del vector de Bloch, pero en principio  $|\vec{r}| \neq 0$ , aquí diremos que al aumentar el tunelaje  $v$  la QFI optimizada  $I(v) \rightarrow 0$  y al mismo tiempo el vector de Bloch  $|\vec{r}| \rightarrow 1$ , y el mezclado del ensemble se pierde volviendose un sistema separable, por lo tanto, la separabilidad del mezclado estadístico del vector de Bloch produce que la QFI optimizada se pierda. Es importante también mencionar que en la región  $v < w$  (régimen topológico) tenemos

siempre una mayor QFI optimizada y al mismo tiempo el vector de Bloch en esta zona toma valores mas pequeños.

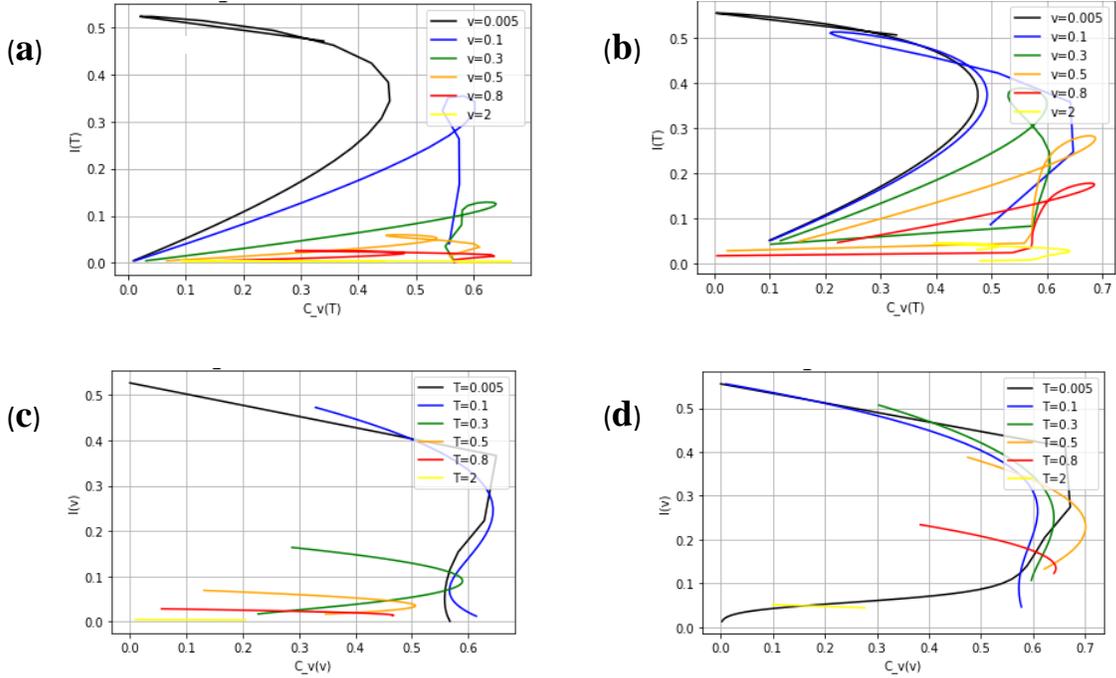


Figura 3.45. QFI vs  $C_V$  para una cadena  $N = 40$  uniceldas con tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z = 0$ . En función de la temperatura  $T$  con (a)  $w = 0.2$  y (b)  $w = 0.7$ . En función del tunelaje  $v$  con (a)  $w = 0.2$  y (b)  $w = 0.7$ .

Además, también se encontró la relación entre la capacidad calorífica y la información cuántica de Fisher en la figura 3.45 (a)-(d) para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z = 0$  (SSH simple). En la figura 3.45 (a), se graficó a la QFI optimizada y a la capacidad calorífica en función de la temperatura  $T$  con un tunelaje intercelda  $w = 0.2$  y se varió el tunelaje  $v$ , como se aprecia en el caso  $v = 0.005$  tiene su máximo en la QFI optimizada en el límite de dimerización topológica ( $v = 0, w \neq 0$ ) y la capacidad calorífica relacionado en este punto es cero  $C_V(v = 0) \approx 0$ , un valor cada vez más grande para el tunelaje intracelda  $v$  produce un valor máximo de la QFI optimizada cada vez más pequeño, es importante resaltar que la máxima correlación cuántica siempre ocurre en la región topológica  $v < w$ . Por otro lado, en la figura 3.45 (b) vemos que al aumentar el tunelaje intercelda a  $w = 0.7$  las curvas tienen un máximo para la QFI optimizada que se mantiene aún finito para valores del tunelaje intracelda  $v$  más grandes. En la figura 3.45 (c)-(d) para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y el tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z = 0$ , se examina la QFI optimizada y la capacidad calorífica en función del

tunelaje intracelda  $v$  y se grafica para distintos valores de la temperatura  $T$ . En la figura 3.45 (c) se considera un tunelaje intercelda  $w = 0.2$  donde vemos que para la temperatura  $T = 0.005$  tiene un valor máximo en la QFI optimizada el cual corresponde a un punto cero para la capacidad calorífica  $C_V(T = 0.005) = 0$ , al hacer la temperatura  $T$  más grande la QFI optimizada se pierde y a su vez la capacidad calorífica aumenta siendo distinta de cero, en la figura 3.45 (d) aumentamos el tunelaje intercelda  $w = 0.7$ , aquí vemos como la QFI optimizada perdura aún más en temperaturas más altas. Esto lo podemos asociar con el hecho de que la región topológica  $v < w = 0.5$  creció y por lo tanto hay más robustez topológica en las curvas presentadas (figura 3.45 (d)).

### 3.7.3. Fases geométricas en el ensamble térmico simple

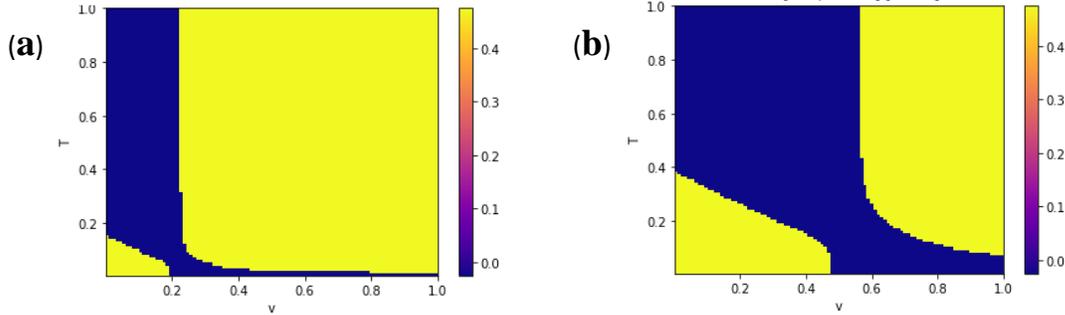


Figura 3.46. Diagramas de la polarización eléctrica en un ensamble termodinámico en función de la temperatura  $T$  y de la amplitud de tuneo  $v$ , para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias y tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z = 0$ . Para un tunelaje intercelda (a)  $w = 0.2$  y (b)  $w = 0.5$ .

Considerando los estados borde y sus eigenestados vecinos del bulto, existe una competencia en la contribución de la fase geométrica entre estas dos clases de estados (figura 3.46 (a)-(b)), se observa en la figura 3.46 (a) la polarización eléctrica en función de la temperatura  $T$  y el tunelaje intracelda  $v$  con un tunelaje intercelda  $w = 0.5$ , en la región topológica  $v < w$  debido a los estados del bulto vecinos a los estados borde, tenemos una polarización eléctrica  $P_e = \frac{e}{2}$ , donde  $e$  representa la carga del electrón y por fines de simplicidad hemos considerado unidades naturales,  $e = 1$ , y en la región trivial  $v > w$  disponemos de una contribución a la polarización eléctrica debido a los estados borde (figura 3.46 (a)), y en el punto  $v = w$  se tiene una  $P_e = 0$ . En la figura 3.46 (b), cambiamos el hopping intercelda  $w = 0.5$  y como se aprecia en la polarización eléctrica, la

contribución debida a los estados del bulto aumento (región topológica,  $v < w$ ) y la contribución debida a los estados borde ha disminuido (región trivial,  $v > w$ ). Notemos que para los estados del bulto que contribuyen a la polarización eléctrica existe una temperatura tope en la cual estos ya no aportan fase geométrica al sistema (figura 3.46 (a)-(b)). Por otra parte, los estados borde si pueden contribuir a la fase en temperaturas más altas, sin embargo, el sistema solo posee polarización eléctrica debido a los estados del bulto a temperaturas bajas.

Esta competencia en la fase geométrica entre los estados de borde y los del bulto, se puede explicar si consideramos un sistema compuesto por dos clases de estados, el cual se puede escribir como,

$$P = pe^{i\phi_1} + (1 - p)e^{i\phi_2} \quad (3.20)$$

En este caso el primer estado tiene una probabilidad  $p$  y una fase  $\phi_1$  asociada, y el segundo estado tiene una probabilidad  $1 - p$  con fase  $\phi_2$ .

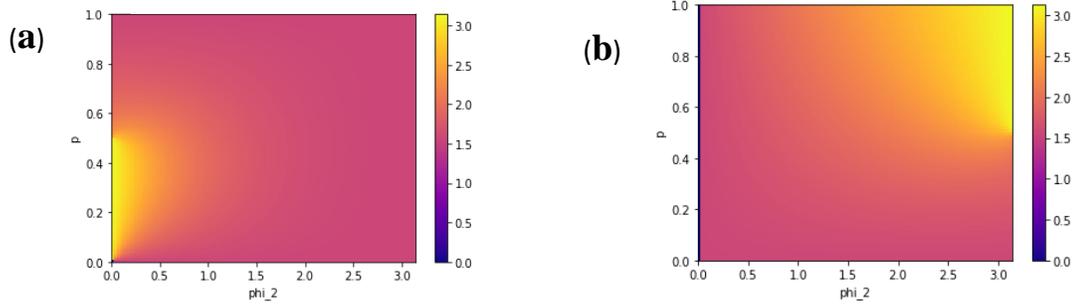


Figura 3.47. Diagrama de fase para un sistema de dos estados en función de  $p$  y  $\phi_2$ . (a)  $\phi_1 = 0$  y (b)  $\phi_1 = \pi$ .

Si fijamos a  $\phi_1 = 0, \pi$ , obtenemos un comportamiento similar a la figura 3.46 (a)-(b), en la cual si hacemos una analogía la figura 3.47 (a) representa los estados del bulto y la figura 3.47 (b) los estados de borde.

En conclusión, podemos ver que en general la polarización eléctrica para el ensamble estadístico del modelo SSH simple ya no caracteriza la transición de fase topológica, ya que en  $v = w$  tenemos una contribución a la polarización eléctrica tanto por parte de los estados del bulto y los estados borde, sin embargo, hay que notar que solo para temperaturas bajas  $T \rightarrow 0$  la polarización eléctrica total solo tendrá contribución debida a los estados bulto

vecinos a los estados borde (figura 3.46 (b)). Al aumentar la temperatura  $T$  vemos que los estados borde comienzan a contribuir en la polarización eléctrica y al tener una temperatura  $T$  lo suficientemente alta (figura 3.46 (b)) vemos que la polarización eléctrica sólo es determinada por los estados borde pero en este caso ya no es un caracterizador de la transición de fase topológica.

### 3.7.5. SSH extendido térmico

En la sección anterior hemos descrito el comportamiento de la QFI optimizada  $I(v, w, z = 0, T)$  y su relación con la capacidad calorífica  $C_V(v, w, z = 0, T)$ , el vector de Bloch  $R(v, w, z = 0, T)$  y la polarización eléctrica  $P_e(v, w, z = 0, T)$ . Por lo tanto, ya tenemos una descripción para el modelo SSH simple bajo un ensamble térmico. Como ya hemos resuelto el comportamiento en función del tunelaje intracelda  $v$  y el tunelaje intercelda  $w$ , en el caso del modelo SSH simple extendido con un tunelaje extra “ $z$ ” a  $2^{do}$  vecinos tenemos que ahora entender cual es el efecto que produce este tunelaje “ $z$ ” en las cantidades calculadas previamente. Para esto presentamos en esta sección los resultados en función de la temperatura  $T$  y el tunelaje  $z$ , y fijamos los tunelaje  $v$  y  $w$  a distintos valores, entonces tendremos que determinar  $I(z, T, v_f, w_f)$ ,  $C_V(z, T, v_f, w_f)$ ,  $R(z, T, v_f, w_f)$  y  $P_e(z, T, v_f, w_f)$ .

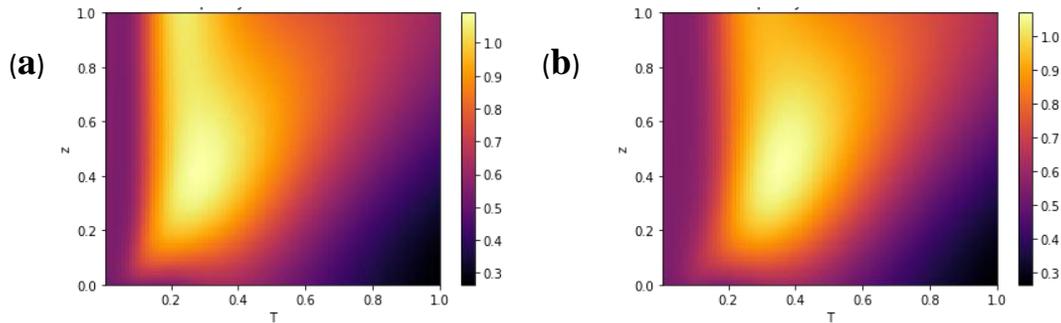


Figura 3.48. Diagrama de la capacidad calorífica SSH extendido en función de la temperatura  $T$  y el tunelaje  $z$ . (a)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.3$ , (b)  $w = 0.3$ ,  $v = 0.5$ , con  $N = 40$  uniceldas.

Como se observa en la capacidad calorífica (figura 3.48 (a)-(b)) la anomalía Schottky a bajas temperaturas desaparece al introducir un tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z \neq 0$ , sin embargo, aunque a temperaturas altas la capacidad calorífica disminuye, si se tiene una  $z \sim T$  la capacidad calorífica aun se encuentra en un rango finito. En la figura 3.48 (a), se tiene una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias con tunelaje intracelda  $v = 0.3$  y tunelaje intercelda

$w = 0.5$ . Vemos que a temperaturas bajas  $T < 0.1$  la capacidad calorífica disminuye, en este caso  $w > v$  (región topológica), hay que notar por otro lado que la capacidad calorífica no caracteriza la transición de fase topológica-topológica, es decir, cuando  $w = z$  y pasamos de la región  $z < w$  (winding number,  $\xi = 1$ ) a la región  $z > w$  (winding number,  $\xi = -1$ ), tampoco caracteriza la transición de fase topológica para el sistema SSH extendido en el punto  $w = z$  como se observa para la capacidad calorífica. En la figura 3.48 (b), se tiene un tunelaje intracelda  $v = 0.5$  y tunelaje intercelda  $w = 0.3$ , tenemos  $w < v$  (región trivial), vemos en este caso que a temperaturas bajas  $T < 0.2$  la capacidad calorífica disminuye y tampoco se caracteriza la transición de fase topológica. Por ende, tanto para el sistema SSH simple y SSH extendido, la capacidad calorífica no representa un caracterizador de las transiciones de fase topológicas, sin embargo, como ya vimos en el modelo SSH simple la capacidad calorífica tiene una relación con la métrica de correlación o la QFI optimizada en el aspecto de que el ensemble térmico induce una mezcla estadística en el sistema y esto afecta el valor de la QFI optimizada y la capacidad calorífica, entonces, estas dos cantidades se encuentran vinculadas por la parte clásica del sistema correspondiente a esta mezcla estadística de estados cuánticos.

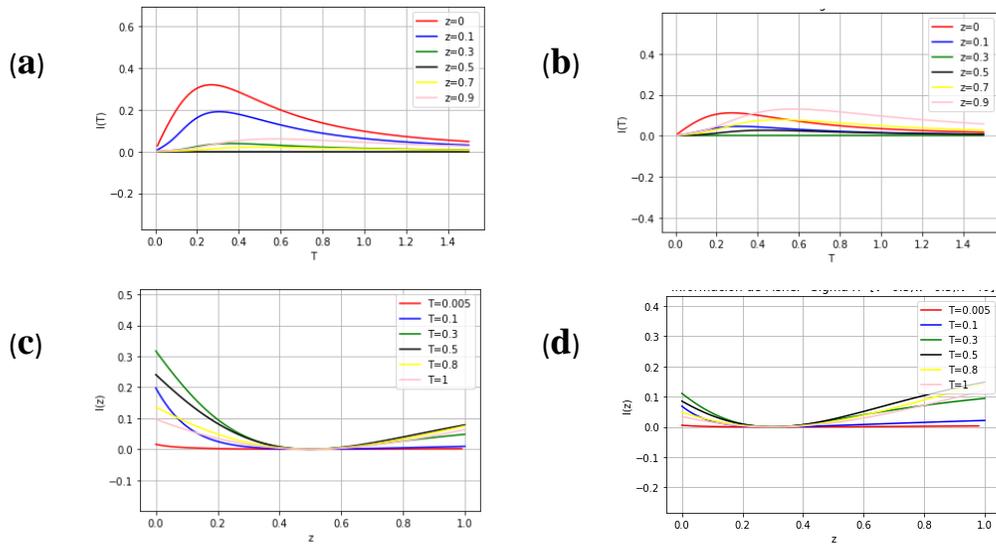


Figura 3.49. QFI optimizada en función de la temperatura con (a)  $v = 0.3, w = 0.5$  y (b)  $v = 0.5, w = 0.3$ , en función del tunelaje  $z$  con (c)  $v = 0.3, w = 0.5$  y (d)  $v = 0.5, w = 0.3$ , en todos los casos con  $N = 40$  uniceldas.

En la figura 3.49 (a), se presenta la QFI optimizada en función de la temperatura  $T$  con  $v = 0.3$  y  $w = 0.5$  (región topológica,  $v < w$ ), y se ha variado el valor del tunelaje a  $2^{do}$

vecinos  $z$ . El comportamiento que se aprecia en la figura 3.49 (a) es muy similar a la figura 3.49 (b) solo que la diferencia más importante es notar que a diferencia de la QFI optimizada para el SSH simple que no caracteriza la transición de fase topológica en  $v = w$ , la QFI optimizada para el SSH extendido si caracteriza la transición de fase topológica en el punto  $w = z$  en este caso cuando  $z = 0.5$ , es decir, detecta el cambio en el winding number  $\xi = 1 \rightarrow -1$  pero no detecta un cambio en el winding number  $\xi = 0 \rightarrow -1, 1$ . En la figura 3.49 (b), se presenta la QFI optimizada en función de la temperatura  $T$  con  $v = 0.5$  y  $w = 0.3$  (región trivial,  $v > w$ ). En este caso vemos que al ser más grande el tunelaje  $v$  la QFI optimizada en función de la temperatura  $T$  disminuye, esto debido a que la robustez topológica en la región trivial es cero, por otro lado, en este caso la transición de fase topológica se da cuando  $z = 0.3$  y vemos en este punto que la QFI optimizada se anula. En la figura 3.49 (c)-(d), representan la QFI optimizada en función del tunelaje  $z$  donde se vario la temperatura  $T$ , se fijó al tunelaje  $v = 0.3$  y  $w = 0.5$  en la figura 3.49 (c) se ve más claramente la transición de fase topológica en  $z = 0.5$  y en la figura 3.49 (d) se fijo al tunelaje  $v = 0.5$  y  $w = 0.3$ , aquí la transición de fase topológica ocurre en  $z = 0.3$ .

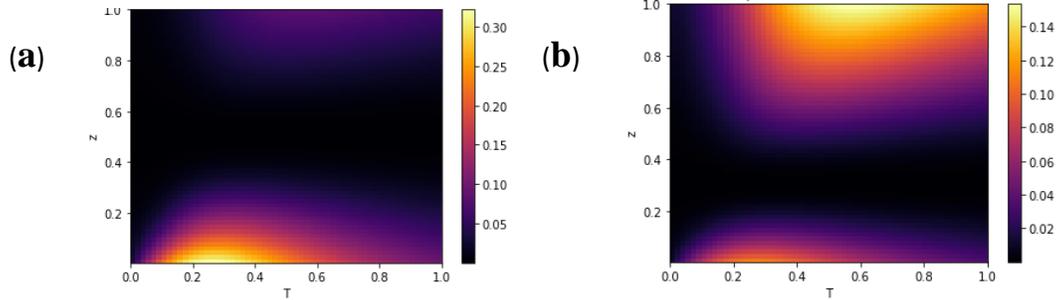


Figura 3.50. Diagramas QFI optimizada para el sistema extendido en función de la temperatura y la amplitud de tuneleo  $z$ . (a)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.3$  y (b)  $w = 0.3$ ,  $v = 0.5$ , con  $N = 40$  uniceldas.

Con lo que respecta a la QFI optimizada en el modelo SSH extendido (figura 3.50 (a)-(b)) se observa que a diferencia del modelo simple en este caso la QFI optimizada refleja la transición de fase topológica en el punto crítico  $w = z$  ya que,  $I(z = w) = 0$ . Lo que es importante resaltar es que la QFI para  $z > w$  es distinta de cero, esto confirma la idea de que independientemente de la fase geométrica acumulada  $\pi$  ( $z < w$ ) o  $-\pi$  ( $z > w$ ), existe una información cuántica que se preserva en el sistema; sin embargo, en la región trivial esta se va perdiendo gradualmente, tal que  $I(v \gg w + z) \approx 0$ . En la figura 3.50 (a), se examina el diagrama de la QFI optimizada en función del tunelaje  $z$  y la temperatura  $T$ ,

$I(z, T)$ , para una cadena  $N = 40$  celdas unitarias con  $v = 0.3$  y  $w = 0.5$ , mientras que en la figura 3.50 (b) se utilizó un  $v = 0.5$  y  $w = 0.3$ . Tenemos que mencionar que el tiempo de computo de este modelo es muy costoso y que el cálculo numérico se hizo para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias; sin embargo, al utilizar una cadena más larga obtendremos una mejor definición en la transición de fase en el punto  $w = z$ .

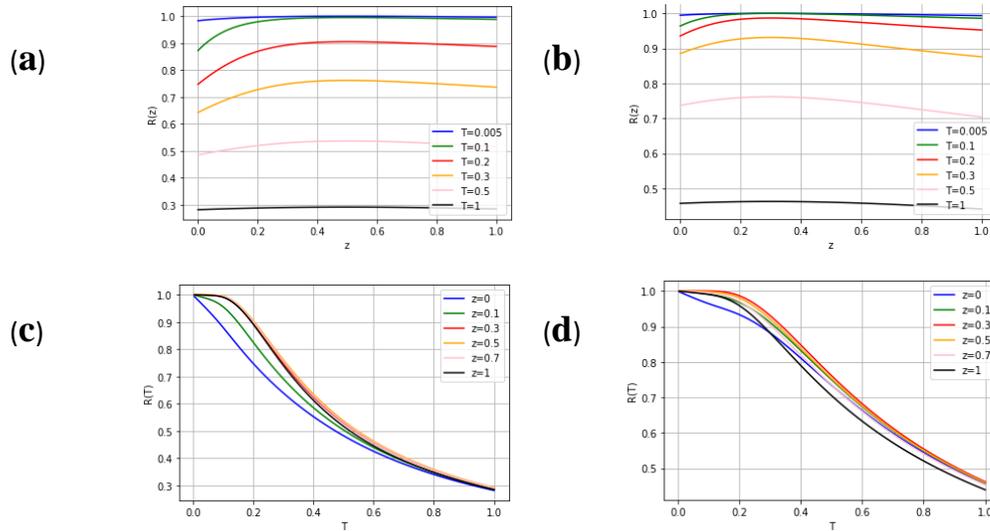


Figura 3.51. Vector de Bloch del ensamble estadístico para el sistema extendido en función del tuneo  $z$  con (a)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.3$  y (b)  $w = 0.3$ ,  $v = 0.5$ , y variando la temperatura con (c)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.3$  y (d)  $w = 0.3$ ,  $v = 0.5$ , en todos los casos con  $N = 40$  uniceldas.

En la figura 3.51 (a)-(d), se representa el vector de Bloch en función del tuneo  $z$  (figura 3.51 (a)-(b)) y de la temperatura  $T$  (figura 3.51 (c)-(d)), notemos que cuando  $T \gg 1$  el vector de Bloch  $R(z, T \gg 1) \rightarrow 0$ . Por otro lado, vemos que el vector de Bloch en función del tuneo a  $2^{do}$  vecinos  $z$  es constante para una temperatura fija (figura 3.51 (a)-(b)), sin embargo, al aumentar la temperatura el vector de Bloch tiende al punto de máximo mezclado (figura 3.51 (a)-(b)).

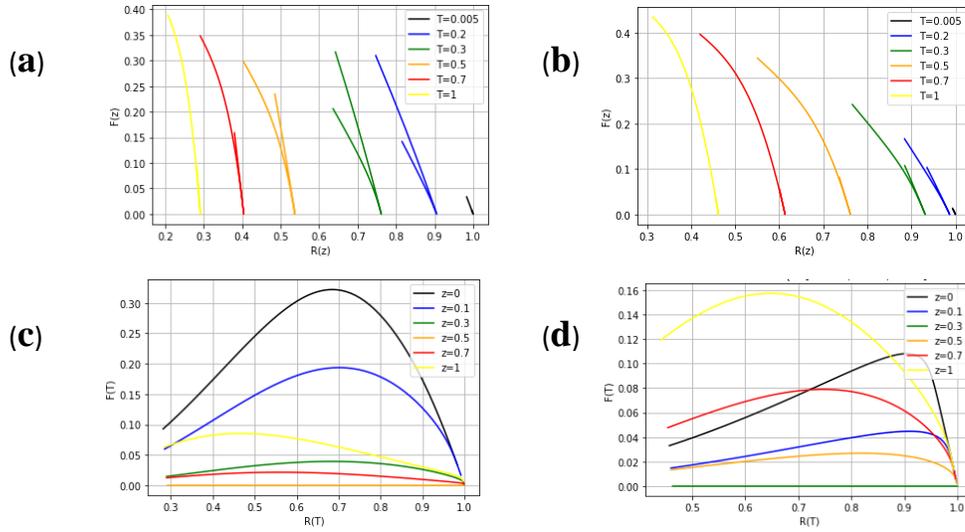


Figura 3.52. QFI optimizada vs Vector de Bloch en el sistema extendido. En función del tuneleo  $z$  con (a)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.3$  y (b)  $w = 0.3$ ,  $v = 0.5$ , en función de la temperatura con (c)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.3$  y (d)  $w = 0.3$ ,  $v = 0.5$ , para  $N = 40$  uniceldas.

Se graficó también para el modelo SSH extendido la QFI optimizada vs el vector de Bloch (figura 3.52 (a)-(d)), como se logra apreciar en la figura 3.52 (a) y 3.52 (b) donde la QFI optimizada y el vector de Bloch están en función del tuneleo  $z$  se observa el máximo alcanzado en la información cuántica no está necesariamente relacionado con un vector de Bloch igual a cero, por otro lado, al tender a una temperatura  $T$  más grande en este límite el vector de Bloch tiende a cero; sin embargo, para la QFI optimizada ésta tiene un valor cada vez más grande. Vemos entonces que la correlación entre la QFI optimizada y el vector de Bloch al aumentar la temperatura produce mayor mezcla estadística y por lo tanto,  $R(z, T \gg 1) \rightarrow 0$  y  $I(z, T \gg 1) \rightarrow I_{mezclado}$ , el vector de Bloch alcanza su máximo mezclado. Hay que notar también que las curvas de la figura 3.52 (a) tienen mayor mezclado que la de la figura 3.52 (b). Esto se debe a que en 3.52 (a)  $v < w$  y hay mayor robustez topológica la cual induce que el vector de Bloch tienda más rápidamente a cero y para 3.52 (b)  $v > w$  no hay robustez topológica ya que la fase geométrica es cero (winding number,  $\xi = 0$ ). En este caso tenemos que no habrá contribución a la QFI optimizado por parte debida al entrelazamiento y por ende de la no clasicidad del sistema. En general, la QFI optimizada es  $I(z, T) \neq I_{mezclado}(T) \otimes I_{Entrelazamiento}(z, v, w)$ , es difícil decir cuando contribuye  $I_{mezclado}$  y  $I_{Entrelazamiento}$ , debido a la correlación de la QFI optimizada.

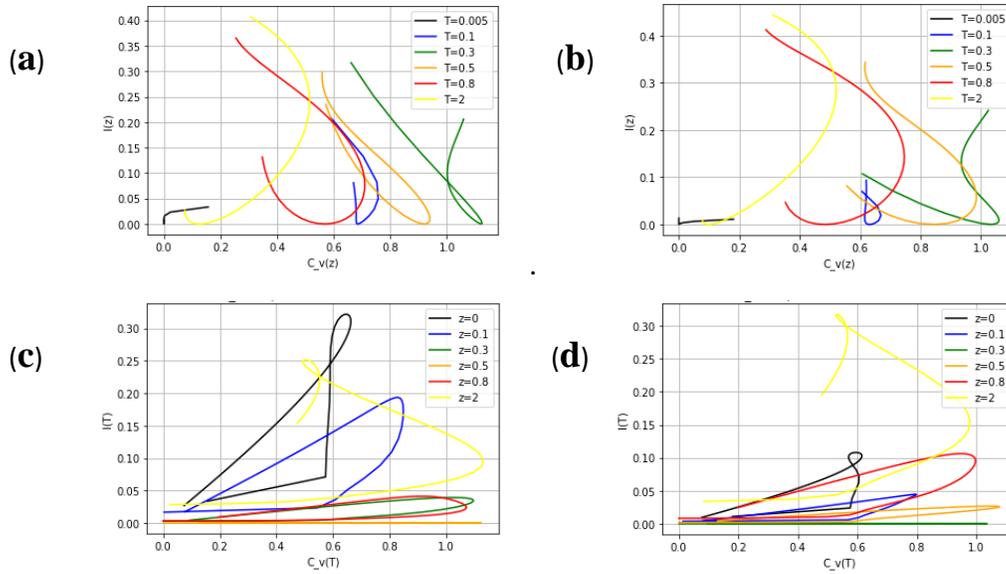


Figura 3.53. QFI optimizada vs  $C_V$  en el sistema SSH extendido, en función del tunelaje  $z$  con (a)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.3$  y (b)  $w = 0.3$ ,  $v = 0.5$ , en función de la temperatura con (c)  $w = 0.5$ ,  $v = 0.3$  y (d)  $w = 0.3$ ,  $v = 0.5$ , para  $N = 40$  uniceldas.

En la figura 3.53 (a)-(d), se graficó la QFI optimizada vs la capacidad calorífica en función del tunelaje  $z$  (figura 3.53 (a)-(b)) y en función de la temperatura (figura 3.53 (c)-(d)). En estas relaciones se observa un comportamiento un tanto complejo, sin embargo, lo que es importante analizar aquí es como aumenta o disminuye la QFI optimizada vs la capacidad calorífica. En la figura 3.53 (a)-(b), se presenta la QFI optimizada y la capacidad calorífica en función del tunelaje  $z$ , en 3.53 (a) hay más correlación cuántica que en 3.53 (b) debido a que se considera  $v < w$  (región topológica) y al mismo tiempo, sin embargo, esto no produce un efecto significativo en la capacidad calorífica  $C_V$ . En la figura 3.53 (c)-(d), se observa que al cambiar  $z$  esto afecta drásticamente el valor para la QFI optimizada, sin embargo, la capacidad calorífica  $C_V$  no presenta cambios relacionados con las transiciones de fase topológicas. Por lo tanto, podemos decir que la QFI optimizada para el modelo SSH extendido si tiene una relación con las transiciones de fase topológica y esto induce una correlación cuántica en su métrica mediada por los tunelajes y la definición del winding number, en cambio, para la capacidad calorífica  $C_V$  no hay una correlación cuántica que la vincule con la QFI optimizada y entonces su efecto en el modelo SSH será clásico dependiendo solamente de la estadística del ensamble mixto induciendo una mezcla térmica clásica en la QFI optimizada y que no aporta nada en la caracterización de la transición de fase topológica.

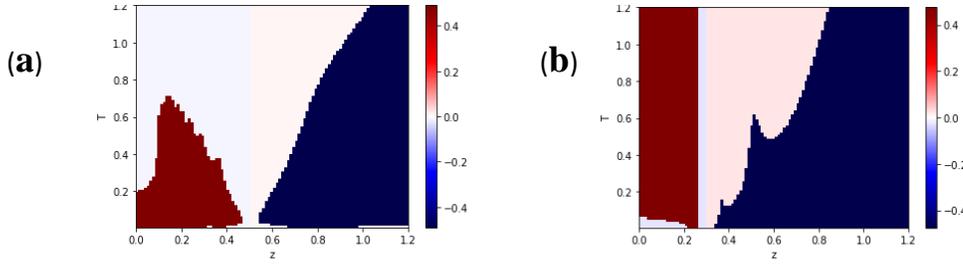


Figura 3.54. Diagrama de la polarización eléctrica en un ensemble termodinámico para el modelo SSH extendido en función de la temperatura y de la amplitud de tunelaje a segundos vecinos  $z$ . Con (a)  $w = 0.5$  y  $v = 0.3$ , (b)  $w = 0.3$  y  $v = 0.5$ , con  $N = 40$  uniceldas.

Para la polarización eléctrica del modelo SSH extendido en el ensemble térmico se estudiaron los dos casos de interés relacionados con las figuras 3.20 (a) y 3.20 (b). La figura 3.54 (a), se grafico la polarización eléctrica en función del tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z$  y se considera una  $v = 0.3$  y  $w = 0.5$  ( $w > v$ ,  $\xi = 1$ ), como se aprecia en la región  $z < w$  (winding number,  $\xi = 1$ ) en un rango de temperaturas  $T < 0.8$  se tiene una fase topológica  $\pi$ , mientras que en la región  $z > w$  (winding number,  $\xi = -1$ ) se tiene una fase topológica  $-\pi$  y en este caso la fase geométrica se preserva para  $T \geq 0.8$ , sin embargo, debido a las fluctuaciones térmicas  $P_e(z > w, T \gg 1) \approx 0$ . Hay que hacer notar que solo a bajas temperaturas  $T \sim 0$  se aprecia la transición de fase topológica en el punto crítico  $z = w$  (figura 3.54 (a)) del caso puro (figura 3.20 (a)) y a temperaturas finitas esta transición desaparece. En la figura 3.54 (b), se considera una  $v = 0.5$  y  $w = 0.3$  ( $v > w$ ,  $\xi = 0$ ), como se observa en la región  $z > 0.3$ , tenemos una fase topológica acumulada  $-\pi$  cuya robustez se pierde a temperaturas altas, mientras que en la región  $z < 0.3$  a temperaturas bajas  $T \rightarrow 0$ , tenemos una fase trivial ( $\xi = 0$ ) y a temperaturas finitas y altas se tiene siempre una fase  $\pi$  ( $\xi = 1$ ). Hay que notar que en  $T \rightarrow 0$  se recupera el caso puro (figura 3.20 (b)) y se observan las transiciones de fase topológicas  $0 \rightarrow \pi$  y  $\pi \rightarrow -\pi$ .

### 3.7.4. Modulación paramétrica adiabática $\vartheta$ en el ensemble térmico simple y extendido

De igual forma que en la sección 3.5, utilizando una modulación adiabática  $\vartheta$  se encontró la información cuántica de Fisher optimizada  $I(v(\vartheta), w(\vartheta), z(\vartheta), T)$  y el vector de Bloch  $R(v(\vartheta), w(\vartheta), z(\vartheta), T)$ .

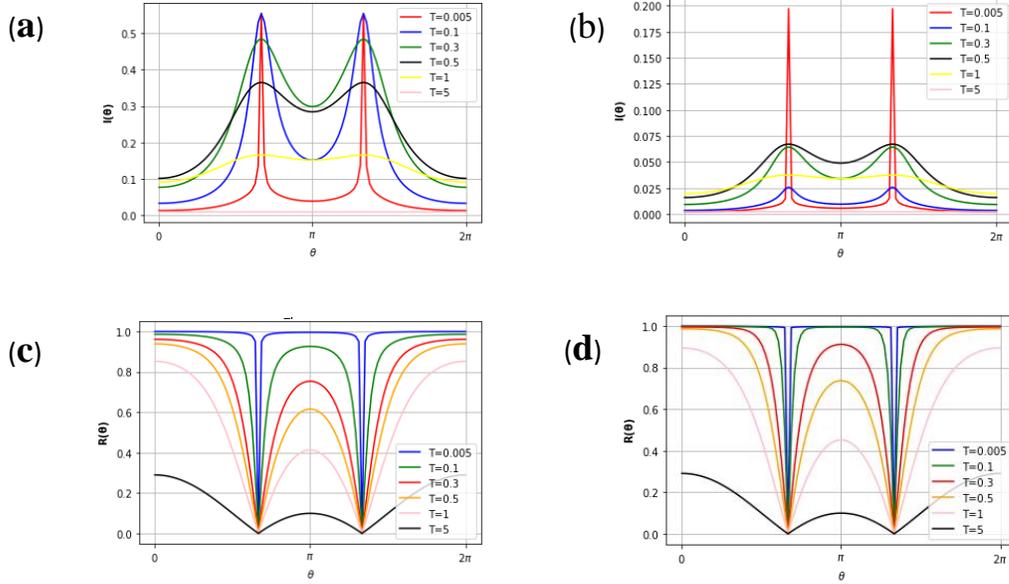


Figura 3.55. QFI modulado paramétrico  $\vartheta$  con parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w = 1$ ,  $z = 0$  y  $N = 40$  uniceldas. (a) QFI variando  $\vartheta$  con  $z = 0$  y (b) QFI variando  $\vartheta$  con  $z = 0.3$ . Vector de Bloch  $\vartheta$ , (c)  $z = 0$  y (d)  $z = 0.7$ .

En la figura 3.55 (a)-(d), se tienen dos puntos de máxima correlación cuántica y estos están asociados al caso extremo de la dimerización topológica de la cadena, en los puntos  $\vartheta_{1,2} = \cos^{-1} v_p^{-1} = \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$ . Conforme la temperatura aumenta la QFI desaparece (figura 3.55 (a)), por lo que, el efecto térmico provoca decoherencias que rompen con la no clasicidad del sistema, sin embargo, en la región  $v(\vartheta) < w(\vartheta)$  (región topológica) la QFI se mantiene más estable debido a la protección topológica del winding number (figura 3.55 (a)). En la figura 3.55 (b), se presenta el caso SSH extendido con  $z(\vartheta) = 0.7$  en este caso vemos que la magnitud de la QFI optimizada ha disminuido, esto lo adjudicamos a la definición de la QFI optimizada (Apéndice 5.14) ya que debido de que se trata de una métrica local de correlaciones cuánticas en la base del tipo de átomo y al introducir un tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z(\vartheta)$  la QFI optimizada no logra capturar parte de la información cuántica debido a este tunelaje del modelo SSH extendido. A su vez, el vector de Bloch en el ensamble térmico (figura 3.55 (c)-(d)) también presente en los mismos puntos de dimerización topológica mínimos asociados a la máxima correlación de la QFI optimizada, aunque, en este caso vemos (figura 3.55 (c)) que al agregar más temperatura al sistema el vector de Bloch siempre muestra estos puntos mínimos a diferencia de la QFI que se fueron desvaneciendo. En la figura 3.55 (d), al utilizar un tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z(\vartheta) = 0.7$  se

examina que el vector de Bloch se aleja del punto de máximo mezclado  $R(\vartheta) = 0$ , el vector de Bloch es una magnitud local del espacio de qubit o espacio del tipo de átomo en el modelo SSH, por lo que, al agregar este tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z(\vartheta)$  que es un parámetro no local, tal que  $z(\vartheta) \gg 1$  tenemos  $R(\vartheta) \rightarrow 1$ , por lo tanto el sistema se vuelve separable excepto en el punto de dimerizado topológico cuando  $v(\vartheta) = 0$ , el cual estará relacionado con un  $R(\vartheta) = 0$  y un entrelazamiento trivial  $K(v(\vartheta) = 0) = 2$ . Por lo tanto, estas dos magnitudes (figura 3.55 (a)-(d)) solo estarán bien correlacionadas en un intervalo  $v(\vartheta) < w(\vartheta)$  para una temperatura  $0 < T \leq 0.5$ .

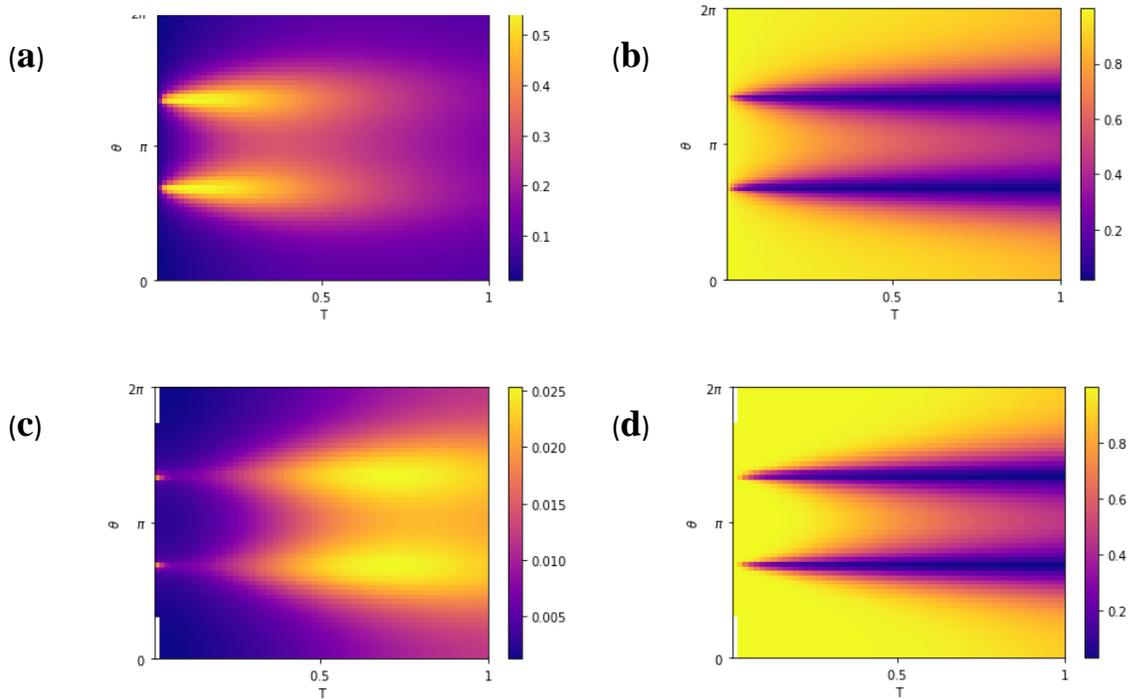


Figura 3.56. Diagram de la QFI optimizada y el Vector de Bloch en función de  $\vartheta$  y la temperatura  $T$ , con parámetros  $v_p = 0.5$ ,  $w(\vartheta) = 1$  y  $N = 40$  uniceldas. (a) QFI optimizada con  $z(\vartheta) = 0$ , (b) Vector de Bloch con  $z(\vartheta) = 0$ , (c) QFI optimizada con  $z(\vartheta) = 0.7$ , (d) Vector de Bloch con  $z(\vartheta) = 0.7$ .

En la figura 3.56 (a)-(d), se presenta el diagrama de la QFI optimizada en función del parámetro  $\vartheta$  y la temperatura  $T$ , para una cadena de  $N = 40$  celdas unitarias con  $v_p = 0.5$  y  $w(\vartheta) = 1$ . En 3.56 (a), se observa la QFI optimizada para un tunelaje  $z(\vartheta) = 0$  y a temperatura  $T \geq 0.5$  se pierde la información cuántica del sistema SSH simple. Por otro lado, al usar un tunelaje  $z(\vartheta) = 0.7$  vemos que ahora que la QFI optimizada (figura 3.56 (c)) se ha recorrido a temperatura más altas aunque su magnitud es más pequeña esta se encuentra descrita en su mayor parte por temperaturas  $T \geq 0.5$  y por debajo de  $T = 0.5$  la

QFI optimizada más relevante tiene que ver con los puntos de dimerización topológica cuando  $v(\vartheta) = 0$ . En la figura 3.56 (b)-(d), se presenta el vector de Bloch para un tunelaje  $z(\vartheta) = 0$  (figura 3.56 (b)) y para un tunelaje  $z(\vartheta) = 0.7$  (figura 3.56 (d)) donde se aprecia que no hay tanto cambio en el vector de Bloch salvo que con un tunelaje a  $2^{do}$  vecinos  $z(\vartheta) \neq 0$  se define mejor la región en donde  $R(\vartheta) = 0$ . Con lo que respecta, a la QFI optimizada en el modelo SSH extendió el efecto de la temperatura no hace que se pierda tanta información cuántica como en el modelo SSH simple.

## IV. Conclusiones y trabajo futuro

El aislante topológico presentó mayor grado de entrelazamiento en la región no trivial debido a la presencia de la fase geométrica acumulada. Más aún, el número de Schmidt parece ser un indicador de la transición de fase topológica ya que  $K(v = w) = 2$ . Al agregar un tunelaje a  $2^{\text{do}}$  vecinos “ $z$ ” se produjo un mayor grado de entrelazamiento en la región topológica, tal que,  $K(v < w + z) \rightarrow 2$ , y se caracterizaron las transiciones de fase topológicas  $K(v = w + z) = 2$  y  $K(w = z) = 1$ . Los estados encontrados con un número de Schmidt máximo  $K = 2$  correspondieron a estados tipo Bell. La diferencia entre las transiciones de fase topología fue que, en  $v = w + z$  surgían estados tipo Bell y en  $w = z$  el sistema se volvía separable.

En el ensamble térmico el efecto de la temperatura sobre el aislante topológico generó fluctuaciones térmicas en la información, provocando que la QFI optimizada se fuera perdiendo gradualmente; sin embargo, debido a que el winding number  $\xi \neq 0$  en la región topológica se tuvo una protección de las correlaciones cuánticas hasta una temperatura  $T$ . La QFI optimizada no fue un indicador de la transición de fase geométrica trivial-topológica ( $\xi = 0 \rightarrow 1$ ), pero al introducir un tunelaje a  $2^{\text{do}}$  vecinos “ $z$ ” la QFI optimizada sí caracterizó la transición de fase geométrica topológica-topológica ( $\xi = \pm 1 \rightarrow \mp 1$ ). Por otro lado, se determinó que existe una QFI optimizada para las fases geométricas  $\pi$  y  $-\pi$ , mientras que, para la fase 0 ésta tiende a desaparecer. Se encontró que la capacidad calorífica no es una medida de la no clasicidad ya que no se vincula con la QFI optimizada. Con respecto a la polarización eléctrica, se obtuvo un comportamiento disipativo en función de la temperatura  $T$  para el modelo SSH simple y extendido, a una  $T \neq 0$  la polarización eléctrica no determinó la transición de fase topológica a menos de que  $T \rightarrow 0$ .

El estudio de estos materiales topológicos es un campo de conocimientos que se encuentra en desarrollo y quedan aún muchas preguntas de interés sin responder. Dentro de las posibles continuaciones naturales del presente trabajo de investigación se propone el estudio de sistemas PT no hermitianos ya que poseen una variedad topológica más general. Otra línea de investigación sería el estudio de estos sistemas topológicos desde una perspectiva de muchos cuerpos así como sus efectos de acoplamiento luz/materia y fonones.

## Apéndice

### A.1. Postulados de la mecánica cuántica

**Primer postulado:** A cada instante el estado de un sistema físico está representado por un ket  $|\psi\rangle$  en el espacio de Hilbert.

Este postulado implica que una superposición de dos estados es también un estado del sistema. Si  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  son posibles estados del sistema, entonces  $|\psi\rangle = a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle$  también lo es, con  $a_1$  y  $a_2$  números complejos.

**Segundo postulado:** Cada observable atribuida a un sistema físico es descrita por un operador que actúa sobre el ket que describe al sistema.

Por regla general, un operador  $\hat{\mathcal{A}}$  actúa sobre el lado derecho del ket  $|\psi\rangle$ , en la forma  $\hat{\mathcal{A}} : |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{\mathcal{A}}|\psi\rangle$ .

**Tercer postulado:** Existe un solo posible resultado de medir a la observable  $\hat{\mathcal{A}}$  y corresponde a uno de los eigenvalores del operador  $\hat{\mathcal{A}}$ .

Por esta razón, decimos que los operadores tienen un espectro discreto cuyos valores son ortogonales entre sí, de aquí el carácter “cuántico”.

**Cuarto postulado:** La probabilidad de obtener un eigenvalor  $a_n$  en una medición de la observable  $\hat{\mathcal{A}}$ , está dada por la potencia cuadrada del valor absoluto del producto interior del estado general  $|\psi\rangle$  con el eigenestado  $|a_n\rangle$ , entonces tenemos,  $p(a_n) = |\langle a_n|\psi\rangle|^2$ .

Ya que, cualquier estado  $|\psi\rangle$  puede expandirse como una superposición de los eigenestados de un operador  $\hat{\mathcal{A}}$  en la forma,  $|\psi\rangle = \sum_n a_n |a_n\rangle$ , donde los eigenestados de esta expansión cumplen la regla de ortogonalidad  $\langle a_n|a_m\rangle = \delta_{mn}$ .

**Quinto postulado:** Inmediatamente después de realizar una medición de un operador  $\hat{\mathcal{A}}$  este nos da un valor  $a_n$  y entonces el estado del sistema se encuentra en un nuevo eigenestado normalizado  $|a_n\rangle$ . Por lo tanto, el colapso de la función de onda preserva su normalización.

**Sexto postulado:** La evolución temporal de la función de onda preserva la normalización del ket  $|\psi\rangle$ . La evolución temporal del estado del sistema cuántico es descrita por algún operador unitario,  $\hat{U}$ , de manera que,  $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$ .

## A.2. Matriz de densidad

La matriz densidad es un operador que describe el espacio cuántico general y se encuentra en el espacio proyectivo de Hilbert  $\wp(\mathcal{H})$ , tal que, se realiza un mapeo del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  compuesto por kets  $|\psi\rangle$  a un espacio de proyectores de densidad  $\hat{\rho}$ .

**Estados puros.** Para estados puros, considerando un ket  $|\psi\rangle$  se escribe la matriz de densidad sin pérdida de generalidad como,

$$\rho := |\psi\rangle\langle\psi| \quad (\text{A.2.1})$$

Este también se llama operador densidad para un estado puro o simplemente matriz densidad. Para estados puros el operador densidad cumple con las propiedades,

(i)  $\langle\varphi|\rho|\varphi\rangle \geq 0$ ,  $\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_d$ , lo cual también implica que  $\rho$  es Hermitiano,  $\rho = \rho^\dagger$ .

(ii)  $Tr(\rho) = 1$ , ya que el ket  $|\psi\rangle$  se encuentra normalizado.

(iii)  $\rho^2 = \rho$ , o sea que la matriz densidad es un operador idempotente.

Estas tres propiedades en conjunto garantizan que el operador  $\rho$  tenga una descomposición espectral (A.2.1). Para un estado puro, la propiedad (iii) es análoga a,

$$(iii^*) Tr(\rho^2) = 1$$

Una medición selectiva hecha sobre una observable  $A$  con un resultado  $a_n$  y un operador proyectivo asociado  $P_n$ , hace que la matriz densidad cambie en la forma,

$$\rho \rightarrow \rho'_n = \frac{1}{p(a_n)} P_n \rho P_n \quad (\text{A.2.2})$$

con  $p(a_n) = Tr(P_n \rho)$  la probabilidad de obtener  $a_n$  en la medición. Podemos también, obtener el valor esperado  $\langle A \rangle$  de una observable, aplicando un operador identidad formado por la base ortonormal  $\{|u_i\rangle\}$ ,

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \sum_{i,j=1}^d \langle \psi | u_j \rangle \langle u_j | A | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle = \sum_{i,j=1}^d \langle u_j | \rho | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \\
&= \sum_{j=1}^d \langle u_j | \rho A | u_j \rangle = \text{Tr}(\rho A)
\end{aligned} \tag{A.2.3}$$

**Estados mixtos.** En esta clase de estados cuánticos se tiene un ensamble  $\{|\psi_i\rangle, p_i\}$  donde existe una mezcla de probabilidades  $p_i$  para cada estado puro  $|\psi_i\rangle$ . En este caso, se deben cumplir las mismas propiedades que en el caso puro y además se incluye la propiedad de normalización de probabilidades  $\sum_{i=1}^N p_i = 1$ . Un operador densidad de una mezcla estadística, se puede expresar en su descomposición espectral como,

$$\rho := \sum_{i=1}^N p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_{i=1}^N p_i \rho_i \tag{A.2.4}$$

Análogamente, en una medición de una observable  $A$ , la probabilidad de obtener un valor  $a_n$  está dado por,

$$p(a_n) = p(a_n|i)p_i \tag{A.2.5}$$

donde  $p(a_n|i)$  representa la probabilidad condicional de obtener  $a_n$  en el estado  $\rho_i$  y la cual se representa de la manera,

$$p(a_n|i) = \text{Tr}(P_n \rho_i) \tag{A.2.6}$$

En un ensamble mixto tenemos que el valor esperado de una observable se puede calcular de la forma,

$$\langle A \rangle = \sum_i^N p_i \text{Tr}(A \rho_i) = \text{Tr}(A \rho) \tag{A.2.7}$$

En una medida selectiva sobre la matriz densidad del ensamble esta se transforma en,

$$\rho \rightarrow \rho'_n = \frac{1}{p(a_n)} P_n \rho P_n, \quad \text{Tr}(\rho'_n) = 1 \tag{A.2.8}$$

Por otra parte, en una medida no selectiva de una observable  $A$  se puede repetir la medición sobre el mismo estado cuántico, en este caso la medición resultante arroja otro ensamble y el sistema no se colapsa. De tal manera que,

$$\rho \rightarrow \rho'_{n.s} = \sum_n p(a_n) \frac{P_n \rho P_n}{Tr(\rho P_n)} = \sum_n P_n \rho P_n, \quad Tr(\rho'_{n.s}) = 1 \quad (\text{A.2.9})$$

### A.3. Schmidt

**Descomposición de Schmidt.** La descomposición polar o bi-ortonormal de un estado puro  $|\psi^{AB}\rangle$ , también conocida como descomposición de Schmidt, es muy útil para estudiar el entrelazamiento en un sistema bipartito. Esta descomposición establece que un estado puro normalizado  $|\psi^{ext,int}\rangle$  de un sistema compuesto  $S^{ext,int}$  en el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}^{ext,int} = \mathcal{H}^{ext} \otimes \mathcal{H}^{int}$  con dimensiones  $dim\{\mathcal{H}^{ext}\} = d_{ext}$  y  $dim\{\mathcal{H}^{int}\} = d_{int}$ , y donde se expresa a la matriz densidad como  $\rho^{ext,int} = |\psi^{ext,int}\rangle\langle\psi^{ext,int}|$ , tal que  $\rho^{ext} = Tr_{int}(\rho^{ext,int})$  y  $\rho^{int} = Tr_{ext}(\rho^{ext,int})$  son las matrices densidad reducidas en los subsistemas  $S^{ext}$  o  $S^{int}$ , entonces se establece que,

(i) Un estado puro normalizado  $|\psi^{ext,int}\rangle$  en su descomposición de Schmidt se escribe de la forma,

$$|\psi^{ext,int}\rangle = \sum_{i=1}^k \sqrt{p_i} |u_i^{ext}\rangle \otimes |w_i^{int}\rangle \quad (\text{A.3.1})$$

con  $k \leq dim\{min(ext, int)\}$ , donde  $|u_i^{ext}\rangle$  y  $|w_i^{int}\rangle$  son los eigenestados de los espacios reducidos  $\mathcal{H}^{ext}$  y  $\mathcal{H}^{int}$ , respectivamente. Donde  $\lambda_i = \sqrt{p_i}$  son llamados los coeficientes de Schmidt y cumplen la identidad de normalización  $\sum_i^k \lambda_i^2 = 1$  y  $\lambda_i \geq 0$ .

(ii)  $\rho^{ext}$  y  $\rho^{int}$  comparten los mismos eigenvalores positivos definidos  $p_i$ .

**Demostramos (i).** Partiendo de un estado  $|\psi^{ext,int}\rangle = \sum_{i,j} C_{ij} |i^{ext}\rangle \otimes |j^{int}\rangle$ , donde la matriz  $C = (C_{ij}) = \sum_k a_k |u_k\rangle\langle v_k|$  cuyos elementos de matriz son de la forma,  $C_{ij} = \langle i|C|j\rangle = \sum_k a_k \langle i|u_k\rangle\langle v_k|j\rangle$ , si se sustituye esta última relación en el estado inicial  $|\psi^{AB}\rangle$ , se obtiene entonces,

$$|\psi^{ext,int}\rangle = \sum_{i,j} C_{ij} |i^{ext}\rangle \otimes |j^{int}\rangle = \sum_k a_k (\sum_i \langle i|u_k\rangle |i^{ext}\rangle) \otimes (\sum_j \langle v_k|j\rangle |j^{int}\rangle) \quad (\text{A.3.2})$$

Se definen los nuevos estados  $|u_k^{ext}\rangle = \langle i|u_k\rangle|i^{ext}\rangle$  y  $|v_k^{int}\rangle = \langle i|v_k\rangle|i^{int}\rangle$ , donde se observa que se cumple la regla de ortonormalidad  $\langle i|u_k\rangle = \delta_{ik}$  y  $\langle j|v_k\rangle = \delta_{jk}$ . Reexpresando la última ecuación se tiene,

$$|\psi^{ext,int}\rangle = \sum_k a_k |u_k^{ext}\rangle \otimes |v_k^{int}\rangle \quad (\text{A.3.3})$$

Como se observa A.3.3 es igual a A.3.1, por lo tanto, se concluye que un estado bipartito inicial  $|\psi^{ext,int}\rangle$  que cumple con los criterios expuestos se puede llevar a su descomposición de Schmidt.

Con respecto al criterio (**ii**) se observa que un estado en la descomposición de Schmidt (A.3.1) tiene matrices densidades reducidas,

$$\rho^{ext} = \sum_i |\lambda_i|^2 |u_i^{ext}\rangle \langle u_i^{ext}|, \quad \rho^{int} = \sum_i |\lambda_i|^2 |v_i^{int}\rangle \langle v_i^{int}| \quad (\text{A.3.4})$$

ambas matrices reducidas tienen el mismo espectro de eigenvalores y entonces tienen la misma información intrínseca global. Por lo tanto, el subespacio que se elija para medir el grado de entrelazamiento es invariante.

**Numero de Schmidt.** El rango o número de Schmidt es una métrica que determina el grado de entrelazamiento en un sistema bipartito y se define como,

$$K = \frac{1}{\sum_k \lambda_k^2} = \frac{1}{Tr(\rho_r^2)} \quad (\text{A.3.5})$$

Donde  $\rho_r$  representa la matriz densidad reducida en uno de los subespacios  $A$  o  $B$ , que como ya se menciona puede ser cualquiera de los dos. A grandes rasgos cuando el número de Schmidt sea  $K = 1$  estamos hablando de un sistema separable y no entrelazado, en caso contrario cuando  $K > 1$ , hay entrelazamiento cuántico en el sistema y está acotado hasta un valor  $K \leq \dim\{\min\{ext, int\}\}$  y es proporcional al número de los coeficientes de Schmidt.

Si se considera que la matriz reducida es la correspondiente a un sistema qubit,  $\rho_r = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma})$ , se tiene la relación,

$$\rho_r^2 = \frac{1}{4}(\mathbb{I} + 2 \sum_{\mu} r_{\mu} \sigma_{\mu} + \sum_{\mu, \nu} r_{\mu} r_{\nu} \sigma_{\mu} \sigma_{\nu}) = \frac{1}{4}(\mathbb{I} + 2 \sum_{\mu} r_{\mu}^2 \sigma_{\mu}^2 + \sum_{\mu, \nu} r_{\mu}^2 r_{\nu}^2 \delta_{\mu\nu}) \quad (\text{A.3.6})$$

Y sacando la traza se obtiene la expresión,

$$\text{Tr}(\rho_r^2) = \frac{1}{2}(1 + |\vec{r}|^2) \quad (\text{A.3.7})$$

Por esta razón es que en un sistema qubit, el número de Schmidt se escribe en términos del vector de Bloch como,

$$K = \frac{2}{1+|\vec{r}|^2} \quad (\text{A.3.8})$$

En un sistema de qubit el espacio de Hilbert  $\mathcal{H}_2$  tiene dimensión  $d = 2$ , por ende, el número de Schmidt será,  $1 \leq K \leq 2$ , con  $K = 1$  no entrelazado y  $K = 2$  máximamente entrelazado.

#### A.4. Ensamble Térmico

Un ensamble térmico o colectividad canónica, es un sistema compuesto de un conjunto de todos los posibles estados que comparten intercambio de energía térmica pero su volumen y número de partículas se mantiene constante. En equilibrio térmico todos los microestados accesibles del sistema son igualmente probables y se puede considerar al sistema completo como un gran baño térmico a temperatura constante (McQuarrie, 1976). La probabilidad de que el sistema se encuentre a una temperatura  $T$  con energía  $E_i$  queda determinada por el factor de Boltzmann como,

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\mathbb{Z}} \quad (\text{A.4.1})$$

En donde  $\mathbb{Z} = \sum_j e^{-\beta E_j}$ , es la función de equipartición canónica y es el factor de normalización de la distribución de probabilidad (A.4.1), y el factor  $\beta = \frac{1}{kT}$  con  $k \approx 1.3806 \times 10^{-23} \frac{J}{K}$ , la constante de Boltzmann. Se puede calcular también la energía promedio del ensamble como,

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathbb{Z} \quad (\text{A.4.2})$$

A su vez se calcula la fluctuación de la energía como,

$$Var(E) = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{\mathbb{Z}} \frac{\partial^2 \mathbb{Z}}{\partial \beta^2} - \frac{1}{\mathbb{Z}^2} \left( \frac{\partial \mathbb{Z}}{\partial \beta} \right)^2 \quad (\text{A.4.3})$$

Simplificando,

$$Var(E) = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \mathbb{Z} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial T} \langle E \rangle \frac{\partial T}{\partial \beta} = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \langle E \rangle \quad (\text{A.4.4})$$

Y donde se identifica a la capacidad calorífica  $C_v = \frac{\partial}{\partial T} \langle E \rangle$ , por lo tanto, despejándola se encuentra en términos de la fluctuación de la energía como,

$$C_v = \frac{Var(E)}{kT^2} \quad (\text{A.4.5})$$

Ambas son proporcionales por un factor  $T^2$ .

La expresión para la entropía,  $S = \frac{\delta Q}{T}$ , donde la transferencia de calor  $\delta Q = C_v dT$ , de acuerdo, a las relaciones previas se despeja a la entropía como,

$$S = k(\ln \mathbb{Z} + \beta \langle E \rangle) \quad (\text{A.4.6})$$

O bien, a partir de la distribución de probabilidad A.4.1 se despeja A.4.6 en términos de las probabilidades,

$$S = -k \sum_j P_j \ln P_j \quad (\text{A.4.7})$$

Esta última expresión es usada con mayor frecuencia en teoría de la información cuántica, siendo la versión clásica de la entropía de Von Neumann o bien entropía de Shannon.

## A.5. Información Cuántica de Fisher

A partir de la información clásica de Fisher y haciendo algunas generalizaciones al régimen cuántico se obtiene una expresión para la información cuántica de Fisher en su descomposición espectral de la matriz densidad. Considerando la información clásica de Fisher (Ly et al., 2017),

$$I_F(p_\theta) = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta \right)^2 p_\theta dx \quad (\text{A.5.1})$$

En donde  $p_\theta$  son las probabilidades de los estados presentes en la matriz densidad  $\rho_\theta$  parametrizados por  $\theta$ , donde  $\{\rho_\theta : \theta \in \mathbb{R}\}$ . Se hace una generalización con un ajuste de estimación cuántica (Liu et al., 2020), de tal manera que, de acuerdo a la relación simétrica,

$$\frac{\partial}{\partial \theta} p_\theta = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta \cdot p_\theta + p_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta \right) \quad (\text{A.5.2})$$

se reemplaza la integral en A.5.1 por la traza,  $p_\theta$  por  $\rho_\theta$ , y la derivada logarítmica  $\frac{\partial}{\partial \theta} \log p_\theta$  por la derivada simétrica logarítmica  $L_\theta$  la cual cumple,

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \rho_\theta = \frac{1}{2} (L_\theta \rho_\theta + \rho_\theta L_\theta) \quad (\text{A.5.3})$$

Se llega a una expresión para la información cuántica de Fisher a través del operador  $L_\theta$  en la forma,

$$I_F(\rho_\theta) = \frac{1}{4} \text{Tr}(L_\theta^2 \rho_\theta) \quad (\text{A.5.4})$$

Sin embargo, aunque esta última expresión es la más general aún se encuentra muy abstracta, por esta razón se suele hacer algunas consideraciones. En particular, cuando es independiente del parámetro  $\theta$ ,  $\rho_\theta = e^{-i\theta H} \rho e^{-i\theta H}$ , esto implica que  $I_F(\rho_\theta) = I_F(\rho, H) = \frac{1}{4} \text{Tr}(\rho L^2)$ , tal que el operador  $\rho_\theta$  cumple con la ecuación de Von Neumann-Landau,  $i \frac{\partial \rho_\theta}{\partial \theta} = [H \rho_\theta - \rho_\theta H]$ , entonces,  $i[\rho_\theta H - H \rho_\theta] = \frac{1}{2} (L_\theta \rho_\theta + \rho_\theta L_\theta)$  con  $\theta \in \mathbb{R}$ , lo cual también puede ser expresado de acuerdo a lo anterior como,  $i \frac{\partial \rho}{\partial \theta} = [H \rho - \rho H]$  y análogamente resulta en,

$$i[\rho H - H \rho] = \frac{1}{2} (L \rho + \rho L) \quad (\text{A.5.5})$$

Suponiendo que  $\rho$  es no degenerado y tiene una descomposición espectral en la forma,

$$\rho = \sum_m \lambda_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| \quad (\text{A.5.6})$$

Donde  $\{\lambda_m\}$  son los eigenvalores definidos positivos  $\lambda_m \geq 0$  y  $\{|\phi_m\rangle\}$  son los eigenvectores correspondientes, los cuales, forman una base ortogonal entre sí. Ya que,  $i[\rho H - H \rho] = \frac{1}{2} (L \rho + \rho L)$ , proyectando los eigenestados  $m$  y  $n$ , entonces,

$$\langle \phi_m | i\rho H - iH\rho | \phi_n \rangle = \frac{1}{2} \langle \phi_m | L\rho + \rho L | \phi_n \rangle \quad (\text{A.5.7})$$

De forma que,

$$i(\lambda_m - \lambda_n) \langle \phi_m | H | \phi_n \rangle = \frac{\lambda_m + \lambda_n}{2} \langle \phi_m | L | \phi_n \rangle \quad (\text{A.5.8})$$

Por otro lado, la información cuántica de Fisher es expresada como,

$$I_F(\rho, H) = \frac{1}{4} \text{Tr}(\rho L^2) \quad (\text{A.5.9})$$

y desarrollando la traza mediante su descomposición espectral,

$$\frac{1}{4} \text{Tr}(\rho L^2) = \frac{1}{4} \sum_m \langle \phi_m | \rho L^2 | \phi_m \rangle = \frac{1}{4} \sum_{m,n} \lambda_n \langle \phi_m | L | \phi_n \rangle \langle \phi_n | L | \phi_m \rangle \quad (\text{A.5.10})$$

se encuentra,

$$I_F(\rho, H) = \frac{1}{4} \sum_{m,n} \lambda_n |\langle \phi_m | L | \phi_n \rangle|^2 \quad (\text{A.5.11})$$

o bien, se reexpresa convenientemente en la forma,

$$I_F(\rho, H) = \frac{1}{8} \sum_{m,n} (\lambda_n + \lambda_m) |\langle \phi_m | L | \phi_n \rangle|^2 \quad (\text{A.5.12})$$

de tal manera, que se aprecia una relación con A.5.8, entonces despejando,

$$\langle \phi_m | L | \phi_n \rangle = \frac{2i}{\lambda_m + \lambda_n} (\lambda_m - \lambda_n) \langle \phi_m | H | \phi_n \rangle \quad (\text{A.5.13})$$

y sustituyendo A.5.13 en A.5.12, se llega a la expresión,

$$I_F(\rho, H) = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \frac{(\lambda_n - \lambda_m)^2}{(\lambda_n + \lambda_m)} |\langle \phi_m | H | \phi_n \rangle|^2 \quad (\text{A.5.14})$$

esta expresión de la información cuántica de Fisher es más explícita y práctica, la única condición impuesta es que la matriz de densidad sea independiente del parámetro  $\theta$  y tenga una descomposición espectral.

## A.6. Aproximación de amarre fuerte: SSH

Un modelo más preciso del poliacetileno incluye el efecto de alternar enlaces sencillos y dobles de carbono-carbono sobre la cadena del polímero. Debido a que los enlaces dobles tienen ligeramente una mayor densidad electrónica que los enlaces simples, estos son sutilmente más cortos. Entonces, la alternancia de enlaces sencillos-dobles establece una deformación estática con el doble de periodo,  $2a_0$ , en relación con el modelo de enlaces simples para el poliacetileno. La densidad de carga periódica formada por esta deformación es conocida como la “densidad de carga de la onda”.

El vector primitivo de la red es,  $\vec{a}_1 = 2a_0\hat{x}$ , y ahora cada celda unitaria de la cadena tiene dos átomos de carbono, entonces, sea la función de onda de la  $j$ th celda unitaria,

$$|\phi_j\rangle = C_1|\phi_{1,j}\rangle + C_2|\phi_{2,j}\rangle \quad (\text{A.6.1})$$

donde  $|\phi_{1,j}\rangle$  y  $|\phi_{2,j}\rangle$ , son los orbitales atómicos del primer y segundo átomo de carbono en la  $j$ th celda unitaria, respectivamente.

Definimos a las dos integrales de hoppings o “amplitudes de tuneleo”. Para los enlaces sencillos tenemos,

$$\beta_S = v = \langle\phi_{1,j}|H|\phi_{2,j}\rangle \quad (\text{A.6.2})$$

y para los enlaces dobles,

$$\beta_D = w = \langle\phi_{1,j-1}|H|\phi_{2,j}\rangle \quad (\text{A.6.3})$$

además, definimos los potenciales de sitio como,

$$\alpha = \langle\phi_{1,j}|H|\phi_{1,j}\rangle = \langle\phi_{2,j}|H|\phi_{2,j}\rangle \quad (\text{A.6.4})$$

De acuerdo a la aproximación de amarre fuerte, podemos expandir a la función de onda como una combinación lineal de orbitales atómicos como,

$$|\psi(x)\rangle = \sum_j e^{i2\pi\frac{n}{aN}j} |\phi(x - 2a_0j)\rangle \quad (\text{A.6.5})$$

Donde notemos que el espacio entre celdas unitarias es  $2a_0$  y  $k_j = \frac{2\pi}{2a_0N}j$ .

Entonces, tenemos las dos ecuaciones acopladas,

$$\langle \phi_{1,j} | H | \psi \rangle = \varepsilon \langle \phi_{1,j} | \psi \rangle \quad (\text{A.6.6})$$

$$\langle \phi_{2,j} | H | \psi \rangle = \varepsilon \langle \phi_{2,j} | \psi \rangle \quad (\text{A.6.7})$$

Sustituyendo (A.6.5) en (A.6.6) y (A.6.7), expandiendo el lado izquierdo de las ecuaciones tenemos,

$$\langle \phi_{1,j} | H | \psi \rangle = \left[ C_2 v + C_1 \alpha + C_2 w e^{-i \frac{2\pi n}{2a_0 N}} \right] e^{i \frac{2\pi}{2a_0 N} j} \quad (\text{A.6.8})$$

$$\langle \phi_{2,j} | H | \psi \rangle = \left[ C_1 v + C_2 \alpha + C_1 w e^{i \frac{2\pi n}{2a_0 N}} \right] e^{i \frac{2\pi}{2a_0 N} j} \quad (\text{A.6.9})$$

mientras que el lado derecho lo expandimos como,

$$\varepsilon \langle \phi_{1,j} | \psi \rangle = \varepsilon C_1 e^{i \frac{2\pi}{2a_0 N} j} \quad (\text{A.6.10})$$

$$\varepsilon \langle \phi_{2,j} | \psi \rangle = \varepsilon C_2 e^{i \frac{2\pi}{2a_0 N} j} \quad (\text{A.6.11})$$

Sustituimos estas ecuaciones en (A.6.6) y (A.6.7), obtenemos entonces,

$$C_2 \left( v + w e^{-i \frac{2\pi n}{2a_0 N}} \right) + C_1 \alpha = \varepsilon C_1 \quad (\text{A.6.12})$$

y

$$C_1 \left( v + w e^{i \frac{2\pi n}{2a_0 N}} \right) + C_2 \alpha = \varepsilon C_2 \quad (\text{A.6.13})$$

La solución no trivial para la  $C_1$  y  $C_2$  es,

$$\begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & v + w e^{-i \frac{2\pi n}{2a_0 N}} \\ v + w e^{i \frac{2\pi n}{2a_0 N}} & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{A.6.14})$$

donde,  $k \equiv k_n = \frac{2\pi n}{2a_0 N}$ , por lo tanto,

$$\varepsilon_k^\pm = \alpha \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k} \quad (\text{A.6.15})$$

(A.6.15) es la dispersión de energías, hacemos  $\alpha = 0$ , tenemos por lo tanto entonces que,  $\varepsilon_k^\pm = \pm\sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k} = |v + we^{ik}|$ , es la dispersión de energías para el modelo SSH de la figura 3.4 en el espacio  $k$ , cuya matriz Hamiltoniana la identificamos de (A.6.14) como,

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6.16})$$

De acuerdo a la relación,  $H_{SSH} = \sum_k \psi_k^\dagger H_k \psi_k$ , con  $\psi_k = (a_k, b_k)^T$ , podemos transformar el Hamiltoniano del espacio  $k$  al Hamiltoniano real (3.1), mediante las transformadas de Bloch inversas (3.4),

$$|k, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-ikma} |m, \alpha\rangle \quad (\text{A.6.17})$$

donde  $\alpha \in \{A, B\}$  es la etiqueta de la posición atómica. Si sustituimos convenientemente en la relación del Hamiltoniano real tenemos,

$$H_{SSH} = \sum_k \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}^\dagger H_k \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \sum_k \{ [v + we^{-ik}] a_k^\dagger b_k + [v + we^{-ik}] b_k^\dagger a_k \} \quad (\text{A.6.18})$$

y bien, con un poco de algebra e insertando la transformada de Fourier en (A.6.18) se llega a la relación,

$$\begin{aligned} H_{SSH} &= \frac{v}{N} \sum_k \sum_m^N \{ e^{ikm} C_{m,A}^\dagger e^{-ikm} C_{m,B} + h.c. \} \\ &+ \frac{w}{N} \sum_k \sum_m^N \{ e^{ik(m+1)} C_{m,A}^\dagger e^{-ikm} C_{m,B} + h.c. \} \end{aligned} \quad (\text{A.6.19})$$

simplificando,

$$H_{SSH} = v \sum_m^N \{ C_{m,A}^\dagger C_{m,B} + h.c. \} + w \sum_m^N \{ C_{m+1,A}^\dagger C_{m,B} + h.c. \} \quad (\text{A.6.20})$$

Donde  $C_{m,\alpha}$  y  $C_{m,\alpha}^\dagger$ , son los operadores de creación y destrucción fermionicos, sobre la celda unitaria  $m$  de la posición atómica  $\alpha \in \{A, B\}$ . (A.6.20) también suele escribirse en la forma,

$$H_{SSH} = v \sum_m^N \{ |m, A\rangle \langle m, B| + h.c. \} + w \sum_m^N \{ |m+1, A\rangle \langle m, B| + h.c. \} \quad (\text{A.6.21})$$

Hemos llegado entonces al Hamiltoniano del espacio real (3.1) de nuestro modelo SSH a partir de la aproximación de amarre fuerte en donde suponemos a la función de onda como una superposición de estados orbitales de Bloch. Cabe mencionar que dada a la estructura del modelo SSH o más bien a la estructura del poliacetileno, este se encuentra conformado por orbitales tipo  $p_z$  y debido a esto cada dos átomos de carbono forma enlaces tipo  $\pi$  (Vasilopoulou, 2017).

### A.7. Matriz densidad reducida en el análisis de las amplitudes de los estados del modelo SSH simple, extendido y modulado $\vartheta$

A continuación enlistamos las matrices densidad reducida (Ecuación 3.18) de las figuras de la sección 3.6, no sin antes tener en cuenta las condiciones de Bell,  $\sum_m^N |C_{m,\lambda}^A|^2 = \sum_m^N |C_{m,\lambda}^B|^2 = \frac{1}{2}$  y también  $\sum_m^N C_{m,\lambda}^A C_{m,\lambda}^B = 0$ .

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.4898 \\ 0.4898 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.30 (a)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.4973 \\ 0.4973 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.30 (b)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.30 (c)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.30 (d)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.30 (e)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.30 (f)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.31 (a)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.31 (b)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.31 (c)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.31 (d)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.31 (e)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.31 (f)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.4717 \\ 0.4717 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.32 (a)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.2481 \\ 0.2481 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.32 (b)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.0270 \\ -0.0270 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.32 (c)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.32 (d)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.2719 \\ -0.2719 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.32 (e)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.15 \\ -0.15 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.32 (f)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.4916 \\ 0.4916 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.33 (a)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.3677 \\ 0.3677 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.33 (b)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.0081 \\ -0.0081 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.33 (c)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.33 (d)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.1359 \\ 0.1359 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.33 (e)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.00015 \\ -0.00015 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.33 (f)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.34 (a)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.0081 \\ -0.0081 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.34 (b)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.0081 \\ -0.0081 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.34 (c)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.34 (d)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.00013 \\ 0.00013 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.34 (e)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.34 (f)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.34 (g)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.00013 \\ 0.00013 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.34 (h)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.0081 \\ -0.0081 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.35 (a)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.35 (b)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.35 (c)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.00015 \\ -0.00015 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.35 (d)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.0081 \\ -0.0081 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.35 (e)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.35 (f)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0.00013 \\ 0.00013 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.35 (g)})$$

$$\rho_r = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -0.00015 \\ -0.00015 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{figura 3.35 (h)})$$

## Bibliografía

- Abellán, C., Acín, A., Alarcón, A., Alibart, O., Andersen, C. K., Andreoli, F., Beckert, A., Beduini, F. A., Bendersky, A., Bentivegna, M., Bierhorst, P., Burchardt, D., Cabello, A., Cariñe, J., Carrasco, S., Carvacho, G., Cavalcanti, D., Chaves, R., Cortés-Vega, J., ... Zhong, J. (2018). Challenging local realism with human choices. *Nature*, 557(7704), 212–216. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0085-3>
- Aoki, H. (2011). Integer Quantum Hall Effect. *Comprehensive Semiconductor Science and Technology*, 1–6, 175–209. <https://doi.org/10.1016/B978-0-44-453153-7.00054-7>
- Asbóth, J. K., Oroszlány, L., & Pályi, A. (2015). *A Short Course on Topological Insulators: Band-structure topology and edge states in one and two dimensions*. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-25607-8>
- Audretsch. (2007). Entanglement Systems: New directions in quantum physics.
- Auyuanet, A., & Davidovich, L. (2010). Quantum correlations as precursors of entanglement. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 82(3), 1–10. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.82.032112>
- Bardyn, C. E., Wawer, L., Altland, A., Fleischhauer, M., & Diehl, S. (2018). Probing the Topology of Density Matrices. *Physical Review X*, 8(1), 11035. <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.8.011035>
- Batra, N., & Sheet, G. (2019). *Understanding Basic Concepts of Topological Insulators Through Su-Schrieffer-Heeger (SSH) Model*. 1–8. <https://doi.org/10.1007/s12045-020-0995-x>
- Bell, J. S., Horne, M. A., & Zeilinger, A. (1989). Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics. *American Journal of Physics*, 57(6), 567–567. <https://doi.org/10.1119/1.15983>
- Berry, M. V., & A, P. R. S. L. (1984). Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 392(1802), 45–57. <https://doi.org/10.1098/rspa.1984.0023>
- Bogdanov, A. Y., Bogdanov, Y. I., & Valiev, K. A. (2007). Schmidt information and entanglement of quantum systems. *Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics*, 31(1), 33–42. <https://doi.org/10.3103/S0278641907010074>
- Bohr, N. (1935). Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? In *Physical Review* (Vol. 48, Issue 8, pp. 696–702). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.48.696>
- Born, M., & Fock, V. (1928).  $w, \sim (s) \sim 0 \sim (q, s)$ . Neben den Eigenfunktionen des Energieoperators betrachten wir ein System von Funktionen  $\sim 31 (q' t)$ . *Matrix*, 6.
- Campos Venuti, L., & Zanardi, P. (2007). Quantum critical scaling of the geometric tensors. *Physical Review Letters*, 99(9), 1–4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.095701>

- Chen, Y. X., & Li, S. W. (2010). Quantum correlations in topological quantum phase transitions. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 81(3), 1–5. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.032120>
- Cheng, R. (2010). *Quantum Geometric Tensor (Fubini-Study Metric) in Simple Quantum System: A pedagogical Introduction*. 1–9. <http://arxiv.org/abs/1012.1337>
- Cho, J., & Kim, K. W. (2017). Quantum phase transition and entanglement in topological quantum wires. *Scientific Reports*, 7(1), 1–9. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-02717-w>
- Christian, J. (2011). On the Origins of Quantum Correlations. *ArXiv Preprint ArXiv:1201.0775*, 27. <http://arxiv.org/abs/1201.0775>
- Dhar, H. S., Pal, A. K., Rakshit, D., Sen(De), A., & Sen, U. (2017). *Monogamy of Quantum Correlations - A Review*. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-53412-1\\_3](https://doi.org/10.1007/978-3-319-53412-1_3)
- Fisher, R. A., Trans, P., & Lond, R. S. (1922). On the mathematical foundations of theoretical statistics. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 222(594–604), 309–368. <https://doi.org/10.1098/rsta.1922.0009>
- Fromholz, P., Magnifico, G., Vitale, V., Mendes-Santos, T., & Dalmonte, M. (2020). Entanglement topological invariants for one-dimensional topological superconductors. *Physical Review B*, 101(8), 1–12. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.085136>
- Girolami, D. (2013). Quantum Correlations in Information Theory. *PHD Thesis*.
- Guo, H. M. (2016). A brief review on one-dimensional topological insulators and superconductors. *Science China: Physics, Mechanics and Astronomy*, 59(3), 1–9. <https://doi.org/10.1007/s11433-015-5773-5>
- Haider, M. (2017). *Geometric phases in quantum systems of pure and mixed state*.
- Hauke, P., Heyl, M., Tagliacozzo, L., & Zoller, P. (2016). Measuring multipartite entanglement through dynamic susceptibilities. *Nature Physics*, 12(8), 778–782. <https://doi.org/10.1038/nphys3700>
- Hotta, M., & Ozawa, M. (2004). *Quantum Estimation by Local Observables*. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.70.022327>
- Kane, C. L. (2013). Topological band theory and the  $\mathbb{Z}_2$  invariant. In *Contemporary Concepts of Condensed Matter Science* (Vol. 6). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63314-9.00001-9>
- Kato, T. (1950). On the Adiabatic Theorem of Quantum Mechanics. *Journal of the Physical Society of Japan*, 5(6), 435–439. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.5.435>
- Lang, L. J., Wang, Y., Wang, H., & Chong, Y. D. (2018). Effects of non-Hermiticity on Su-Schrieffer-Heeger defect states. *Physical Review B*, 98(9), 1–8.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.094307>

- Li, C., & Miroshnichenko, A. (2018). Extended SSH Model: Non-Local Couplings and Non-Monotonous Edge States. *Physics*, *1*(1), 2–16. <https://doi.org/10.3390/physics1010002>
- Li, J., Yu, T., Lin, H. Q., & You, J. Q. (2014). Probing the non-locality of Majorana fermions via quantum correlations. *Scientific Reports*, *4*, 1–6. <https://doi.org/10.1038/srep04930>
- Li, N., & Luo, S. (2013). Entanglement detection via quantum Fisher information. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, *88*(1), 1–5. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.88.014301>
- Lieu, S. (2018). Topological phases in the non-Hermitian Su-Schrieffer-Heeger model. *Physical Review B*, *97*(4), 1–7. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.045106>
- Liu, J., Yuan, H., Lu, X. M., & Wang, X. (2020). Quantum Fisher information matrix and multiparameter estimation. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, *53*(2). <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab5d4d>
- Luo, S. (2004). Wigner-Yanase skew information vs. Quantum fisher information. *Proceedings of the American Mathematical Society*, *132*(3), 885–890. <https://doi.org/10.1090/S0002-9939-03-07175-2>
- Ly, A., Marsman, M., Verhagen, J., Grasman, R. P. P. P., & Wagenmakers, E. J. (2017). A Tutorial on Fisher information. *Journal of Mathematical Psychology*, *80*, 40–55. <https://doi.org/10.1016/j.jmp.2017.05.006>
- McQuarrie, D. A. (n.d.). *Statistical Mechanics - McQuarrie*.
- Meier, E. J., An, F. A., & Gadway, B. (2016). Observation of the topological soliton state in the Su-Schrieffer-Heeger model. *Nature Communications*, *7*, 1–6. <https://doi.org/10.1038/ncomms13986>
- Merali, Z. (2011). Quantum computing: The power of discord. *Nature*, *474*(7349), 24–26. <https://doi.org/10.1038/474024a>
- Paul, H. (1980). The Einstein Podolsky Rosen Paradox and Local Hidden—Variables Theories. *Fortschritte Der Physik*, *28*(12), 633–657. <https://doi.org/10.1002/prop.19800281202>
- Pérez-González, B., Bello, M., Gómez-León, Á., & Platero, G. (2018). *SSH model with long-range hoppings: topology, driving and disorder*. <http://arxiv.org/abs/1802.03973>
- Petz, D. (2001). Entropy, von Neumann and the von Neumann Entropy. *John von Neumann and the Foundations of Quantum Physics*, 83–96. [https://doi.org/10.1007/978-94-017-2012-0\\_7](https://doi.org/10.1007/978-94-017-2012-0_7)
- Qi, X. L., & Zhang, S. C. (2011). Topological insulators and superconductors. *Reviews of*

- Modern Physics*, 83(4). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.1057>
- Resta, R. (1998). Quantum-mechanical position operator in extended systems. *Physical Review Letters*, 80(9), 1800–1803. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.1800>
- Resta, R. (2000a). Manifestations of Berry's phase in molecules and condensed matter. *Journal of Physics Condensed Matter*, 12(9). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/12/9/201>
- Resta, R. (2000b). What makes an insulator different from a metal? *AIP Conference Proceedings*, 535, 67–78. <https://doi.org/10.1063/1.1324441>
- Resta, R., & Sorella, S. (1999). Electron localization in the insulating state. *Physical Review Letters*, 82(2), 370–373. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.370>
- Rex, S. (2017). Electric and magnetic signatures of boundary states in topological insulators and superconductors. In *PhD Thesis*.
- Schnyder, A. P., Ryu, S., Furusaki, A., & Ludwig, A. W. W. (2008). Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 78(19), 1–22. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.195125>
- Shen, S. (2011). Lecture Notes on Topological Insulator. *Science*, 1, 1–6.
- Souza, M. de, Paupitz, R., Seridonio, A., & Lagos, R. E. (2016). Specific Heat Anomalies in Solids Described by a Multilevel Model. *Brazilian Journal of Physics*, 46(2), 206–212. <https://doi.org/10.1007/s13538-016-0404-9>
- Sperling, J., Agudelo, E., Walmsley, I. A., & Vogel, W. (2017). Quantum correlations in composite systems. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 50(13). <https://doi.org/10.1088/1361-6455/aa7438>
- Sperling, J., & Vogel, W. (2011). The Schmidt number as a universal entanglement measure. *Physica Scripta*, 83(4). <https://doi.org/10.1088/0031-8949/83/04/045002>
- Su, W. P., Schrieffer, J. R., & Heeger, A. J. (1979). Solitons in polyacetylene. *Physical Review Letters*, 42(25), 1698–1701. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.42.1698>
- Thouless, D. J. (1983). Quantization of particle transport. *Physical Review B*, 27(10), 6083–6087. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.6083>
- Vasilopoulou, M. (2017). SEMICONDUCTING ORGANIC MOLECULES Electronic Structure of Organic Semiconductors: The Molecular Model. In *Encyclopedia of Physical Organic Chemistry*.
- Velasco, C. G., & Paredes, B. (2017). Realizing and Detecting a Topological Insulator in the AIII Symmetry Class. *Physical Review Letters*, 119(11). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.115301>
- Xiao, D., Chang, M. C., & Niu, Q. (2010). Berry phase effects on electronic properties.

*Reviews of Modern Physics*, 82(3), 1959–2007.  
<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1959>

Zeng, S. P., Shi, H. L., Zhou, X., Wang, X. H., Liu, S. Y., & Hu, M. L. (2019). Protecting quantum correlations of the XXZ model by topological boundary conditions. *Scientific Reports*, 9(1), 1–8. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-37474-x>