

TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

**EFFECTO DE REPULSIÓN INTERATÓMICA EN
MODOS CERO DE MAJORANA EN UN SISTEMA DE
PUNTO CUÁNTICO ACOPLADO A UN NANOCABLE
SUPERCONDUCTOR**

Renzo Kenyi Takagui Perez

Dr. Armando Aligia
Director

Miembros del Jurado
Dr. Jorge Facio
Dr. Pablo Cornaglia
Dr. Alejandro Lobos

2 de Diciembre de 2023

Grupo de Teoría de Materia Condensada - Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

Agradecimientos

...

Índice de contenidos

Índice de contenidos	v
Resumen	vii
1. Introducción	1
1.1. Definición	1
1.2. Aniones	2
1.3. Introducción a la cadena de Kitaev	5
1.4. Fase topológica y trivial de la cadena	5
1.5. Modelo previo de un punto cuántico acoplado a un cable superconductor topológico	7
1.5.1. Estudio de Ricco <i>et alia</i>	8
2. Espectro de energías de la cadena de Kitaev	11
3. Modelo incluyendo el efecto de una repulsión coulombiana V	17
3.1. Valores de expectación y cálculos	18
3.2. Discusión de la hipótesis de Ricco <i>et alia</i>	22
3.3. Comparación de resultados con el nuevo modelo	24
4. Conclusiones y discusión	31
Bibliografía	33

Resumen

En el contexto de una configuración en el que un punto cuántico es usado como una sonda local para estudiar la calidad de modos de Majorana en un nanocable superconductor, investigamos el efecto que tienen sobre estos la introducción de un término de repulsión coulombiana entre el punto y el cable cuántico.

En modelos previos, el sistema es descrito por hamiltonianos efectivos a bajas energías que, en su mayoría, no toman en cuenta un posible efecto de la repulsión coulombiana. Sin embargo, en el estudio realizado por Ricco *et alia*, los autores usan un modelo que incluye dicha repulsión y afirman que la presencia de este término arruina la protección topológica que poseen los modos cero de Majorana (MZMs).

En este trabajo de maestría, sostenemos la tesis de que estudiar el sistema a través de un hamiltoniano efectivo a bajas energías no captura el verdadero efecto de un término de repulsión coulombiana en los MZMs. En lugar de un hamiltoniano efectivo, consideramos términos de más altas energías y modelamos la repulsión como un término de interacción entre el punto y el sitio más cercano a este en el nanocable. Seguidamente, obtenemos numéricamente valores de expectación y el perfil de espectro de energías donde notamos que la única situación donde los MZMs pierden su protección topológica es cuando tratamos con un nanocable corto y el espectro de energías presenta un patrón de diamante.

La presente tesis consta de cuatro capítulos. En el capítulo 1, daremos una breve introducción a los modos de Majorana, cadena de Kitaev y el modelo propuesto por Ricco *et alia*. Luego, en el capítulo 2, introducimos un método analítico que nos permite conocer la forma matricial de los hamiltonianos que estudiamos y analizamos la cadena de Kitaev aislada. Seguidamente, en el capítulo 3, presentamos los resultados del modelo incluyendo el punto cuántico y el *hopping* y la interacción con el primer sitio de la cadena que sostienen la tesis descrita arriba. Finalmente, en el capítulo 4, mencionamos las conclusiones del presente trabajo de investigación.

Esta maestría está basada en el trabajo científico:

- [1] R. Kenyi Takagui-Perez, A. Aligia. Effect of interatomic repulsion on majorana zero modes in a coupled quantum-dot-superconducting-nanowire hybrid system, arXiv:2309.10888 [cond-mat.mes-hall], enviado a Physical Review B.

Palabras clave: CADENA DE KITAEV, FASES TOPOLÓGICAS, MODOS CERO DE MAJORANA, SUPERCONDUCTORES, PUNTO CUÁNTICO

Capítulo 1

Introducción

1.1. Definición

Los llamados modos de Majorana fueron inicialmente planteados por Ettore Majorana [2]. Estos los definió de tal forma que la partícula sea la misma que la antipartícula. En términos de operadores de segunda cuantización tienen la propiedad

$$\gamma^\dagger = \gamma \quad (1.1)$$

Asimismo, estos obedecen las siguientes reglas de anticonmutación

$$\{\gamma_i, \gamma_j\} = 2\delta_{ij} \quad (1.2)$$

Todo modo de Majorana puede ser definido en términos de operadores fermiónicos

$$\gamma = c + c^\dagger \quad (1.3)$$

De igual manera, un modo fermiónico ordinario c^\dagger puede ser definido en términos de dos modos de Majorana como:

$$c^\dagger = \frac{1}{2}(\gamma_1 - i\gamma_2) \quad (1.4)$$

Hasta hora solo hemos hecho una definición matemática pero lo que nos importa es su uso en la física.

En física de altas energías los fermiones de Majorana todavía no han sido hallados, aunque todavía queda por ver si los neutrinos clasifican como estos. En materia condensada, por otra parte, los buscamos como quasipartículas. La búsqueda de Majoranas se volvió una línea de investigación importante por su posible uso en computación cuántica.

Si tenemos una cadena con varios sitios fermiónicos numerados $1, \dots, N$, en modos

de Majorana los sitios podrían ser escritos como

$$\begin{aligned}
 c_1 &= \frac{1}{2}(\gamma_1 + i\gamma_2), & c_1^\dagger &= \frac{1}{2}(\gamma_1 - i\gamma_2) \\
 c_2 &= \frac{1}{2}(\gamma_3 + i\gamma_4), & c_2^\dagger &= \frac{1}{2}(\gamma_3 - i\gamma_4) \\
 &\vdots & & \\
 &\vdots & & \\
 &\vdots & & \\
 c_N &= \frac{1}{2}(\gamma_{2N-1} + i\gamma_{2N}), & c_N^\dagger &= \frac{1}{2}(\gamma_{2N-1} - i\gamma_{2N})
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

Ya que siempre podemos expresar un fermión como dos modos de Majorana, en principio un Hamiltoniano también puede ser enteramente descrito por ellos. Hasta ahora no hemos hecho más que definir los Majorana en relación con los fermiones pero pronto se les dará un significado a un Majorana individual.

1.2. Aniones

Los modos de Majorana no pueden ser identificados ni como fermiones ordinarios ni como bosones, la estadística que presentan u obedecen es diferente. En el caso de las partículas indistinguibles, que acabamos de mencionar, al ser intercambiadas adquieren o no un cambio de signo en la función de onda.

$$\begin{aligned}
 \psi(x_1, x_2) &= +\psi(x_2, x_1) \rightarrow \text{Bosones} \\
 \psi(x_1, x_2) &= -\psi(x_2, x_1) \rightarrow \text{Fermiones}
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

Podemos pensar en este cambio de signo como un cambio de fase que la función de onda adquiere cuando físicamente movemos las partículas alrededor una de la otra. Pensar en esto en una sola dimensión puede no tener sentido ya que no habría espacio para el intercambio. Sin embargo, en dos dimensiones se encuentra una nueva forma de pensar en la fase adquirida por las funciones de onda.

Supongamos que tenemos dos partículas idénticas en dos dimensiones y las intercambiamos de la forma que hemos descrito, o sea moviéndolas una alrededor de la otra. La función de onda adquirirá una fase. La forma en cómo las moveremos será en sentido antihorario.

$$\psi(x_1, x_2) \rightarrow e^{i\theta} \psi(x_1, x_2) \tag{1.7}$$

Si realizamos de nuevo el intercambio en sentido antihorario, la nueva fase no será + o

—, sino una fase no trivial $e^{i2\theta}$.

$$\psi(x_1, x_2) \rightarrow e^{i2\theta} \psi(x_1, x_2) \quad (1.8)$$

El caso especial de $\theta = 0, \pi$ pertenece al de los bosones y fermiones, respectivamente. Esto quiere decir que existe todo un espectro de estadísticas θ y cuyas partículas que la obedecen las llamaremos *aniones*. Esta estadística también es llamada *estadística fraccionaria*. La idea de los aniones fue explorada primero por Frank Wilczek[3][4]. A partir de estas ideas se puede hablar de operaciones de trenzado (*braiding operations*) en las que una operación del grupo de trenzas (*braid group*) puede ser visualizado como un conjunto de trayectorias de las partículas en la dimensión $2+1$ espacio-tiempo en el que las dos partículas se cruzan pero de tal forma que podamos diferenciar el camino que tomó cada una. Por ejemplo σ_1 y σ_2 vendrían a ser estas operaciones del grupo de trenzado tal que las partículas afectadas tendrán que seguir las trayectorias como en la figura 1.1. El saber qué trayectoria está por encima de otra es importante porque no es lo mismo aplicar $\sigma_1\sigma_2$ que $\sigma_2\sigma_1$, es decir el grupo de trenzado es un *grupo no-abeliano*.

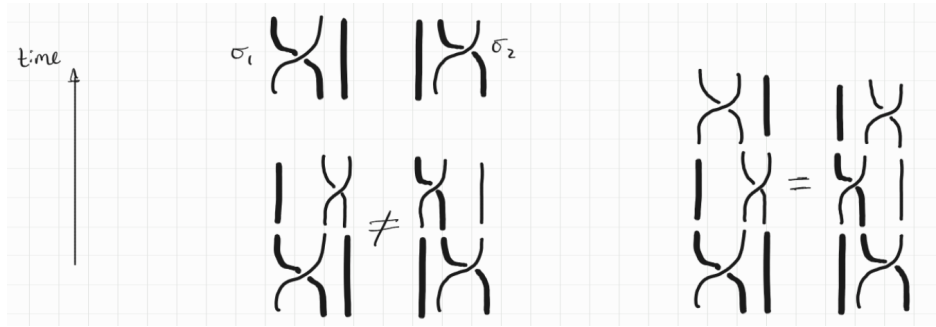


Figura 1.1: Aplicación de operaciones de trenzado. En todos los casos presentes se consideran tres partículas las cuales poseen trayectorias que las vamos a ir modificando dependiendo de qué operación de trenzado aplicamos. Si las posiciones en las que terminan las partículas son las mismas en las que empezaron sin importar las operaciones que se aplicaron entonces estas serán equivalentes.

La razón porque nos interesan los modos de Majorana y la estadística no-abeliana dada es porque una forma de atacar el problema de las computadoras cuánticas tolerantes a fallos [5][6] es embeber información de forma robusta en fermiones no locales, los cuales pueden encontrarse como quasipartículas con el comportamiento de aniones, más específicamente Majoranas.

Ahora imaginemos que tenemos a cuatro Majoranas en un cable unidimensional, si quisieramos intercambiarlos de posición inevitablemente estos se encontrarían y colisionan, por esta razón la estadística no está bien definida para esta dimension. Para realizar operaciones con fermiones de Majorana necesitamos tenerlos siempre distanciados y es ahí donde entra el concepto de *braiding*, que pictóricamente se puede ver como una unión o empalme al superconductor unidimensional donde podemos guar-

dar a un Majorana (rojo) como en la figura 1.2 y podemos ahora pasar el Majorana (azul) de la derecha a la izquierda, y, asimismo pasar el Majorana guardado (rojo) a la derecha como en la figura 1.3. En mecánica cuántica operaciones como estas usualmente se escriben como una transformación $|\Psi\rangle \rightarrow U |\Psi\rangle$, en el caso de fermiones o bosones el U es una constante $+1$ o -1 según corresponde. Bajo las condiciones que nos imponen los Majoranas es enteramente posible que U sea otra cosa que ± 1 , sino que puede llegar a ser una matriz de rotación que aplicamos a la función de onda. Si tenemos varias operaciones de *braiding* o simplemente intercambio significa que aplicaremos varias rotaciones, es decir, multiplicación de matrices y estas operaciones pueden ser no-conmutativas.

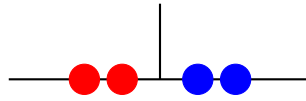


Figura 1.2: Se tiene la esperanza de que con los modos de Majorana será posible hacer operaciones lógicas con qubits, este dibujo rudimentariamente presenta una operación simple que es la de intercambiar de lugar a dos Majoranas.

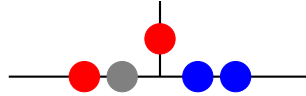


Figura 1.3: Ya que tener cable unidimensional no permitiría el intercambio, si hacemos un acople al cable con alguna otra juntura donde podamos almacenar momentáneamente a uno de los Majorana entonces ahí sí es posible llevar a cabo la operación.

La razón porque nos interesan los modos de Majorana y la estadística no-abeliana dada es porque una forma de atacar el problema de las computadoras cuánticas tolerantes a fallos [5][6] es embeber información de forma robusta en fermiones no locales, los cuales pueden encontrarse como quasipartículas con el comportamiento de aniones, más específicamente Majoranas. Una vez que tenemos Majoranas queremos realizar operaciones sobre qubits, pero, como hemos visto, esto se puede lograr usando operaciones de trenzado.

Por otro lado, hablar de aniones no solo nos limita al campo de materia condensada. El tema nos conecta directamente con el estudio de computación cuántica topológica [7] y teoría cuántica de campos topológica [8][9] que, otra vez, nos vuelve a conectar con temas de materia condensada como por ejemplo: el estudio de vórtices, el efecto Aharonov-Bohm o la teoría de Chern-Simons [10].

Desde el 2021, luego de bastantes años de resultados parciales en la búsqueda de Majoranas, combinando técnicas teóricas y experimentales de BEC (condensado de Bose-Einstein) y BCS (teoría de superconductividad de Bardeen-Cooper-Schrieffer) [11] hay mucha promesa en por fin poder identificar aniones, en particular Majoranas.

1.3. Introducción a la cadena de Kitaev

Debido a su relevancia para nuestros resultados novedosos con la cadena de Kitaev interactuando con un punto cuántico, repasamos brevemente la cadena aislada.

En resumen, el paper de Kitaev [12] nos cuenta que en un sistema fermiónico sin espín con una brecha en el espectro del volumen posee estados de borde que pueden ser descritos por fermiones de Majorana, que podrían ser de utilidad como qubits por ser robustos ante perturbaciones.

El sistema fermiónico que nos plantea Kitaev es el de una cadena unidimensional en el régimen sin espín (esto se podría lograr aplicando un campo magnético), superconductor (por superconductividad inducida por proximidad) en el que exista una brecha en el espectro. Con esta receta podemos empezar planteando el Hamiltoniano del sistema

$$H = \sum_j \left[-\mu(c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2}) - t(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) + (\Delta c_j c_{j+1} + \Delta^* c_{j+1}^\dagger c_j^\dagger) \right] \quad (1.9)$$

donde el primer término es la energía de ocupación por sitio, el segundo es el término de salto y el último término es la creación o destrucción de pares de Cooper. A este modelo lo llamamos *cadena de Kitaev*, o más específicamente, a la cadena que presenta modos cero de Majorana. Para la discusión de la siguiente sección escribimos cada operador fermiónico que aparece en la ecuación (1.9) como combinación lineal de dos fermiones de Majorana.

$$c_j^\dagger = \frac{1}{2}(\gamma_{2j-1} - i\gamma_{2j}), \quad c_j = \frac{1}{2}(\gamma_{2j-1} + i\gamma_{2j}) \quad (1.10)$$

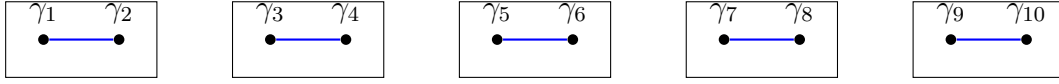
donde j enumera el sitio de la cadena unidimensional.

1.4. Fase topológica y trivial de la cadena

A modo de explorar algunas de las propiedades de la cadena de Kitaev consideramos dos casos simples para cada fase:

(i) Fase trivial. Caso cuando $\mu \neq 0$ y $t = \Delta = 0$. Solo para fines de ver cómo se combinan los Majoranas en este caso, reemplazamos los operadores originales por su equivalente en términos de Majorana.

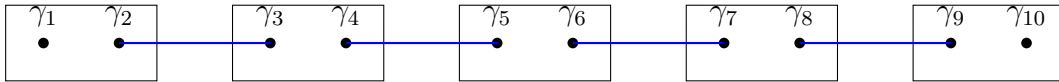
$$H = -\mu \sum_{n=1}^N (c_n^\dagger c_n - \frac{1}{2}) = \frac{i}{2}(-\mu) \sum_{n=1}^N \gamma_{2n-1} \gamma_{2n} \quad (1.11)$$



los Majoranas se acoplan con los del mismo sitio. Entonces, en la fase trivial no pasa nada interesante. El estado fundamental estará todo lleno o todo vacío dependiendo del μ , y el espectro no contiene estados de energía nulo.

(ii) Fase topológica. $\mu = 0$ y $t = \Delta \neq 0$. Volvemos a reemplazar todos los operadores fermiónicos por Majoranas y vemos qué pasa

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{n=1}^N -t(c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) + \Delta c_n c_{n+1} + \Delta^* c_{n+1}^\dagger c_n^\dagger \\
 &= \sum_{n=1}^N -\frac{t}{4} \left[(\gamma_{2n-1} - i\gamma_{2n})(\gamma_{2n+1} + i\gamma_{2n+2}) + (\gamma_{2n+1} - i\gamma_{2n+2})(\gamma_{2n-1} + i\gamma_{2n}) \right] \\
 &\quad + \frac{\Delta}{4} (\gamma_{2n-1} + i\gamma_{2n})(\gamma_{2n+1} + i\gamma_{2n+2}) + \frac{\Delta^*}{4} (\gamma_{2n+1} - i\gamma_{2n+2})(\gamma_{2n-1} - i\gamma_{2n}) \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N -t \left[\gamma_{2n-1}\gamma_{2n+1} + i\gamma_{2n-1}\gamma_{2n+2} + i\gamma_{2n}\gamma_{2n+1} \right. \\
 &\quad \left. + \gamma_{2n}\gamma_{2n+2} + \gamma_{2n+1}\gamma_{2n-1} + i\gamma_{2n+1}\gamma_{2n} - i\gamma_{2n+2}\gamma_{2n-1} + \gamma_{2n+2}\gamma_{2n} \right] \\
 &\quad + \frac{\Delta}{4} \left[\gamma_{2n-1}\gamma_{2n+1} + i\gamma_{2n-1}\gamma_{2n+2} + i\gamma_{2n}\gamma_{2n+1} - \gamma_{2n}\gamma_{2n+2} \right. \\
 &\quad \left. + \gamma_{2n+1}\gamma_{2n-1} - i\gamma_{2n+1}\gamma_{2n} - i\gamma_{2n+2}\gamma_{2n-1} - \gamma_{2n+2}\gamma_{2n} \right] \\
 &= \frac{t}{4} \sum_n [-2i\gamma_{2n-1}\gamma_{2n+2} + 2i\gamma_{2n}\gamma_{2n+1} + 2i\gamma_{2n-1}\gamma_{2n+2} + 2i\gamma_{2n}\gamma_{2n+1}] \\
 &= t \sum_n i\gamma_{2n}\gamma_{2n+1}
 \end{aligned} \tag{1.12}$$



En este caso vemos que ahora los Majoranas tipo 2 de un sitio se acoplan con los de tipo 1 pero del sitio siguiente. Este acoplamiento da lugar a que los operadores de Majorana de los bordes no aparezcan en el Hamiltoniano. Por lo tanto, ambos tendrían energía degenerada en cero. Además, gracias a esto tenemos dos estados fundamentales degenerados ortogonales entre sí. Para ver esto definimos nuevos operadores fermiónicos pero conformados por estos Majoranas acoplados

$$\tilde{c}_j^\dagger = (\gamma_{2j} - i\gamma_{2j+1})/2, \quad \tilde{c}_j = (\gamma_{2j} + i\gamma_{2j+1})/2 \tag{1.13}$$

$$\gamma_{2j} = \tilde{c}_j^\dagger + \tilde{c}_j, \quad \gamma_{2j+1} = \frac{\tilde{c}_j^\dagger - \tilde{c}_j}{i} \tag{1.14}$$

reemplazando en el Hamiltoniano este se convierte en

$$\begin{aligned}
H &= it \sum_{n=1}^{N-1} \gamma_{2n} \gamma_{2n+1} \\
&= it \sum_{n=1}^{N-1} (\tilde{c}_j^\dagger - \tilde{c}_j) \left(\frac{\tilde{c}_j^\dagger + \tilde{c}_j}{i} \right) \\
&= t \sum_{n=1}^{N-1} \tilde{c}_j^\dagger \tilde{c}_j^\dagger + \tilde{c}_j^\dagger \tilde{c}_j - \tilde{c}_j \tilde{c}_j^\dagger - \tilde{c}_j \tilde{c}_j \\
&= 2t \sum_{n=1}^{N-1} \left(\tilde{c}_j^\dagger \tilde{c}_j - \frac{1}{2} \right)
\end{aligned} \tag{1.15}$$

Teniendo estos dos casos a la mano podemos conjeturar que existen dos fases bien diferenciadas en el sistema dependiendo de los valores de los parámetros. Al primer caso lo llamamos el caso trivial ya que no está pasando nada interesante y el rol de los Majorana no importa mucho. Sin embargo, en el segundo caso vemos cómo la presencia de los Majorana de los bordes constituyen un fermión de Dirac deslocalizado de energía cero en medio del gap. Esta fase, donde hay estados con energías muy cercanas a cero en medio del gap, será llamada *fase topológica*.

1.5. Modelo previo de un punto cuántico acoplado a un cable superconductor topológico

Ahora introduciremos el modelo base con el que se trabaja en la tesis: un punto cuántico acoplado a uno de los extremos de un nanocable. El porqué resulta este modelo interesante es que se puede usar el punto cuántico como una prueba local para realizar espectroscopía de Majoranas en un nanocable superconductor. Esta configuración nos va a permitir discernir si los modos cero que se observan en los experimentos de anomalías de pico cero son de origen topológico o si se trata de algún otro fenómeno físico. Los primeros en proponer este sistema fueron Prada *et alia* [13]. En su investigación usan un hamiltoniano efectivo a bajas energías y presentan una serie de simulaciones del perfil de espectro de energías donde dependiendo si se trata de un cable corto (≈ 400 nm) o cable largo ($\approx 2 \mu\text{m}$) se puede apreciar o bien diferentes patrones que forman los MZMs, como de moño o diamante, o una protección topológica muy robusta incluso si las energías de los autoestados correspondientes al punto cuántico se acercan mucho al cero, pero no tanto como para cruzarse con los MZMs. Luego, Clarke [14], extiende estos estudios para medir la calidad o grado de qué tan topológico es un sistema de las mismas características que el modelo de Prada *et alia*. Finalmente, Ricco *et alia* [15] hacen una extensión más a este modelo incluyendo un término de repulsión coulombiana

afirmando que este induce una hibridación adicional en los MZMs. Algunos estudios experimentales que le dan soporte a todos estos trabajos pueden ser leídos en las referencias [16] y [17].

1.5.1. Estudio de Ricco *et alia*

Para esta tesis resulta importante repasar en cierto detalle el modelo planteado por Ricco *et alia* ya que serán sus resultados los cuales compararemos con los nuestros.

El modelo de Ricco *et alia* es un Hamiltoniano efectivo de bajas energías en el que solo están presentes términos del punto cuántico y los modos fermiónicos de Majorana que se encuentran a los extremos de la cadena unidimensional que está acoplada en uno de los extremos con el punto cuántico. A esto se le añade el término de interacción coulombiana entre ambos dispositivos que, según los autores, causa que el desdoblamiento de los MZMs aumente y al hacerlo estos pierden su robustez ante posibles perturbaciones. El Hamiltoniano que propusieron luce como

$$\mathcal{H} = \epsilon_d d^\dagger d + i\epsilon_M \gamma_L \gamma_R + i\lambda_L (d - d^\dagger) \gamma_L + \lambda_R (d + d^\dagger) \gamma_R + H_U \quad (1.16)$$

donde ϵ_d es la energía de ocupación del punto cuántico, ϵ_M es una medida de qué tanto acoplamiento o hibridización espacial existe entre las funciones de onda de los modos de Majorana de la izquierda el de la derecha, $\lambda_{L(R)}$ indica cuánto acoplamiento hay entre los Majoranas de la izquierda y derecha respectivamente con el punto cuántico. Finalmente, el último término de cuenta de la repulsion coulombiana entre el punto cuántico y el fermión delocalizado $f^\dagger = (\gamma_L + \gamma_R)/2$ formado por ambos Majoranas, este posee la siguiente forma, con $n_f = f^\dagger f$

$$H_U = U n_d n_f = \frac{1}{2} U n_d \left(i\gamma_R \gamma_L + \frac{1}{2} \right) \quad (1.17)$$

n_f representaría el total de la ocupación de la cadena a baja energía. H_U se parece bastante a la del segundo término de (1.16). Por eso afirman que debido a la repulsión coulombiana habrá una hibridización extra causando así un desdoblamiento más grande en el espectro de energías.

En las siguientes subsecciones se describirán brevemente los casos que los autores estudiaron, estos son el caso no-interactuante y el caso interactuante. Es decir, cuando tomamos o no en cuenta la repulsión coulombiana. Los gráficos que se mostrarán a continuación son del paper original. La forma en la que calcularon su espectro de energía fue a través del cálculo de densidad de estados del punto cuántico $\rho_d(V)$ que a temperatura cero es proporcional la conductancia diferencial, $dI/dV \propto \rho_d(V)$, con V correspondiendo al voltaje de bias. La densidad espectral resultante se muestra en las figuras 1.4 y 1.5. Cabe recordar que la tesis de los autores es que debido a la repulsión coulombiana

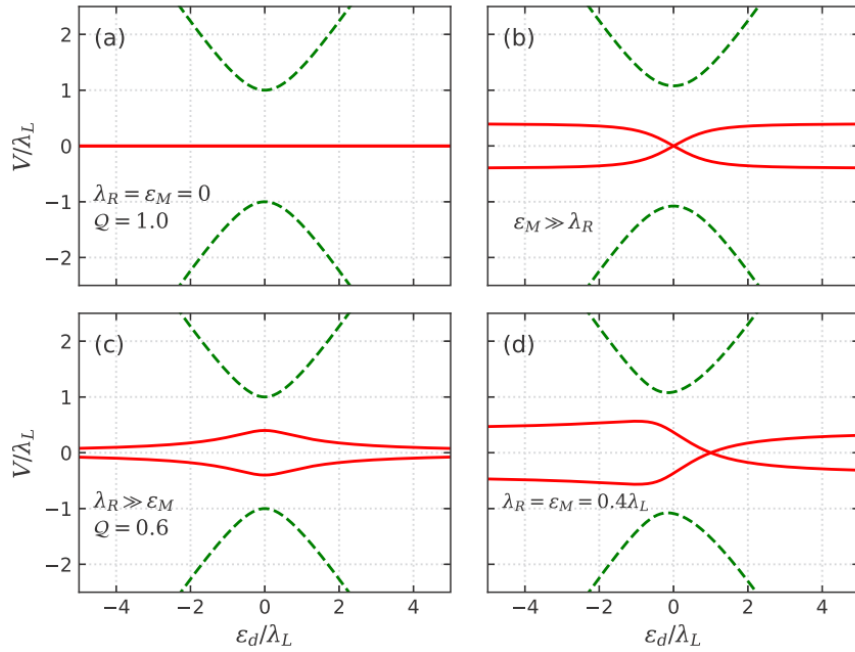


Figura 1.4: Autoenergías en función de la energía del punto cuántico ϵ_d para cuando el término de repulsión $H_U = 0$ en (1.16).

los MZMs perderán su condición de estar topológicamente protegidos, y la forma de mostrarlo es a través de observar qué les pasa a estos modos en el espectro de energía. Si los MZMs pierden su robustez se debería apreciar una separación de energía mayor donde antes no la había.

Caso no interactuante

Primero veremos el caso no interactuante, es decir, el caso en el que la repulsión coulombiana está apagada. En la figura 1.4(a) para cuando no hay repulsión y además no hay separación adicional por el término que acompaña a ϵ_M , nos encontramos en el caso ideal donde los MZMs están topológicamente protegidos cerca de energía cero. La situación cambia cuando empezamos a considerar un $\epsilon_M \neq 0$, es decir, tomar en cuenta hibridación entre los MZMs. Entonces los MZMs se separan en energía y podemos identificar figuras características que se ven en otras referencias como la del moño o de diamante. En la figura 1.4(b) en el caso de $\epsilon_M \gg \lambda_R$ ocurre una forma de moño y el cruce de niveles en $\epsilon_d = 0$. Si en cambio se considera un coeficiente de hibridación de Majoranas insignificante a comparación del acoplamiento entre el punto cuántico y el Majorana de la derecha como en la figura 1.4(c), los autores obtienen una forma de diamante, o sea un desdoblamiento en $\epsilon_d = 0$. Finalmente en la figura 1.4(d), si los coeficientes ϵ_d , λ_R y λ_L son comparables, se obtiene un espectro asimétrico con respecto al eje de energías y ocurre un desplazamiento del cruce hacia la derecha.

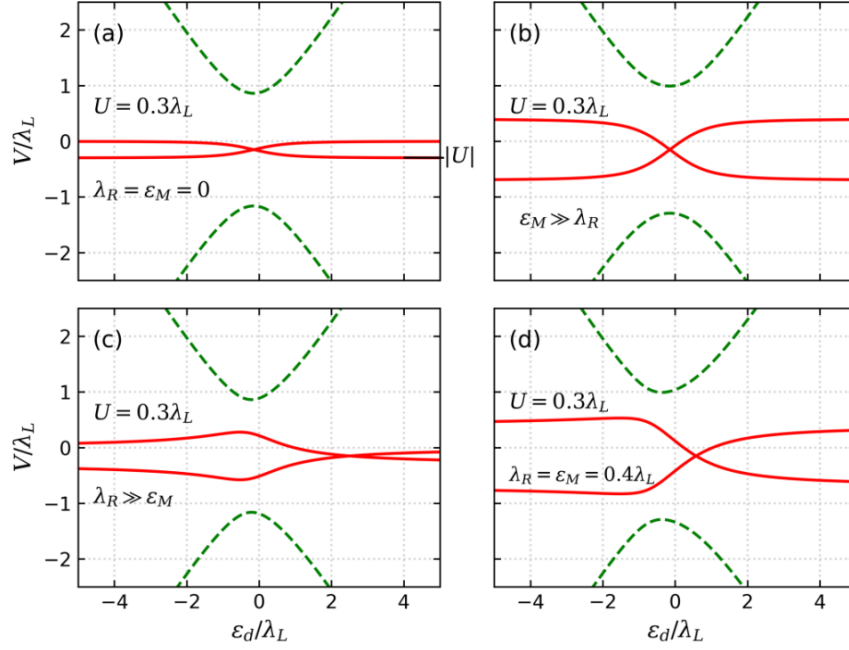


Figura 1.5: Autoenergías en función de la energía del punto cuántico ϵ_d para cuando el término de repulsión $H_U \neq 0$ en (1.16).

Caso interactuante

El caso interactuante consiste en tomar en cuenta el término de repulsión coulombiana $Un_d n_f$, que, como se explicó anteriormente, posee una forma muy parecida a la del término de hibridación de los Majorana $\epsilon_M \gamma_L \gamma_R$. Bajo este modelo y consideraciones, sus simulaciones dan que incluso en el caso $\epsilon_M = 0$, como en la figura 1.5(a), existe una separación de energías de los MZMs significando la pérdida de protección topológica.

Comparando los paneles de la figura 1.5 con los respectivos de la figura 1.4, vemos que el efecto de la interacción H_U es siempre aumentar el desdoblamiento del caso no interactuante.

Capítulo 2

Espectro de energías de la cadena de Kitaev

Antes de abordar el sistema completo, incluyendo el punto cuántico, estudiamos la cadena de Kitaev finita. Si bien esta se conoce, para ver el efecto de la interacción con el punto cuántico necesitamos información detallada de la cadena aislada.

Para estudiar el espectro de energías de una cadena aislada finita y extensiones del modelo, introduciremos un método de mapeo similar a la notación de Nambu que nos permitirá obtener la matriz del sistema tal que podamos diagonalizarla por métodos computacionales.

El método nos permite hacer un mapeo que nos lleva de trabajar con operadores fermionicos a kets o bras.

$$c_\alpha \longleftrightarrow |\alpha, a\rangle, \quad c_\alpha^\dagger \longleftrightarrow |\alpha, c\rangle \quad (2.1)$$

donde a significa aniquilación y c creación. Luego de realizar el mapeo de cualquier hamiltoniano $H \iff \tilde{H}$, llegaremos a una forma general

$$\tilde{H} = \sum_{\beta\alpha} (A_{\beta\alpha} |\beta a\rangle \langle \alpha a| + B_{\beta\alpha} |\beta c\rangle \langle \alpha a| - \bar{A}_{\beta\alpha} |\beta c\rangle \langle \alpha c| - \bar{B}_{\beta\alpha} |\beta a\rangle \langle \alpha c|) \quad (2.2)$$

donde la barra sobre $A_{\beta\alpha}$ y $B_{\beta\alpha}$ significa complejo conjugado. Entonces si queremos conocer los elementos de matrix del Hamiltoniano empezamos a aplicar \tilde{H} a las bases $|\alpha a\rangle$ y $|\alpha c\rangle$:

$$\begin{aligned} \tilde{H} |\alpha a\rangle &= \sum_{\beta} (A_{\beta\alpha} |\beta a\rangle + B_{\beta\alpha} |\beta c\rangle), \\ \tilde{H} |\alpha c\rangle &= - \sum_{\beta} (\bar{A}_{\beta\alpha} |\beta a\rangle + \bar{B}_{\beta\alpha} |\beta c\rangle). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Notamos que esta forma es muy similar a la de computar el conmutador $[c_\alpha, H]$

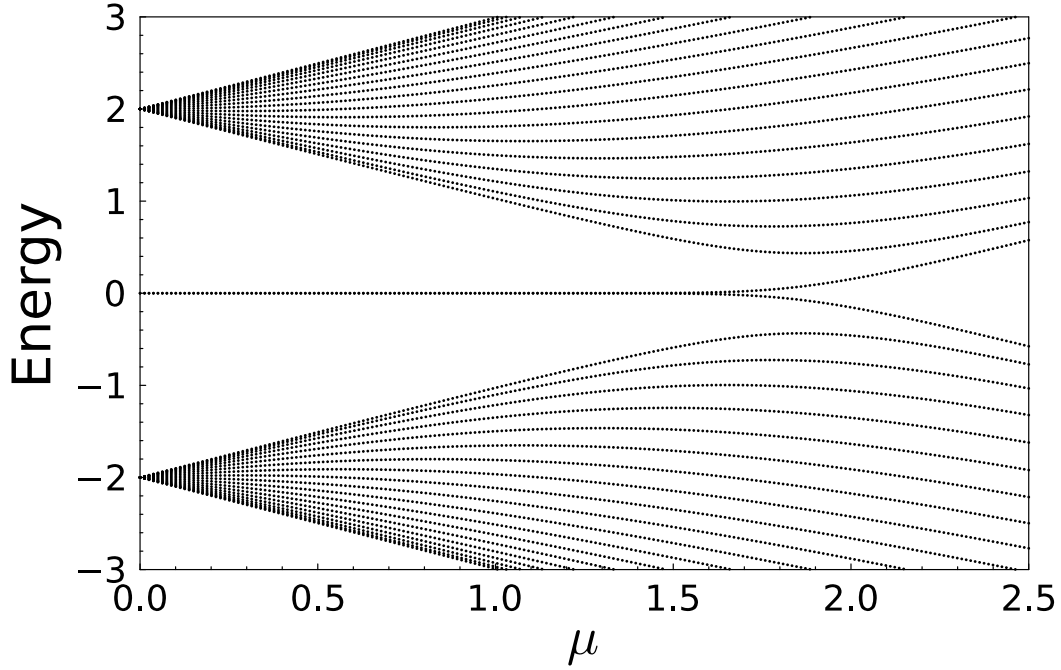


Figura 2.1: Espectro de energía en función del valor del potencial químico μ para una cadena de Kitaev aislada con $\Delta = 1$ y $t = 1$. El sistema está en su fase topológica para $|\mu| < 2$. Para $|\mu| < 2$ los MZMs se empiezan a separar y el sistema entra en su fase trivial.

$$[c_\alpha, H] = \sum_{\beta} (A_{\beta\alpha} c_\beta + B_{\beta\alpha} c_\beta^\dagger), \quad (2.4)$$

por lo tanto nos encargaremos de computar todos los conmutadores tal que obtengamos los correspondientes $A_{\beta\alpha}$ y $B_{\beta\alpha}$. A modo de ejemplo, tomemos de nuevo el Hamiltoniano de la cadena de Kitaev

$$H = \sum_i \left[(-tc_{j+1}^\dagger c_j + \Delta c_{j+1}^\dagger c_j^\dagger + h.c.) - \mu c_j^\dagger c_j \right]. \quad (2.5)$$

Computamos los conmutadores en el caso de si j no es ni el primero ni el último:

$$\begin{aligned} [H, c_j^\dagger] &= -\mu c_j^\dagger - t(c_{j+1}^\dagger + c_{j-1}^\dagger) + \Delta(c_{j-1} - c_{j+1}) \\ [H, c_j] &= -\mu c_j - t(c_{j+1} + c_{j-1}) + \Delta(c_{j-1}^\dagger - c_{j+1}^\dagger) \end{aligned} \quad (2.6)$$

sus análogos en forma de ket serían

$$\begin{aligned} \tilde{H} |jc\rangle &= -\mu |jc\rangle - t(|j+1, c\rangle + |j-1, c\rangle) + \Delta(|j-1, a\rangle - |j+1, a\rangle) \\ \tilde{H} |ja\rangle &= +\mu |ja\rangle + t(|j+1, a\rangle + |j-1, a\rangle) + \Delta(|j+1, c\rangle - |j-1, c\rangle) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Aplicando $\langle jc|$ o $\langle ja|$ podremos encontrar su forma de matriz y a partir de ahí hacer la diagonalización. Para $t = \Delta$ y variando μ en un rango de $[0, 2.5]$ obtenemos el espectro de energía de la figura 2.1. No exploramos el rango negativo ya que la gráfica

será simétrica. Vemos que en la fase topológica $\mu < 2t$. De la ecuación (1.15) podemos concluir que estos nuevos autoestados tendrán una energía degenerada en $E = 2t$ y $E = -2t$. Se pueden obtener los mismos resultados si aplicamos el mapeo de operadores c_i^\dagger y c_i a kets, y seguidamente calculamos la conmutación con el hamiltoniano. los MZMs son los autoestados con energías cercanas al cero.

En la figura 2.2 se presentan perfiles de espectro de energías para una cadena de Kitaev aislada para $N = 20$ y $N = 50$ sitios en función del potencial químico. Los parámetros usados para la cadena son $t = 1$ y $\Delta = 0.2$. Para cada autoenergía le corresponde su mismo valor pero negativo ya que los operadores de creación y aniquilación que diagonalizan el hamiltoniano tienen energías opuestas. Las energías más próximas a 0 corresponden a los MZMs con una pequeña hibridación entre ellos. Los autoestados intermedios en el gap son los modos fermiónicos compuestos por los Majorana que se encuentran en los extremos de la cadena, y estos se mantienen robustos hasta alcanzar $\mu = 2$ que, como se explicó antes, corresponde a un cambio de la fase topológica a la trivial porque se cumple la desigualdad $|\mu| > 2|t|$. Para apreciar mejor el comportamiento de estos estados cercanos a una energía cero realizamos un acercamiento al caso de la cadena de $N = 50$ sitios en la figura 2.3. Estos oscilan alrededor de la energía cero. También, notamos que cuanto más grande es la cadena, los Majoranas se acercan muchísimo más a energía cero. Esto se debe a que en cuanto más larga la cadena menos hibridación habrá entre ellos entonces se espera una división menor. Adicionalmente, se observa un crecimiento abrupto de las energías al entrar el sistema en la fase no topológica para $\mu \geq 2$. El hecho de que la transición está para μ ligeramente inferior a 2 es probablemente un efecto de tamaño. Ahora nos preguntamos qué tiene que pasar para que aparezcan energías cero. Kitaev encontró que para que ocurra la fase topológica debemos tener $2|w| > |\mu|$ y $\Delta \neq 0$.

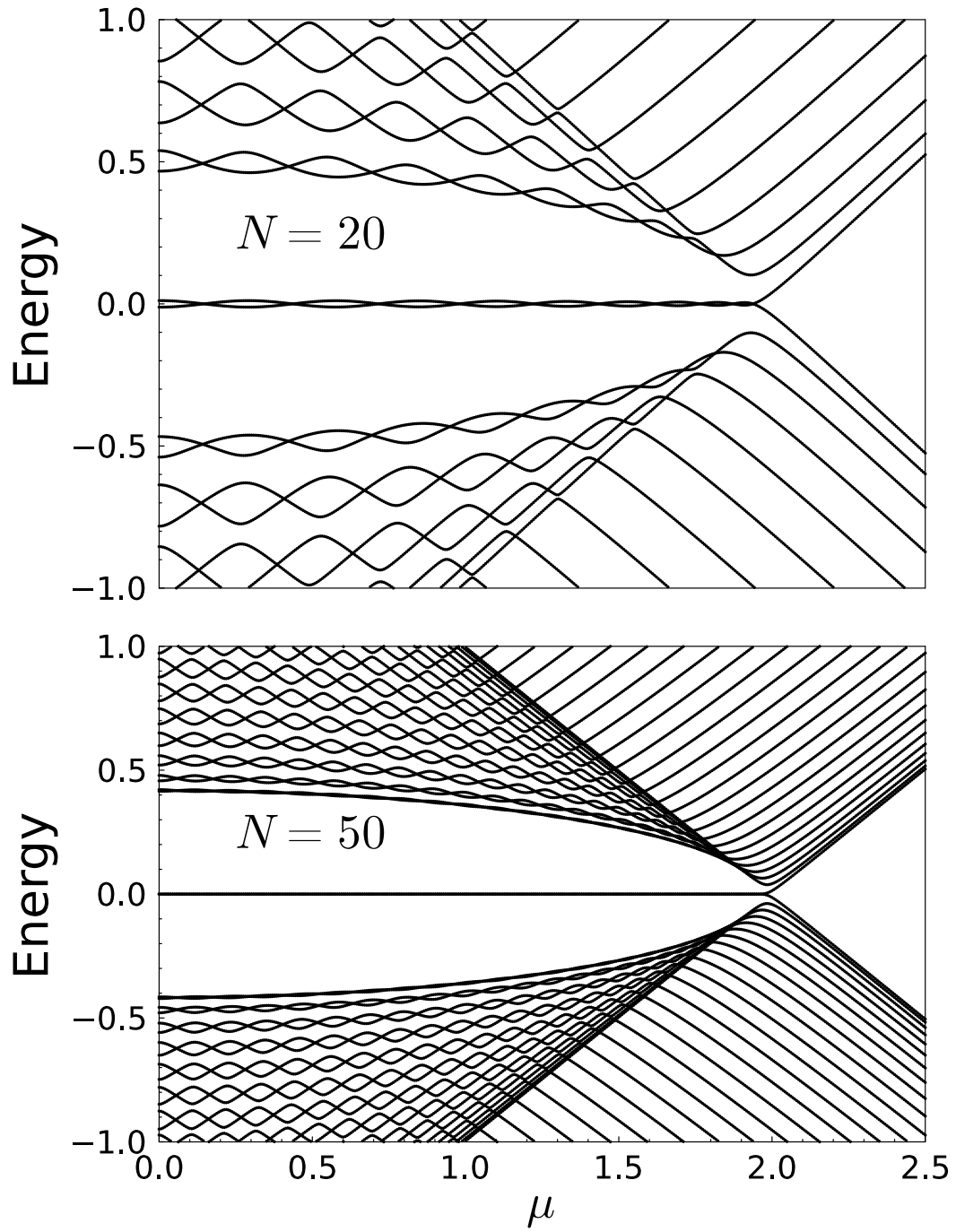


Figura 2.2: Espectro de energía en función del valor del potencial químico μ para una cadena de Kitaev de $N = 20$ y $N = 50$ sitios. Los otros parámetros usados para ambos son de $t = 1$ y $\Delta = 0.2$. Las dos energías más próximas a cero de energía corresponden a los MZMs ligeramente hibridizados.

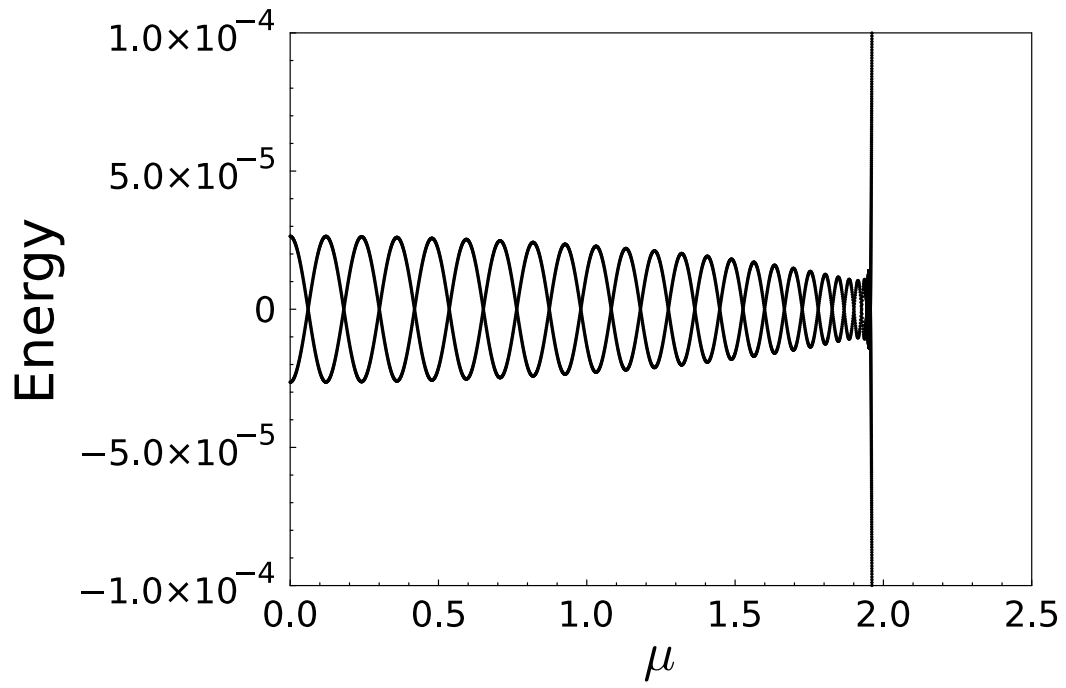


Figura 2.3: Acercamiento a la figura 2.2 para el caso de $N = 50$ para apreciar mejor el comportamiento de las energías correspondientes a los MZMs. Estas muestran una oscilación a través de todo el rango de valores de μ para el cual el sistema está en su fase topológica.

Capítulo 3

Modelo incluyendo el efecto de una repulsión coulombiana V

En contraste con el modelo de Ricco et alia, nosotros consideramos un hamiltoniano que no ignore estados de más alta energía. El porqué de esta decisión se discutirá más adelante pero crudamente se puede decir que estos estados de alta energía son esenciales para mantener la robustez de los MZMs. El modelo que se propone en la tesis es el de un nanocable unidimensional en el régimen de electrones sin espín acoplado en su de su extremo izquierdo con un punto cuántico. Existirá una probabilidad de salto entre el punto cuántico y el sitio más cercano a este en la cadena y un término de repulsión coulombiana entre los electrones de ambos sitios.

$$\begin{aligned} H = & \sum_{j=1}^{N-1} (-tc_{j+1}^\dagger c_j + \Delta c_{j+1}^\dagger c_j^\dagger + \text{H.c.}) - \mu \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j \\ & + \epsilon_d d^\dagger d - t'(d^\dagger c_1 + \text{H.c.}) \\ & + V \left(n_d - \frac{1}{2} \right) \left(n_1 - \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.1)$$

Los primeros dos términos del hamiltoniano describen a la cadena de Kitaev donde t es el hopping entre sitios, Δ el gap superconductor, y μ es potencial químico de la cadena. Los dos términos que siguen describen la energía del punto cuántico y el hopping entre el punto y el primer sitio de la cadena. Finalmente, El último término describe la repulsión coulombiana entre el punto cuántico y el primer sitio de la cadena.

Escogemos tratar el término de repulsión coulombiana en la aproximación Hartree-Fock no restringida. Además de ser un enfoque razonable para tratar con el sistema, nos permite ciertas facilidades computacionales.

La estrategia es aplicar el mapeo de la sección 1.3 pero a nuestro hamiltoniano. Se aplicó el mapeo ya en la cadena de Kitaev en (2.7) así que queda hacer el mapeo de términos que incluyan operadores del punto cuántico. Nos concentramos en el término

de interacción $V(n_d - \frac{1}{2})(n_1 - \frac{1}{2})$. En su forma de Hartree-Fock irrestricto luce como

$$\begin{aligned} n_d n_1 \simeq & \langle n_d \rangle n_1 + n_d \langle n_1 \rangle - \langle n_d \rangle \langle n_1 \rangle \\ & - \langle d^\dagger c_1 \rangle c_1^\dagger d - d^\dagger c_1 \langle c_1^\dagger d \rangle + \langle d^\dagger c_1 \rangle \langle c_1^\dagger d \rangle \\ & + \langle d^\dagger c_1^\dagger \rangle c_1 d + d^\dagger c_1^\dagger \langle c_1 d \rangle - \langle d^\dagger c_1^\dagger \rangle \langle c_1 d \rangle. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Para derivar los elementos de matriz del hamiltoniano iremos por partes, primero tratanto la cadena sola, y luego cada término del desacople por separado para saber de dónde viene cada parte. Los elementos de matriz de la cadena ya pueden ser calculados a partir de la ecuación (2.7). Entonces lo que queda calcular son los elementos de matriz que tengan que ver con el punto cuántico, es decir, el número de ocupación del punto, término de hopping y el término de repulsión.

$$\begin{aligned} \langle d, c | \tilde{H} | d, c \rangle &= \epsilon_d + V \langle n_1 \rangle & \langle d, a | \tilde{H} | d, a \rangle &= -\epsilon_d - V \langle n_1 \rangle \\ \langle 1, c | \tilde{H} | d, c \rangle &= -t' - V \langle c_d^\dagger c_1 \rangle & \langle 1, a | \tilde{H} | d, a \rangle &= t' + V \langle c_d^\dagger c_1 \rangle \\ \langle d, c | \tilde{H} | 1, a \rangle &= -V \langle c_d^\dagger c_1^\dagger \rangle & \langle d, a | \tilde{H} | 1, c \rangle &= V \langle c_d^\dagger c_1^\dagger \rangle \\ \langle 1, c | \tilde{H} | 1, c \rangle &= \dots + V \langle n_d \rangle & \langle 1, a | \tilde{H} | 1, a \rangle &= \dots - V \langle n_d \rangle \end{aligned} \quad (3.3)$$

Una vez que ya sabemos las dependencias de los elementos de matriz debemos diagonalizar \tilde{H} y hallar los valores de expectación de forma autoconsistente. Esto se calcula en la siguiente subsección.

Muchas de las referencias trabajan cambiando no el potencial químico pero sí la energía de ocupación del punto cuántico (que experimentalmente se puede cambiar con un potencial de compuerta) lo que se adopta también en esta tesis. Sacamos los perfiles de baja energía cambiando los valores de ϵ_d . Estos se explicarán más a fondo en la siguientes secciones haciendo una comparación con el paper de Ricco *et alia*, pero a grandes razgos en la figura 3.2 donde se pueden apreciar los MZMs que son aquellos estados que se encuentran cercanos a una energía cero, y el efecto que tiene el punto cuántico en los estados de más alta energía en la cadena en, particular que ocurre cerca a $\epsilon_d = 0$.

3.1. Valores de expectación y cálculos

Ya que buscamos diagonalizar el hamiltoniano, lo que en escencia necesitamos calcular son los estados γ_ν tal que $[H, \gamma_\nu^\dagger] = E_\nu \gamma_\nu^\dagger$. Si recordamos las ecuaciones 2.3 y 2.4, lo que esto nos quiere decir en términos de kets es que $|\gamma, c\rangle$ será uno de los autoestados de \tilde{H} . Usando el enfoque de BCS haremos un cambio de base y pasaremos de

operadores c_i a γ_ν donde existe una forma de definir c en terminos de γ y viceversa

$$\begin{aligned} c_i^\dagger &= \sum_{\nu'} \left(\bar{D}_{i\nu'} \gamma_{\nu'}^\dagger + \bar{E}_{i\nu'} \gamma_{\nu'} \right) \\ c_i &= \sum_{\nu'} \left(D_{i\nu'} \gamma_{\nu'} + E_{i\nu'} \gamma_{\nu'}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Asímismo los γ_ν en general tendrán la forma:

$$\begin{aligned} \gamma_\nu^\dagger &= \sum_i \left(\bar{A}_{i\nu} c_i^\dagger + \bar{B}_{i\nu} c_i \right) \\ \gamma_\nu &= \sum_i \left(A_{i\nu} c_i + B_{i\nu} c_i^\dagger \right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Para relacionar γ_ν y c_i a través de las matrices A , B , C , y D , calculamos sus relaciones de conmutación primero dejando el segundo operador fijo, mientras que el otro lo expresamos usando las ecuaciones de arriba.

$$\{\gamma_\nu^\dagger, c_j\} = \left\{ \sum_i \bar{A}_{\nu i} c_i^\dagger + \bar{B}_{\nu i} c_i, c_j \right\} = \left\{ \sum_i \bar{A}_{\nu i} c_i^\dagger, c_j \right\} = \bar{A}_{\nu j}, \quad (3.6)$$

ahora si deajo fijo el operador de γ_ν

$$\{\gamma_\nu^\dagger, c_j\} = \left\{ \sum_i D_{i\nu} \gamma_i + E_{i\nu} \gamma_i^\dagger \right\} = \left\{ \gamma_\nu^\dagger, \sum_i D_{i\nu} \gamma_i^\dagger \right\} = D_{i\nu}. \quad (3.7)$$

Si realizamos el mismo cálculo para el anticonmutador $\{\gamma_\nu, c_i\}$ se obtiene que $E_{i\nu} = B_{\nu i}$.

$$\bar{A} = D, \quad E = B \quad (3.8)$$

Una vez diagonalizado computacionalmente \tilde{H} , conocemos A y B , por lo tanto por la ecuación (3.8) llegamos a saber también los valores de $E_{i\nu}$ como $D_{i\nu}$. Como ya hemos mencionado, los operadores γ_ν^\dagger y γ_ν se identifican como a los autoestados de \tilde{H} , donde γ_ν^\dagger corresponde a los a los autoestados con energía E_ν positiva y γ_ν con los de energía negativa. Esto se puede derivar del método de mapeo expuesto y que $[H, \gamma_\nu^\dagger] = E_\nu \gamma_\nu^\dagger \Rightarrow [H, \gamma_\nu] = -E_\nu \gamma_\nu$.

Como ejemplo del cálculo del valor de expectación tomamos $\langle c_j^\dagger c_i \rangle$. Al conocer la expresión de c_i^\dagger y c_i en términos de los γ_ν y γ_ν^\dagger , y las matrices $D_{i\nu}$ y $E_{i\nu}$ luego de la diagonalización, queda reemplazar (3.4) y evaluarlos en su estado fundamental correspondiente. Cabe recordar que el estado fundamental en el espacio de operadores γ_ν está dado por

$$|g\rangle = \prod \gamma_\nu |0\rangle \quad (3.9)$$

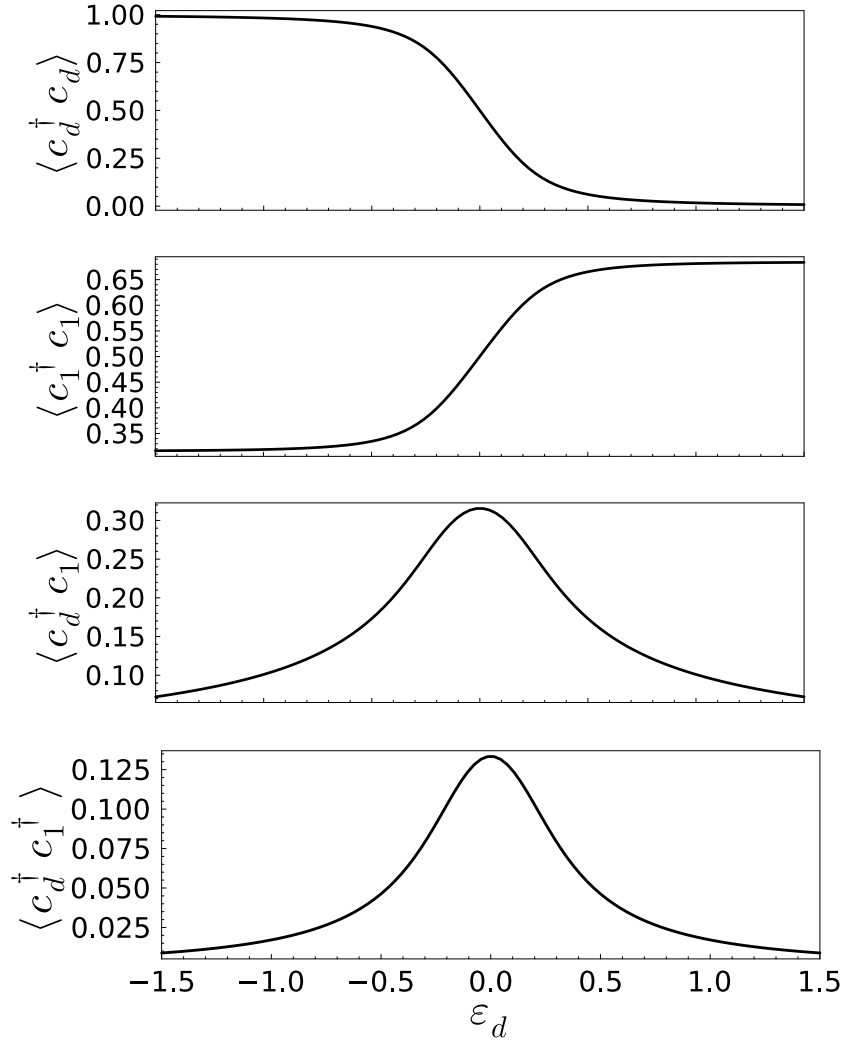


Figura 3.1: Valores de expectación. (a) Ocupación del punto cuántico. (b) Ocupación del primer sitio de la cadena de Kitaev. (c) Salto entre el punto cuántico y el primer sitio de la cadena de Kitaev. (d) Par de Cooper con fermiones del sitio d y el sitio 1

Calculamos $\langle c_j^\dagger c_i \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle c_j^\dagger c_i \rangle &= \langle g | \left(\sum_{\nu'} \left(\bar{D}_{i\nu'} \gamma_{\nu'}^\dagger + \bar{E}_{i\nu'} \gamma_{\nu'} \right) \right) \left(\sum_{\nu'} \left(D_{i\nu'} \gamma_{\nu'} + E_{i\nu'} \gamma_{\nu'}^\dagger \right) \right) | g \rangle \\
 &= \langle 0 |_\gamma \sum_{\nu\nu'} \bar{D}_{i\nu'} D_{i\nu'} \gamma_{\nu'}^\dagger \gamma_\nu + \bar{D}_{i\nu'} E_{i\nu'} \gamma_{\nu'}^\dagger \gamma_\nu^\dagger + \bar{E}_{i\nu'} D_{i\nu'} \gamma_{\nu'} \gamma_\nu + \bar{E}_{i\nu'} E_{i\nu'} \gamma_{\nu'} \gamma_\nu^\dagger | 0 \rangle_\gamma \\
 &= \sum_{\nu\nu'} \langle 0 |_\gamma \bar{E}_{i\nu'} E_{i\nu'} \gamma_{\nu'} \gamma_\nu^\dagger | 0 \rangle_\gamma \\
 &= \sum_{\nu} \bar{E}_{j\nu} E_{i\nu}
 \end{aligned} \tag{3.10}$$

Asimismo calculamos los otros valores de expectación necesarios para completar valores

en el hamiltoniano una vez el método Hartree-Fock es aplicado.

$$\langle c_j^\dagger c_i \rangle = \sum_{\nu} \bar{E}_{j\nu} E_{i\nu}, \quad \langle c_j^\dagger c_i^\dagger \rangle = \sum_{\nu} \bar{E}_{j\nu} \bar{D}_{i\nu} \quad (3.11)$$

Los demás valores de expectación salen de la relación $\langle AB \rangle = \overline{\langle B^\dagger a^\dagger \rangle}$. En la figura 3.1 se presentan los valores de expectación como función de la energía de ocupación del punto cuántico. En la figura 3.1(a), cuando $\epsilon_d < 0$, se observa que la ocupación del punto cuántico es > 0.5 y para ϵ_d más grande en magnitud que t' , $|\epsilon_d| \gg t'$, se nota una ocupación cerca de 1. Si hemos de encontrar un electrón en el punto cuántico este impone una repulsión coulombiana en sitio adyacente a este, o sea en el sitio 1. Esta correlación se hace notar en la figura 3.1(b) ya que para $\epsilon_d < 0$ el valor de expectación de la ocupación del primer sitio de la cadena $\langle c_1^\dagger c_1 \rangle < 0.5$.

Para entender cómo cambian los valores de expectación del hopping $\langle c_d^\dagger c_1 \rangle$ en la figura 3.1 es útil pensar en el modelo de la molécula diatómica heteronuclear con un solo orbital. En nuestro contexto, uno de los átomos corresponde al punto cuántico y el otro al primer sitio de la cadena. Este modelo tiene un hamiltoniano de la forma

$$H = \epsilon_d d^\dagger d + \epsilon_c c^\dagger c - t'(d^\dagger c + c^\dagger d). \quad (3.12)$$

donde el operador d corresponde al punto cuántico y c al sitio del extremo izquierdo de la cadena. Su estado fundamental luce como $|g\rangle = (\alpha d^\dagger + \beta c^\dagger) |0\rangle$, donde se debe cumplir la normalización $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Si, por ejemplo, calculamos el valor de expectación para el hopping de electrones entre las moléculas tendremos

$$\begin{aligned} \langle g | c^\dagger d | g \rangle &= \langle 0 | (\alpha d + \beta c) (c^\dagger d) (\alpha d^\dagger + \beta c^\dagger) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \beta \alpha | 0 \rangle \\ &= \beta \alpha \end{aligned} \quad (3.13)$$

De la misma manera calculamos

$$\langle d^\dagger d \rangle = \alpha^2, \quad \langle c^\dagger c \rangle = \beta^2, \quad \langle c^\dagger d \rangle = \beta \alpha \quad (3.14)$$

Para comprobar que este modelo sigue de forma cualitativa el mismo comportamiento que los valores de expectación de la figura 3.1, tomamos como un valor de prueba $\alpha^2 = 0.5$ que corresponde al valor de expectación de la ocupación del punto cuántico cuando $\epsilon_d = 0$. Incluyendo este valor en los valores de expectación del modelo de la molécula diatómica obtenemos:

$$\langle d^\dagger d \rangle = 0.5, \quad \langle c^\dagger c \rangle = 0.5, \quad \langle c^\dagger d \rangle = 0.38 \quad (3.15)$$

Estos valores van de acuerdo con los valores de expectación de la figura 3.1 para el modelo de punto cuántico acoplado a la cadena cuando $\epsilon_d = 0$. Se espera que las ecuaciones (3.14) correspondan de forma aproximada a los valores de expectación del modelo de la tesis (3.1) para cualquier valor de α en el rango de valores que toma el valor de expectación $\langle c_d^\dagger c_d \rangle$ en la figura 3.1.

3.2. Discusión de la hipótesis de Ricco *et alia*

Recordemos que Ricco *et alia* presentan un término de repulsión de la forma

$$Un_d n_f = \frac{1}{2} Un_d \left(i\gamma_R \gamma_L + \frac{1}{2} \right). \quad (3.16)$$

Afirman que el modelo que usan es uno efectivo a bajas energías. Es decir, en principio el término de repulsión considerando todo el rango de energías es uno donde el acople es con toda la cadena

$$Un_d n_\omega = Un_d \left(\sum_i c_i^\dagger c_i \right) \quad (3.17)$$

donde n_ω significa el número de ocupación del cable (*wire*). Queremos indagar qué exactamente están dejando de lado y cómo eso puede afectar al espectro de energías y a la hibridización de los MZMs. Vimos en las ecuaciones (3.5) y (3.4) que cuando diagonalizamos \tilde{H} obtenemos las expresiones de los estados γ_ν^\dagger en relación a los operadores originales c_i^\dagger y c_i . Reemplazamos estos en la expresión de repulsión coulombiana de Ricco *et alia* 3.17. Trabajamos solo n_ω :

$$\begin{aligned} \sum_i c_i^\dagger c_j &= \sum_i \left[\sum_{\nu'} (\overline{D}_{i\nu'} \gamma_{\nu'}^\dagger + \overline{E}_{i\nu'} \gamma_{\nu'}) \right] \left[\sum_{\nu''} (D_{i\nu''} \gamma_{\nu''} + E_{i\nu''} \gamma_{\nu''}^\dagger) \right] \\ &= \sum_{i\nu'\nu''} \left[\overline{D}_{i\nu'} D_{i\nu''} \gamma_{\nu'}^\dagger \gamma_{\nu''} + \overline{D}_{i\nu'} E_{i\nu''} \gamma_{\nu'}^\dagger \gamma_{\nu''}^\dagger \right. \\ &\quad \left. + \overline{E}_{i\nu'} D_{i\nu''} \gamma_{\nu'} \gamma_{\nu''} + \overline{E}_{i\nu'} E_{i\nu''} \gamma_{\nu'} \gamma_{\nu''}^\dagger \right] \end{aligned} \quad (3.18)$$

Ahora digamos que f^\dagger es el operador entre los γ_ν^\dagger correspondiente al estado con más baja energía positiva. Sabemos que habrá uno solo de estos porque estamos en el contexto de un sistema de la cadena de Kitaev en su fase topológica. Luego, el número de ocupación lo separamos entre términos que son acompañados por f^\dagger o f y el resto

de estados que sabemos que son de energías mayores.

$$\begin{aligned}
&= \sum_i \bar{D}_{iv_f} D_{iv_f} f^\dagger f + \bar{E}_{iv_f} E_{iv_f} f f^\dagger \\
&+ \sum_i \sum_\nu \left[\bar{D}_{iv_f} D_{iv_f} f^\dagger \gamma_\nu + \bar{D}_{iv_f} E_{iv_f} f^\dagger \gamma_\nu^\dagger \right. \\
&+ \left. \bar{E}_{iv_f} D_{iv_f} f \gamma_\nu + \bar{E}_{iv_f} E_{iv_f} f \gamma_\nu^\dagger \right] \\
&+ \dots
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Como estamos interesados estrictamente en bajas energías nos quedamos con los términos parecidos a $f^\dagger f$ y $f f^\dagger$

$$\begin{aligned}
&\sim \sum_i |D_{iv_f}|^2 f^\dagger f + |E_{iv_f}|^2 f f^\dagger \\
&\sum_i (|D_{iv_f}|^2 - |E_{iv_f}|^2) f^\dagger f + |E_{iv_f}|^2
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Una vez que tomamos las energías más bajas el operador de número queda como

$$\sum_i c_i^\dagger c_i \rightarrow \delta f^\dagger f + cte \tag{3.21}$$

donde f es el estado de más baja energía formado por los Majorana de los extremos de la cadena $f^\dagger = \gamma_L + i\gamma_R$. Reemplazando esto en el término de interacción de la ecuación (3.17) llegamos a lo propuesto por Ricco *et alia*, pero con un δ en general bastante menor a 1.

Por otro lado, ir a través de los detalles de las simplificaciones que tomaron nos deja entrever que quizás tomar un enfoque de hamiltoniano efectivo no es lo más apropiado ya que dejar de lado estados de más energía significaría evitar ciertas mezclas entre estados que podrían compensar la separación extra que implica $n_d n_f$. De hacer un campo medio restringido a este término nos da

$$\langle n_d \rangle n_f + \langle n_f \rangle n_d - \langle n_d \rangle \langle n_f \rangle \tag{3.22}$$

donde observamos que $n_f \langle n_d \rangle$ contribuye al término $\epsilon_M \gamma_L \gamma_R$ en (1.16). Podríamos pensar en la cadena aislada de Kitaev donde incluso moviendo el potencial químico seguiremos observando MZMs porque estos se acomodan al nuevo μ . Son distintos en forma a los MZMs anteriores pero aún presentan una energía cercana a cero.

En esta tesis presentamos un modelo más realista. Modelamos la repulsión como

$$H_V = n_d n_1 \tag{3.23}$$

el cual tratamos en la aproximación de Hartree-Fock irrestricto. Esta forma de modelar la difiere de la de Ricco *et alia* y suponemos que es más realista. Pensamos que es razonable que el papel que juega el Majorana del extremo derecho no será muy importante ya que a más distancia menor es la repulsión coulombiana. Además, para tomar en cuenta estados de más alta energía, incluimos toda la cadena de Kitaev. Asimismo, permitimos que haya una probabilidad de salto t' de electrones entre el punto cuántico y el primer sitio.

3.3. Comparación de resultados con el nuevo modelo

Los resultados que se presentan en esta sección refuerzan y extienden lo ya mencionado en la sección de anterior ya que a través de simulaciones del espectro de energía del sistema y variando el parámetro de la energía de ocupación del punto cuántico ϵ_d se observa que en realidad los modos cero de Majorana son robustos ante la presencia de la repulsión coulombiana.

En la figura 3.2, se muestra el espectro de bajas energías del modelo usado en la tesis para el caso de una cadena de $N = 20$ sitios, $\mu = 0$, $\Delta = 0.2$, $t = 1$ y $t' = 0.2$. Estos perfiles están dados con respecto a cómo va cambiando el nivel de energía del punto cuántico. Para estudiar cómo el término de repulsion interatómica afecta al sistema analizamos los casos en los que $V = 0$ y $V = 1$. Para el caso de $V = 0$ vemos que los MZMs poseen una forma de moño y existe una brecha de energía relevante entre ellos y estados de más alta energía. El sistema también fue analizado en una cadena de $N = 50$ sitios pero por conveniencia para apreciar más los MZMs nos quedaremos con el caso de 20 (por ahora) ya que sabemos que la separación de los MZMs decae exponencialmente con la longitud de la cadena. Ahora bien, al prender el término de repulsion coulombiana, $V = 1$, y si uno siguiera el trabajo de Ricco et alia uno esperaría observar un separación mayor en las energías de los MZMs, pero lo que se ve en la figura 3.2 cuando $V = 1$ es que los MZMs siguen ahí y, en todo caso, la separación se hace menor. Es decir, no solo son robustos ante la perturbación que V impone en el sistema, sino que cuando la repulsión está presente los vuelve más robustos.

En la figura 3.2, también notamos que para valores cercanos a $\epsilon_d = 0$ existe una deformación en la forma del espectro de energías. Si recordamos el espectro de energías para una cadena de Kitaev aislada para $\mu = 0$ en la figura 2.2, notamos que hay dos energías simétricas ~ 0.4 y ~ -0.4 para una cadena de $N = 20$ sitios. Estas corresponderían (aproximadamente) a las que observamos para un $|\epsilon_d| \geq 0.5$ en la figura 3.2. Para $|\epsilon_d| \leq 0.5$ nos preguntamos qué está causando la deformación y una explicación

es dada por el modelo de la molécula diatómica heteronuclear que, recordemos, trata de modelar lo que pasa solo entre el punto cuántico y el primer sitio de la cadena. Tomamos de nuevo el hamiltoniano (3.12) con $\epsilon_c = 0$ y computamos su espectro de energías en función de ϵ_d las autoenergías con

$$E_m = \frac{1}{2}[(\epsilon_d + \epsilon_c) \pm \sqrt{(\epsilon_d - \epsilon_c)^2 + 4t^2}] \quad (3.24)$$

Para valores grandes de $|\epsilon_d|$, $E_m \sim 0, \epsilon_d$ y para $\epsilon_d = 0$, $|E_m| \sim t$. En la figura 3.2 se ven las energías que corresponden aproximadamente a $\pm E_m$ cuando E_m está lejos del cero. Estos estados se llegan a hibridizar con los de la cadena de Kitaev aislada dando lugar a los cruces que se ven en la figura 3.2. Para $\epsilon_d = 0$ vemos estados con energía $\pm t'$ que corresponde al *hopping* entre d y c_1 .

Otro punto es que estos cruces se ven afectados por el término de repulsión coulombiana. En el modelo presentado en la tesis, una vez que realizamos la aproximación irrestrica de Hartree-Fock, aparecen términos que van a modificar el *hopping* entre el punto cuántico y la cadena. Es razonable, entonces, pensar que el término efectivo del *hopping* resultante es la explicación de por qué para el caso donde $V = 1$ los valores de energía absoluta más baja, fuera de los MZMs, correspondientes a los estados hibridizados con la cadena llegar a pasar de valores absolutos $t' = 0.2$, para el caso de $V = 0$, a energías $t'_{eff} \sim 0.5$.

Sin embargo, a través de todo eso, los MZMs se ven poco afectados y permaneces cercanos a cero para todo el rango de valores de ϵ_d .

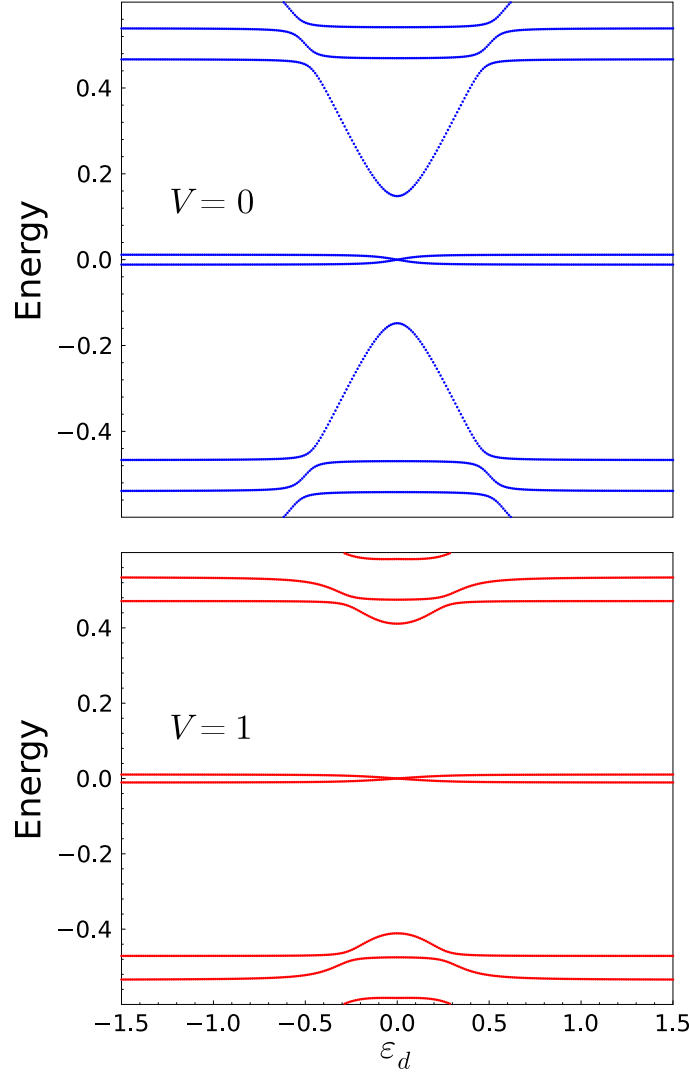


Figura 3.2: Espectro de energías en función de ϵ_d para una cadena de $N = 20$ sitios con parámetros $\Delta = 0.2$, $t = 1$, $t' = 0.2$ y $\mu = 0$. La figura superior muestra el espectro de energías para cuando el término de repulsión es $V = 0$, y la inferior para $V = 1$.

En las figuras 3.3 para el caso de $N = 50$ el nivel de robustez es mayor tal como se mencionó ya que vemos que para el caso de $N = 20$ la separación de los MZMs tenía un tamaño de $\delta = 0.02$ mientras que para esta cadena más grande es de $\delta = 4.1 \times 10^{-5}$.

Para una cadena de $N = 50$, $t = 1$ y $\Delta = t' = 0.2$ analizamos de cerca el efecto que tiene la repulsión y el cambiar el potencial químico de la cadena sobre los MZMs. La figura 3.3, donde el potencial químico es $\mu = 0$, curiosamente pasa lo opuesto a lo planteado por Ricco *et alia*. Es decir, que cuando prendemos el término de repulsión, este en realidad mejora, aunque sea un poco, la calidad de los MZMs. Los vuelve más cercanos a una energía cero. Por otro lado, en la figura inferior de 3.3, se trata con el caso de un potencial químico $\mu \neq 0$ que produce un perfil como el de un moño asimétrico consecuencia tanto de tener $\mu \neq 0$ y $V = 1$. Si no se tienen ambos entonces

el perfil sigue siendo el del moño simétrico.

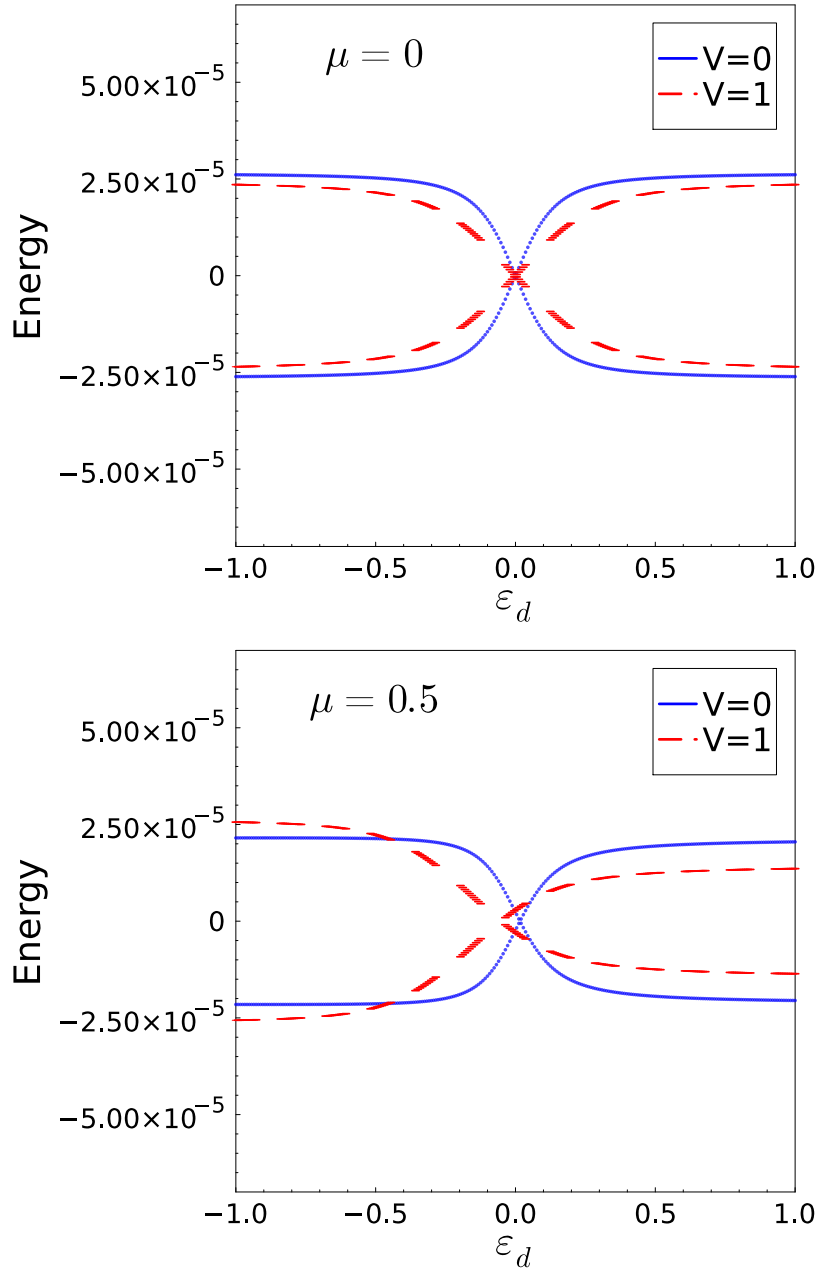


Figura 3.3: Comparación de las dos energías más cercanas a cero como función de ϵ_d entre $V = 0$ y $V = 1$ para distintos valores del potencial químico μ ($\mu = 0$ imagen superior y $\mu = 0.5$ imagen inferior) para una cadena de $N = 50$ sitios con parámetros de $\Delta = 0.2$, $t = 1$ y $t' = 0.2$.

Como habíamos mencionado en el argumento, una vez el hamiltoniano es diagonalizado, los nuevos operadores que diagonalizan el Hamiltoniano son en realidad una combinación lineal de los operadores fermionicos usados para escribir el H original. El autoestado de más baja energía con energía positiva (así como todos los demás) tiene

la forma

$$\gamma_\nu^\dagger = \sum_i \left(\bar{A}_{i\nu} c_i + \bar{B}_{i\nu} c_i^\dagger \right). \quad (3.25)$$

donde $E_\nu \approx 0$. Más explícitamente, para el operador de aniquilación:

$$\begin{aligned} \gamma_\nu &= A_{0\nu} d^\dagger + B_{0\nu} d \\ &+ A_{1\nu} c_1^\dagger + B_{1\nu} c_1 \\ &+ \dots \\ &+ A_{50\nu} c_{50}^\dagger + D_{50\nu} c_{50} \end{aligned} \quad (3.26)$$

Este autoestado, como se espera según la propuesta original de Kitaev, y a diferencia de los otros autoestados, debería tener entre sus coeficientes de mayor peso a los coeficientes que acompañan a los operadores de los extremos de la cadena que es precisamente lo que se ve en 3.4. La peculiaridad aquí es que a diferencia de la cadena de Kitaev, hay un peso relevante en el punto cuántico.

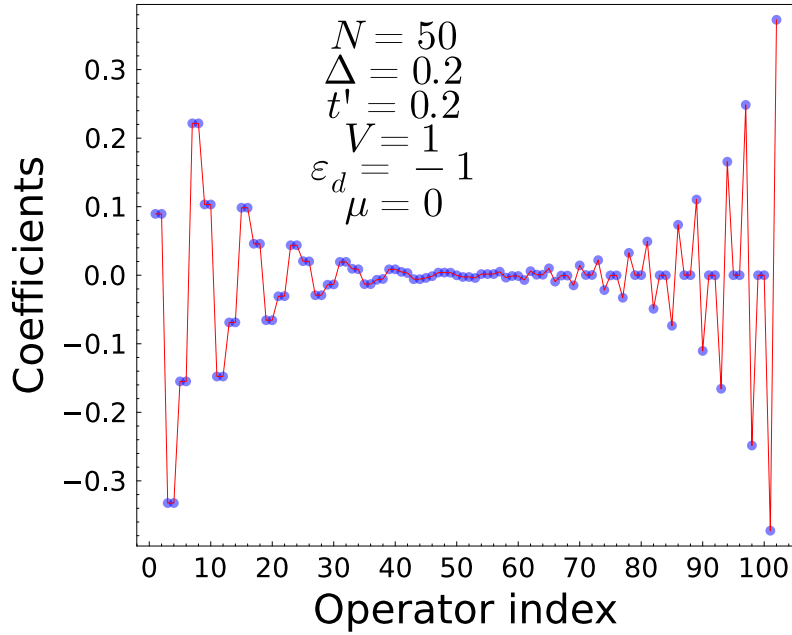


Figura 3.4: Coeficientes del estado de más baja energía. Los parámetros de la cadena son $N = 50$, $t = V$, $\Delta = t' = 0.2$, $\epsilon_d = -1$ y $\mu = 0$.

En la sección 1.3 se habló del modelo de Prada *et alia*. Los autores encontraron que para un cable largo ($L = 2 \mu\text{m}$) el espectro a bajas energías los MZMs están topológicamente protegidos, mientras que para un cable corto ($L = 400 \text{ nm}$) los MZMs formaban patrones de moño o diamante. Por lo tanto suena razonable el querer aplicar lo mismo en nuestro modelo y encontrar los mismos patrones que Prada *et alia* encontraron para el caso de la cadena corta. Con una relación de $\frac{1}{10}$, nosotros ahora pasamos de cadenas de un tamaño de $N = 50$ sitios, a ver sistemas de $N = 5$. Las imágenes

de la figura 3.5 muestran que para una cadena de $N = 5$ sitios obtenemos el mismo patrón de diamante que ellos.

Con los resultados anteriores sabíamos que al aumentarle la cantidad de sitios los MZMs solo se hacían más robustos porque cuanto más largo es el cable menos importa el efecto de repulsión. Por lo tanto, solo quedaba ver qué era lo que pasaba cuando teníamos cables muy cortos. Entonces, para el caso de cables cortos, el efecto de repulsión sí es relevante ya que si bien hay una separación de energías ya existente en la figura 3.5 para un $V = 0$, para $V = 1$ se ve que la separación de energías es muchísimo mayor al punto que podemos decir que estos ya no son MZMs, pues se encuentran muy alejados de una energía cero. La explicación para esto es que el cable cuántico al ser muy pequeño, favorece hibridación o mezcla de los Majoranas de energía cero, y, por consecuencia, la protección que ellos usualmente adquieren al estar cerca a cero se ve comprometida.

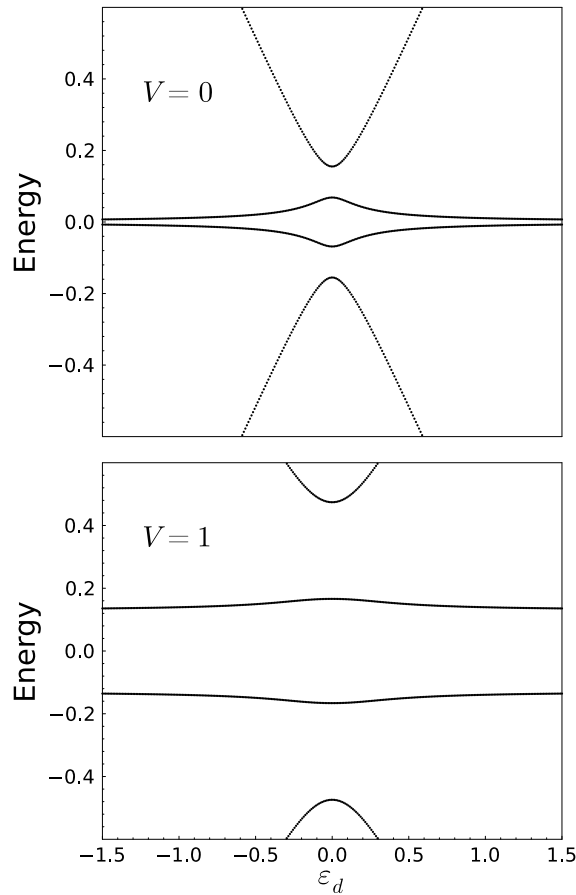


Figura 3.5: Espectro a bajas energías como función de ϵ_d para los casos $V = 0$ y $V = 1$. Los parámetros de la cadena son $N = 5$, $t = 1$, $\Delta = t' = 0.2$ y $\mu = 0$.

Capítulo 4

Conclusiones y discusión

Hemos resuelto un modelo para la cadena de Kitaev en una grilla conectada a un punto cuántico en uno de sus extremos por un término de *hopping* y una repulsión coulombiana entre el estado relevante del punto cuántico y el del extremo de la cadena. Repulsiones de rango corto se espera que sean importantes en heteroestructuras realistas de semiconductores-superconductores usadas para crear modos cero de Majorana, pero tratamientos teóricos estudiando los efectos de estas interacciones son raros.

Conforme es variada la energía del estado del punto cuántico, las energías de los dos autoestados del sistema cercanos a cero presentan una de dos formas características vistas en experimentos y teorías previas, señalando la presencia de modos cero de Majorana en los extremos de la cadena. En uno de ellos (forma de moño), las energías de los dos estados se cuando la energía del punto cuántico es cercana a la energía de Fermi. En este caso, el acoplamiento entre los MZMs es débil y analizando la función de onda de estos autoestados, uno ve que un MZM tiene un peso importante en el punto cuántico. Tratando la repulsión coulombiana en la aproximación irrestricta de Hartree-Fock, encontramos que esta repulsión no afecta esencialmente la calidad de los MZMs.

En contraste, en el otro caso, en el que las energías de los estados de más baja energía como función del nivel del punto tiene una forma de diamante, señalando un acoplamiento más fuerte entre los MZMs (cadenas cortas), el efecto de la repulsión coulombiana interatómica es una mayor división de los MZMs. Ya que en este caso, la repulsión del MZM en el lado opuesto de la cadena con el estado del punto es relevante, los resultados son consistentes con los de la referencia [18] los cuales indican, que la interacción entre partículas localizadas en sitios distantes juega un papel más destructivo que la interacción entre sitios vecinos más cercanos.

Pensamos que nuestras conclusiones son también validas para modelos más realistas de superconductores topológicos, tal como en referencias [19, 20], incluso incluyendo subbandas adicionales y el efecto orbital del campo magnético [21]. Si la forma de

diamante del espectro a bajas energías como función de la energía del punto es experimentalmente observados, como en la referencia [16], esto significa que los MZMs tienen una extensión significativa sobre todo el cable y la repulsión coulombiana en un extremo deteriora aún más la calidad de los Majorana. En cambio, la repulsión coulombiana en un extremo no afecta MZMs bien localizados característico de una forma de moño en el espectro.

Bibliografía

- [1] K. Takagui-Perez, A. A. Effect of interatomic repulsion on majorana zero modes in a coupled quantum-dot-superconducting-nanowire hybrid system, enviado a PRB. URL <https://arxiv.org/abs/2309.10888>. vii
- [2] Majorana, E. Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone. *Il Nuovo Cimento (1924-1942)*, **14**, 171–184, 1937. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:18973190>. 1
- [3] Wilczek, F. Quantum mechanics of fractional-spin particles. *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 957–959, Oct 1982. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.957>. 3
- [4] Nayak, C., Simon, S. H., Stern, A., Freedman, M., Das Sarma, S. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Rev. Mod. Phys.*, **80**, 1083–1159, Sep 2008. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.1083>. 3
- [5] Kitaev, A. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Annals of Physics*, **303** (1), 2–30, 2003. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491602000180>. 3, 4
- [6] Bravyi, S., Kitaev, A. Y. Fermionic quantum computation. 2000. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:16117019>. 3, 4
- [7] Freedman, M., Larsen, M., Wang, Z. A modular functor which is universal for quantum computation. *Communications in Mathematical Physics*, **227**, 02 2000. 4
- [8] Lancaster, T., Blundell, S. Quantum Field Theory for the Gifted Amateur. OUP Oxford, 2014. URL <https://books.google.com.ar/books?id=0rkVDAAAQBAJ>. 4
- [9] Zee, A. Quantum hall fluids, pág. 99–153. Springer Berlin Heidelberg. URL <http://dx.doi.org/10.1007/BFb0113369>. 4
- [10] *La Rivista del Nuovo Cimento*, **39** (7), 313–370, Jun 2016. URL <https://doi.org/10.1393/ncr/i2016-10125-3>. 4

- [11] Sau, J., Simon, S., Vishveshwara, S., Williams, J. From anyons to majoranas. *Nature Reviews Physics*, **2**, 1–2, 10 2020. 4
- [12] Kitaev, A. Y. Unpaired majorana fermions in quantum wires. *Physics-Uspekhi*, **44** (10S), 131, oct 2001. URL <https://dx.doi.org/10.1070/1063-7869/44/10S/S29>. 5
- [13] Prada, E., Aguado, R., San-Jose, P. Measuring majorana nonlocality and spin structure with a quantum dot. *Phys. Rev. B*, **96**, 085418, Aug 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.085418>. 7
- [14] Clarke, D. J. Experimentally accessible topological quality factor for wires with zero energy modes. *Phys. Rev. B*, **96**, 201109, Nov 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.201109>. 7
- [15] Ricco, L. S., Marques, Y., Sanches, J. E., Shelykh, I. A., Seridonio, A. C. Interaction induced hybridization of majorana zero modes in a coupled quantum-dot–superconducting-nanowire hybrid system. *Phys. Rev. B*, **102**, 165104, Oct 2020. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.165104>. 7
- [16] Deng, M.-T., Vaitiekėnas, S., Prada, E., San-Jose, P., Nygård, J., Krogstrup, P., *et al.* Nonlocality of majorana modes in hybrid nanowires. *Phys. Rev. B*, **98**, 085125, Aug 2018. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.085125>. 8, 32
- [17] Deng, M. T., Vaitiekėnas, S., Hansen, E. B., Danon, J., Leijnse, M., Flensberg, K., *et al.* Majorana bound state in a coupled quantum-dot hybrid-nanowire system. *Science*, **354** (6319), 1557–1562, 2016. URL <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aaf3961>. 8
- [18] Wieckowski, A., Ptok, A. Influence of long-range interaction on majorana zero modes. *Phys. Rev. B*, **100**, 144510, Oct 2019. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.144510>. 31
- [19] Lutchyn, R. M., Sau, J. D., Sarma, S. D. Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures. *Physical review letters*, **105** 7, 077001, 2010. URL <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:8863469>. 31
- [20] Oreg, Y., Refael, G., von Oppen, F. Helical liquids and majorana bound states in quantum wires. *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 177002, Oct 2010. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.177002>. 31

-
- [21] Aghaee, M., Akkala, A., Alam, Z., Ali, R., Alcaraz Ramirez, A., Andrzejczuk, M., *et al.* Inas-al hybrid devices passing the topological gap protocol. *Phys. Rev. B*, **107**, 245423, Jun 2023. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.107.245423>. 31

