

**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**

**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS**

DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA



**TRANSICIONES DE FASE TOPOLÓGICAS EN MATERIA  
CONDENSADA**  
DEL MODELO DE ISING A LA CADENA DE KITAEV

**Daniel Michel Pino González**

Máster en Física Teórica

Curso académico 2021–22

# Contents

<b>1</b>	<b>Topología en materia condensada</b>	<b>1</b>
1.1	Fases SPT y estados de borde . . . . .	1
1.2	Superconductores topológicos . . . . .	2
<b>2</b>	<b>De la teoría de Landau al orden topológico</b>	<b>2</b>
2.1	Fases de la materia y la teoría de Landau . . . . .	2
2.2	Orden topológico . . . . .	2
2.2.1	Degeneración topológica de estados fundamentales . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Del modelo de Ising clásico al modelo de Ising transverso</b>	<b>3</b>
3.1	Correspondencia entre los modelos de Ising clásico y cuántico . . . . .	3
3.2	El modelo de Ising transverso . . . . .	4
3.3	Fases cuánticas en el modelo de Ising transverso . . . . .	4
3.3.1	Fase cuántica paramagnética . . . . .	5
3.3.2	Fase cuántica ferromagnética . . . . .	5
3.4	Dualidad de Kramers–Wannier . . . . .	6
<b>4</b>	<b>Del modelo de Ising a la cadena de Kitaev</b>	<b>6</b>
4.1	Transformaciones de Jordan–Wigner . . . . .	7
4.2	Transformaciones de Bogoliubov . . . . .	8
4.3	<i>Majorana zero-modes</i> en la cadena de Kitaev . . . . .	9
<b>5</b>	<b>Inequivalencia física de los modelos de Ising y Kitaev</b>	<b>11</b>

# 1 Topología en materia condensada

La física del siglo XX centró sus esfuerzos en encontrar los elementos constituyentes de la materia, en buscar una “teoría del Todo” con la física de partículas como pilar fundamental. Sin embargo, esta visión reduccionista se vio invalidada con el cambio de paradigma que supusieron los materiales cuánticos. Esta nueva física de los fenómenos emergentes en sistemas colectivos viene a reclamar un papel igualmente esencial en la ciencia de hoy en día, centrándose en la comprensión de estas nuevas fases de la materia que se presentan ante nosotros. No en vano, la física de la materia condensada se sirve de los mismos conceptos formulados en la física de altas energías para su campo de estudio. Desde la introducción del concepto de cuasipartícula, que revolucionó nuestra forma de entender las propiedades de los materiales cuánticos, hoy en día su variedad supera a la de las partículas elementales del Modelo Estándar.

El concepto de emergencia describe las propiedades de los materiales a partir de la organización de sus átomos y electrones, no de la variedad de sus componentes. En este sentido, la teoría efectiva de campos de Landau dio una explicación fundamental de las fases de la materia basada en la dimensionalidad y las simetrías de parámetros de orden locales. Esto conllevó un gran éxito para clasificar dichas fases según el principio de ruptura espontánea de simetría. Sin embargo, la teoría de Landau se olvida precisamente de los efectos cuánticos, ya que está desarrollada para sistemas a temperaturas finitas.

Con el descubrimiento de nuevos fenómenos y materiales cuánticos, apareció una nueva clase de fases cuánticas –topológicas– que son cualitativamente diferentes a todos los estados de la materia conocidos. En este paradigma, los parámetros de orden de ruptura de simetría convencionales y las teorías de campos efectivas vienen a ser reemplazados por parámetros de orden topológicos y la teoría de campos topológica, aunque la completitud de su entendimiento está todavía muy lejos de alcanzarse.

Los estados y fases topológicas radican en la mecánica cuántica en tal medida que no poseen sistemas clásicos análogos. En este sentido, los parámetros de orden topológicos son propiedades de los estados fundamentales a temperatura cero, motivo por el cual la teoría de Landau no es aplicable.

Las fases topológicas ordenadas de la materia se caracterizan por propiedades que son invariantes bajo perturbaciones locales arbitrarias, por lo que no necesitan de simetrías globales del sistema. En presencia de una simetría, es posible que dos fases de la materia sean diferentes pero, sin ella, equivalentes entre sí. Si existe una fase –con gap– topológicamente trivial en ausencia de simetría, se dice que es una fase topológica simétricamente protegida (SPT, por sus siglas en inglés). Por el contrario, si la fase con gap es topológicamente no trivial cuando todas las simetrías han sufrido una ruptura, se la conoce como fase topológica simétricamente enriquecida (SET, del inglés).

## 1.1 Fases SPT y estados de borde

Una fase SPT es un tipo de fase de la materia a temperatura cero caracterizada por la presencia de una simetría global. En este tipo de sistemas, las interacciones de espín-órbita abren un gap de energía en el *bulk* del sistema que garantiza un número impar de inversiones de bandas y, consecuentemente, cambia la topología de la función de onda.

En este sentido, los estados SPT se rigen por interacciones de corto alcance que sólo pueden albergar un orden topológico trivial, en contraste a las interacciones de largo alcance. Por ello, los estados de borde degenerados con topología no trivial que emergen en estas fases no pueden tener gap, ya que, de lo contrario, se debería producir una ruptura espontánea de simetría o del orden topológico.

Las fases SPT están caracterizadas por las siguientes propiedades:

- i) Distintas fases SPT con una simetría dada no pueden ser continuamente deformadas la una en la otra sin una transición de fase, si la deformación preserva la simetría.
- ii) Si la simetría se rompe durante la deformación, se puede realizar una transformación continua sin

transición de fase.

## 1.2 Superconductores topológicos

La idea de una partícula fermiónica que es precisamente su propia antipartícula ha sido un verdadero reto para los físicos durante generaciones. Estas exóticas partículas fueron hipotetizadas por Ettore Majorana, de quien obtienen su nombre. Si bien fueron postuladas y estudiadas para la física de altas energías, no fue hasta su introducción como cuasipartículas en ciertos sistemas de materia condensada que su detección se ha podido plantear como posible.

Entendidos como partículas fundamentales, los fermiones de Majorana son realmente fermiones. Sin embargo, su versión en materia condensada constituye la mitad de un fermión usual, es decir, un fermión ordinario es una superposición de dos modos de Majorana que pueden estar separados por distancias arbitrarias. Su particular estadística de aniones no abelianos y las cualidades topológicas de las fases que exhiben sitúan a estos modos de Majorana en el foco de atención de la computación cuántica.

Por otro lado, la superconductividad topológica inducida por proximidad es un fenómeno predicho en aislantes topológicos con interacción de espín-órbita. En ellos, el *bulk* posee un gap, mientras que albergan modos de borde conductores sin gap. Las excitaciones de superficie en los superconductores topológicos son cuasipartículas de Bogoliubov, esto es, superposiciones coherentes de excitaciones electrón-hueco. Estos modos de Bogoliubov, en energía cero, tienen propiedades de cuasipartículas de Majorana y están protegidas por una simetría de paridad electrón-hueco. Estos materiales, al contrario que los aislantes topológicos, son raros, ya que requieren de un apareamiento superconductor no convencional para existir. Todas las propiedades topológicas de estos materiales pueden ser explicadas en términos de hamiltonianos de campo medio no interactuantes.

## 2 De la teoría de Landau al orden topológico

### 2.1 Fases de la materia y la teoría de Landau

La teoría de Landau de ruptura de simetría provee un estudio sistemático y general de las diferentes fases de orden que presentan los materiales. En este sentido, diferentes órdenes corresponden realmente con diferentes simetrías en la organización de las partículas constituyentes del sistema.

Si un sistema clásico con una simetría está en una fase de ruptura de simetría, entonces el estado fundamental degenerado (estados de mínima energía a temperatura cero) rompe dicha simetría. Por el contrario, el estado fundamental de la fase donde se preserva la simetría no estará degenerado.

El modelo de Ising transversal es un ejemplo paradigmático de este tipo de transiciones (véase sec. 3.3), ya que presenta una simetría  $\mathbb{Z}_2$  de volteo de espín  $|\uparrow\rangle \leftrightarrow |\downarrow\rangle$  que sufre una ruptura espontánea en la transición de su fase desordenada (paramagnética) a su fase ordenada (ferromagnética).

### 2.2 Orden topológico

El término de orden topológico viene motivado por la teoría efectiva de baja energía de estados de espín equirales, que es una teoría de Chern-Simons topológica de campos cuánticos.

En términos generales, la idea detrás del orden topológico es clasificar un sistema en función de un invariante topológico, esto es, no local. No se puede pasar entre las fases topológicamente trivial y no trivial sin provocar una transición de fase cuántica, esto es, un punto crítico para el cual el espectro de energía del sistema deviene sin gap.

En 1989, se conjuró una caracterización completa de este concepto, sirviéndose únicamente de dos propiedades topológicas:

- i) La degeneración topológica que presenta el estado fundamental del sistema, que depende únicamente de la topología del espacio de Hilbert.

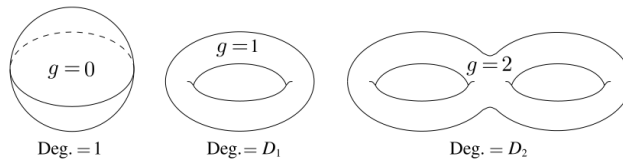


Figure 1: Dependencia de la degeneración del estado fundamental respecto al género  $g$  de las superficies bidimensionales cerradas que representan al espacio de Hilbert del sistema [1].

- ii) Las fases geométricas no abelianas de dicho estado fundamental degenerado bajo deformaciones continuas del espacio de Hilbert.

Nos centraremos en la primera de estas propiedades, que explica la degeneración del estado fundamental del modelo de Kitaev que da lugar a la aparición de modos de Majorana de energía cero (véase sec. 4.3).

### 2.2.1 Degeneración topológica de estados fundamentales

La degeneración topológica es un fenómeno presente en sistemas cuánticos de muchos cuerpos, donde el estado fundamental del sistema se convierte en degenerado en el límite de gran tamaño. Esta degeneración tiene las siguientes características:

- i) Para un sistema finito, la degeneración topológica no es exacta, y deviene exacta cuando el tamaño es infinito.
- ii) Es robusta bajo perturbaciones locales.
- iii) Suele ser diferente para distintos espacios topológicos. Por ejemplo, para un sistema topológicamente ordenado  $\mathbb{Z}_2$  en dos dimensiones, la degeneración es  $D_g = 4^g$  (véase fig. 1).

Aunque pueda parecerlo, la degeneración topológica no es debida a la simetría, ya que es robusta contra cualquier perturbación local que rompa todas las simetrías del sistema.

## 3 Del modelo de Ising clásico al modelo de Ising transversal

El modelo de Ising transversal (TFIM, *transverse field Ising model*) es el sistema más simple que exhibe transiciones de fase cuánticas a temperatura cero, debidas a fluctuaciones cuánticas emergentes de un campo transversal o un término de tunelamiento (*tunnelling term*). Estas fluctuaciones cuánticas (observables a muy bajas temperaturas y altas frecuencias) difieren en su naturaleza de las fluctuaciones térmicas. Sin embargo, ambas pueden provocar transiciones de fase de orden-desorden.

### 3.1 Correspondencia entre los modelos de Ising clásico y cuántico

Suele existir un mapa uno-a-uno de las transiciones de fase cuánticas a temperatura cero en  $D$  dimensiones sobre las transiciones de fase generadas térmicamente en su equivalente clásico  $(D + z)$ -dimensional, donde  $z$  es el exponente dinámico, por lo que se dice que ambos modelos pertenecen a la misma clase de universalidad.

En modelos que presentan transiciones de fase de orden-desorden, la estadística y la dinámica se mezclan entre sí y, debido al ajuste lineal de la energía con la longitud, el exponente dinámico  $z$

es siempre la unidad<sup>1</sup> para sistemas puros. Este hecho es responsable de la equivalencia entre los sistemas cuánticos  $D$ -dimensionales y los sistemas puros clásicos  $(D + 1)$ -dimensionales. el TFIM unidimensional emerge como un límite en la matriz de transferencia efectiva del modelo de Ising clásico e isotrópico sobre una malla cuadrada. De hecho, el hamiltoniano de la cadena unidimensional de Ising transversal describe de forma precisa los sistemas ferroeléctricos de orden-desorden.

En el TFIM, al contrario de lo que ocurre en otros modelos cuánticos (como el modelo de Heisenberg), las interacciones cooperativas están restringidas a una única componente del espín, y este sistema cooperativo está inmerso en un campo externo no conmutativo, que puede ser modificado para aumentar o decrecer el tunelamiento entre los diferentes autoestados del hamiltoniano cooperativo. Debido a esta modificación de las fluctuaciones cuánticas a través del campo transversal, emergen las diferentes fases del sistema de muchos cuerpos interactuantes.

### 3.2 El modelo de Ising transversal

De manera similar a la transición de fases que contiene el modelo de Ising bidimensional, se puede demostrar una auto-dualidad en el TFIM unidimensional de espín  $1/2$ , y por tanto identificar el punto crítico del tunelamiento que corresponde a la transición de fase ferromagnético-paramagnético que presenta.

Considérese el hamiltoniano cuántico de la cadena de Ising transversal,

$$\hat{H}_{\text{TFIM}} = -Jg \sum_i \hat{\sigma}_i^x - J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z, \quad (1)$$

donde  $g$  es un parámetro de acoplo,  $J$  es un prefactor de escala con dimensiones de energía y los operadores  $\hat{\sigma}_i^\alpha$  son matrices de Pauli definidas en el sitio  $i$  de la cadena. Estos operadores de espín cumplen las relaciones de conmutación del álgebra de Lie  $\mathfrak{su}(2)$ ,

$$[\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\beta] = 2i\delta_{ijk}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{\sigma}_k^\gamma, \quad \alpha = x, y, z. \quad (2)$$

A temperatura cero, el término de interacción ferromagnética  $\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z$  favorece el alineamiento de los espines ( $\uparrow\uparrow$  ó  $\downarrow\downarrow$ ), mientras que el término del campo  $\hat{\sigma}_i^x$  lleva a los espines a apuntar en la dirección del semieje  $x$  positivo ( $\rightarrow$ ). El sistema, por tanto, cambia entre una fase desordenada ( $g \gg 1$ ) y otra ordenada ( $g \ll 1$ ), según se modifique el parámetro de acoplo  $g$  del campo (véase sec. 3.3). El punto  $g = g_c = 1$  corresponde a un punto crítico<sup>2</sup> donde ninguna de las dos descripciones anteriores es válida.

### 3.3 Fases cuánticas en el modelo de Ising transversal

Se puede ver que el hamiltoniano del modelo de Ising transversal (1) es invariante bajo las transformaciones unitarias  $\hat{\zeta} = \prod_i \hat{\sigma}_i^x$ , que voltea todos los espines en la dirección  $z$ ,

$$\hat{\zeta}|\uparrow\uparrow\downarrow\cdots\rangle = |\downarrow\downarrow\uparrow\cdots\rangle, \quad \hat{\zeta}^2|\uparrow\uparrow\downarrow\cdots\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\cdots\rangle, \quad (3)$$

correspondiente a una simetría<sup>3</sup>  $\mathbb{Z}_2$  asociada a estas transformaciones.

A continuación, haremos una descripción de las diferentes fases que presenta el modelo bajo la modulación del parámetro de acoplo  $g$ , cuya transición viene modelada por una ruptura espontánea de esta simetría, tal y como predice la teoría de Landau.

La existencia de esta simetría genera una correspondencia uno-a-uno entre las fases cuánticas del TFIM y las fases de alta y baja temperatura del modelo de Ising clásico bidimensional equivalente (en cuyo caso  $g$  denota el inverso de la temperatura).

<sup>1</sup>No será así en cristales de espines a partir de una dimensión crítica  $D_c = 8$ , donde  $z = 2$ .

<sup>2</sup>Para un cálculo riguroso de este punto crítico véase sec. 3.4.

<sup>3</sup>En efecto, puesto que  $\hat{\zeta}^2 = 1$ ,  $\hat{\zeta}\hat{\sigma}_i^x\hat{\zeta} = \hat{\sigma}_i^x$ ,  $\hat{\zeta}\hat{\sigma}_i^z\hat{\zeta} = -\hat{\sigma}_i^z$ , tenemos  $[\hat{H}, \hat{\zeta}] = 0$ .

### 3.3.1 Fase cuántica paramagnética

Cuando  $g \gg 1$ , el hamiltoniano (1) puede aproximarse a

$$\hat{H}_{\text{TFIM}} \approx -Jg \sum_i \hat{\sigma}_i^x, \quad (4)$$

que posee un único estado fundamental,  $|\psi_0\rangle = |\rightarrow\rightarrow\rightarrow\cdots\rangle$ , por lo que preserva la simetría  $\mathbb{Z}_2$  de volteo de espín ( $\hat{\zeta}|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle$ ).

En este régimen, las excitaciones de cuasipartículas, que son  $N$  veces degeneradas (con  $N$  el número de espines de la cadena), corresponden a un volteo de espín en la dirección del semieje  $x$  negativo,

$$|\psi_i\rangle = |\cdots \rightarrow \underbrace{\leftarrow}_{\text{pos. } i} \rightarrow \cdots\rangle. \quad (5)$$

El término perturbativo  $\hat{V} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z$  mueve un volteo de espín a sus primeros vecinos,

$$\langle \psi_i | \hat{V} | \psi_j \rangle = -J(\delta_{j,i-1} + \delta_{j,i+1}), \quad (6)$$

y el hamiltoniano efectivo en la base de un espín volteado es

$$\hat{H}_{\text{eff}}|\psi_i\rangle = -J(|\psi_{i-1}\rangle + |\psi_{i+1}\rangle), \quad (7)$$

que se diagonaliza sobre la transformación de Fourier de dichos estados,

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikj} |\psi_j\rangle \quad \Rightarrow \quad (\hat{H}_{\text{eff}} - E_0)|\psi_k\rangle = 2J(g - \cos k)|\psi_k\rangle = \epsilon_k |\psi_k\rangle, \quad (8)$$

donde  $\epsilon_k$  es la energía de excitación de las cuasipartículas. En el límite de alta longitud de onda,  $\epsilon_k \approx \Delta_p + Jk^2$ , donde  $\Delta_p = 2J(g - 1)$  es el gap de energía del *bulk*.

### 3.3.2 Fase cuántica ferromagnética

En el límite  $g \rightarrow 0$ , el hamiltoniano (1) toma la forma

$$\hat{H}_{\text{TFIM}} \approx -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z. \quad (9)$$

Existen ahora dos estados fundamentales degenerados,

$$|\psi_\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\cdots\rangle, \quad |\psi_\downarrow\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\cdots\rangle, \quad (10)$$

que no son autoestados de  $\hat{\zeta}$  como en la fase paramagnética ( $\hat{\zeta}|\psi_{\uparrow\downarrow}\rangle = |\psi_{\downarrow\uparrow}\rangle$ ), aunque sí lo es la combinación lineal

$$|\psi_\pm\rangle = \frac{|\psi_\uparrow\rangle \pm |\psi_\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad \hat{\zeta}|\psi_\pm\rangle = \pm|\psi_\pm\rangle. \quad (11)$$

Por tanto, en esta fase ordenada el estado fundamental provoca una ruptura espontánea de la simetría  $\mathbb{Z}_2$  del sistema. Otro punto de vista viene del hecho de que la simetría  $\mathbb{Z}_2$  sólo posee representaciones unidimensionales que no pueden dar lugar a esta degeneración doble del estado fundamental.

Esta degeneración del estado fundamental se elimina en el  $N$ -ésimo término de teoría perturbativa, con  $\hat{V} = -Jg \sum_i \hat{\sigma}_i^x$ . Por otro lado, el hamiltoniano efectivo en la base  $\{|\psi_{\uparrow\downarrow}\rangle\}$  es

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} E_0 & g^N \\ g^N & E_0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Las excitaciones de cuasipartículas en esta fase son formaciones de fronteras de dominio

$$\phi_{i+\frac{1}{2}} = |\cdots \uparrow \underbrace{\uparrow}_{i} \vdots \underbrace{\downarrow}_{i+1} \downarrow \cdots \rangle, \quad (13)$$

que se presentan en parejas para respetar las condiciones de contorno periódicas del sistema. El término perturbativo  $\hat{V}$  se encarga de mover la frontera de dominio a los próximos vecinos. En esta fase, la energía de excitación de las cuasipartículas es  $\epsilon_k = 2J(1 - g \cos k) \approx \Delta_f + Jk^2$ , con un gap de energía  $\Delta_f = 2J(1 - g)$ .

### 3.4 Dualidad de Kramers–Wannier

De manera similar a la dualidad<sup>4</sup> del modelo de Ising bidimensional en una red cuadrada, existe una simetría de auto-dualidad involucrada en el TFIM, que nos permite estimar de forma exacta el punto crítico del campo transverso en que se da una transición de fase de segundo orden en la cadena de espín 1/2.

Para destapar esta simetría, basta con tomar una red dual asociada a la cadena original tal que los sitios de aquella corresponden con los enlaces de ésta y viceversa. Definimos los operadores de la cadena dual como

$$\hat{\tau}_{i+\frac{1}{2}}^x = \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z, \quad \hat{\tau}_{i+\frac{1}{2}}^z = \prod_{i+\frac{1}{2} \leq j} \hat{\sigma}_j^x, \quad (14)$$

Este mapa de dualidad representa una transformación de dualidad uno-a-uno no local. Es fácil ver que

$$\hat{\tau}_{i+\frac{1}{2}}^x = \begin{cases} -1 & \text{si existe una frontera de dominio en el enlace } i + \frac{1}{2}, \\ +1 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (15)$$

por lo que indica si los espines de la cadena original están o no alineados, mientras que  $\hat{\tau}_{i+\frac{1}{2}}^z$  crea una frontera de dominio volteando todos los espines a la derecha de la posición  $i + 1/2$ . En términos de estos operadores, el hamiltoniano (1) toma la forma

$$\hat{H}_{\text{TFIM}} = -J \sum_j \hat{\tau}_j^x - Jg \sum_{\langle jk \rangle} \hat{\tau}_j^z \hat{\tau}_k^z, \quad j, k = i + 1/2, \quad (16)$$

esto es, el mismo hamiltoniano pero con diferente acoplo ( $J \leftrightarrow Jg$ ). En efecto, la fase ferromagnética de la cadena original corresponde a la fase paramagnética<sup>5</sup> de la cadena dual y viceversa. La suposición de la existencia de un único punto crítico común a ambas cadenas y la auto-dualidad del modelo implican  $g_c = 1$ .

## 4 Del modelo de Ising a la cadena de Kitaev

Para reescribir las variables de espín como variables fermiónicas, utilizaremos una transformación inversa de Jordan–Wigner, que nos permitirá trazar un mapa del modelo de Ising transverso sobre un sistema de fermiones sin espín. Esto implica reformular las matrices de Pauli de forma que actúen como operadores de creación y destrucción. Sin embargo, cabe una consideración: el operador número

<sup>4</sup>En efecto, se puede probar [2] que existe un mapa de dualidad que muestra una simetría especial entre las fases de alta y baja temperatura de este modelo, a partir del cual se puede derivar el punto crítico de transición bajo la única suposición de que éste es único.

<sup>5</sup>Véase que, puesto que el estado fundamental de la fase paramagnética en representación  $\tau$  es único y el de la fase ferromagnética en representación  $\sigma$  es degenerado, la transformación de dualidad definida es, en realidad, un mapa dos-a-uno. En efecto, los estados  $|\uparrow\uparrow\vdots\downarrow\downarrow\cdots\rangle$  y  $|\downarrow\downarrow\vdots\uparrow\uparrow\cdots\rangle$  se mapean sobre un único operador de frontera de dominio en la representación  $\tau$ .



no conmuta con el hamiltoniano, si bien éste es cuadrático (sin interacciones), por lo que podemos diagonalizarlo por medio de una transformación de Bogoliubov, que resolverá el problema para poder estudiar las propiedades en *bulk* del sistema.

#### 4.1 Transformaciones de Jordan–Wigner

Definimos los operadores de subida y bajada sobre una cadena de Ising como

$$\hat{\sigma}_i^\pm = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_i^x \pm i\hat{\sigma}_i^y), \quad (17)$$

tales que satisfacen un conjunto mixto de relaciones de conmutación (conmutan en diferentes posiciones y anticonmutan en la misma posición). Estos operadores voltean los espines cuando actúan sobre ellos, esto es,

$$\hat{\sigma}^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \quad \hat{\sigma}^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle. \quad (18)$$

Ahora, definimos el estado de espín hacia arriba  $|\uparrow\rangle$  como un hueco y el de espín hacia abajo  $|\downarrow\rangle$  como una partícula, en busca de poder identificar estos operadores como de creación y destrucción,

$$\hat{\sigma}^- \rightarrow \hat{c}^\dagger, \quad \hat{\sigma}^+ \rightarrow \hat{c}, \quad (19)$$

a los cuales son isomorfos. De esta forma, los operadores  $\{\hat{\sigma}_i^\pm, \hat{\sigma}_i^z\}$  forman un conjunto generador de un álgebra de Lie complejificada  $\mathfrak{su}(2) \oplus i\mathfrak{su}(2) = \mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ , isomorfa a  $\mathfrak{su}(2)$ .

Puesto que un espín sólo puede ser volteado una única vez,  $\hat{\sigma}^-(\hat{\sigma}^-|\uparrow\rangle) = 0$ , puede ser interpretado como un bosón duro<sup>6</sup>.

Sin embargo, para obtener una representación verdaderamente fermiónica, deberemos aplicar una transformación de Jordan–Wigner, que recupera sus relaciones de anticonmutación propias a partir de los operadores de espín,

$$\hat{c}_i = \prod_{j<i} (\hat{\sigma}_j^z) \hat{\sigma}_i^+, \quad \hat{c}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i^- \prod_{j<i} (\hat{\sigma}_j^z), \quad (20)$$

donde  $\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$  denota el operador número de fermiones.

Se puede verificar de forma sencilla que  $\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij}$  y  $\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0$ . Estas relaciones de anticonmutación están debidas a la presencia del factor no local<sup>7</sup>  $\prod_{j<i} (\hat{\sigma}_j^z)$  que provee al operador fermiónico de un signo negativo adicional para convertir el conmutador en un anticonmutador. Este factor es en realidad un operador unitario que realiza una rotación (salvo fase) de un ángulo  $\pi$  en el eje  $z$  sobre la configuración de espines de todas las posiciones a la izquierda de  $i$ . Este factor se denomina término de desorden o solitón, debido a que siempre posee un valor esperado no nulo sobre estados con orden de largo alcance.

Asimismo, podemos realizar la operación inversa para reescribir los operadores de espín en función de los fermiónicos, tal que

$$\hat{\sigma}_i^x = 1 - 2\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i, \quad \hat{\sigma}_i^z = - \prod_{j<i} (1 - 2\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j) (\hat{c}_i + \hat{c}_i^\dagger), \quad (21)$$

donde previamente hemos realizado una conveniente rotación de un ángulo  $\pi/2$  sobre el eje  $y$  de espines ( $\hat{\sigma}_i^z \rightarrow \hat{\sigma}_i^x$ ,  $\hat{\sigma}_i^x \rightarrow -\hat{\sigma}_i^z$ ) para simplificar los resultados. Así, podemos expresar el hamiltoniano (1) del modelo de Ising transversal en función de los operadores fermiónicos como

$$\hat{H}_{\text{TFIM}} = -J \sum_i \left( g - 2g\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i + \hat{c}_{i+1} \hat{c}_i + \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1}^\dagger + \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + \hat{c}_{i+1}^\dagger \hat{c}_i \right). \quad (22)$$

<sup>6</sup>Un bosón duro, o *hard-core*, respeta el principio de exclusión de Pauli por la fuerte repulsión a la que está sometido, pero su función de onda no posee las propiedades de antisimetría propias de los fermiones. En efecto, mientras que los operadores fermiónicos satisfacen las relaciones de anticonmutación  $\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0$ , los bosones *hard-core* conmutan en posiciones diferentes,  $[\hat{\sigma}_i^-, \hat{\sigma}_j^+] = 0$ .

<sup>7</sup>Mientras que los operadores de espín sólo dependen de un punto, los operadores fermiónicos dependen de todos los espines a la izquierda de la posición dada.

Cabe destacar que, por la forma del hamiltoniano (22) y los términos cruzados que aparecen en él como  $\hat{c}_i \hat{c}_{i+1}$  y  $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1}^\dagger$ , el número de fermiones  $\hat{n} = \sum_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$  no es una constante del movimiento<sup>8</sup>. Sí lo será, por el contrario, su paridad, relacionada con las condiciones de contorno del problema, emergentes de la periodicidad del sistema de espines ( $\hat{\sigma}_1^\alpha = \hat{\sigma}_{N+1}^\alpha$ ).

En efecto, si la cadena de espines posee condiciones de contorno periódicas, entonces la cadena de fermiones tendrá condiciones de contorno antiperiódicas (periódicas) si contiene un número par (impar) de fermiones. Por el contrario, si el sistema de Ising es abierto, la cadena de fermiones también lo será.

Al contrario de como podríamos pensar, existen diferencias claves entre los diferentes tipos de condiciones de contorno, aun asumiendo que la cadena es suficientemente larga: en una cadena abierta, aparecerán *Majorana zero-modes* (MZM) en ambos extremos, así como un estado fundamental degenerado, mientras que una cadena con condiciones de contorno periódicas poseerá un único estado fundamental.

Para profundizar en las implicaciones físicas de este fenómeno emergente, es necesario introducir el hamiltoniano de la cadena de Kitaev, referente a un superconductor *p-wave* unidimensional,

$$\hat{H}_{\text{Kitaev}} = \sum_{j=1}^N \left[ \underbrace{-\frac{t}{2}(\hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1})}_{\text{enlace fuerte}} - \underbrace{\mu \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j}_{\text{potencial químico}} + \underbrace{\frac{\Delta}{2}(\hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_j \hat{c}_{j+1})}_{\text{superconducción } p\text{-wave en campo medio}} \right], \quad (23)$$

donde  $t$  es un término de *hopping*,  $\mu$  el potencial químico y  $\Delta$  un gap superconductor inducido.

Para  $\mu > t$ , este sistema forma una fase no topológica sin modos de Majorana en la cadena abierta. Por el contrario, si  $\mu < t$ , emerge una fase topológica con MZM presentes. Cuando  $\Delta, t > 0$ , el modelo pertenece a la clase de universalidad de Ising. En particular, vemos que si  $\Delta = t$  podemos identificar el hamiltoniano de Kitaev (23) con el que hemos construido (22) a partir del modelo de Ising transversal.

## 4.2 Transformaciones de Bogoliubov

Como ya hemos adelantado, el hamiltoniano de Ising transversal mantiene su forma cuadrática con respecto a los fermiones de Jordan–Wigner, lo que nos sugiere que podrá ser diagonalizado en la base de momentos. Así, realizamos una transformación de Fourier,

$$\hat{c}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \hat{c}_j e^{ikx_j}, \quad (24)$$

donde, por simplicidad,  $x_j = j$  denota las posiciones de la cadena. Tras esta transformación, el hamiltoniano (22) se expresa como

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{Fourier}} &= -J \sum_k \left[ g - 2g \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \hat{c}_{-k} \hat{c}_k e^{ik} + \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{-k}^\dagger e^{-ik} + 2 \cos(k) \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \right] = \\ &= -2J \sum_{k>0} \left[ g + (\cos(k) - g)(\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k + \hat{c}_{-k}^\dagger \hat{c}_{-k}) + i \sin(k)(\hat{c}_{-k} \hat{c}_k + \hat{c}_{-k}^\dagger \hat{c}_k^\dagger) \right], \end{aligned} \quad (25)$$

e ignorando el término constante puede escribirse también en la forma Bogoliubov–de Gennes,

$$\hat{H}_{\text{BdG}} = J \sum_k \Psi_k^\dagger \begin{pmatrix} g - \cos(k) & -i \sin(k) \\ i \sin(k) & \cos(k) - g \end{pmatrix} \Psi_k, \quad \Psi_k = \begin{pmatrix} \hat{c}_{-k} \\ \hat{c}_k^\dagger \end{pmatrix}. \quad (26)$$

De esta manera, el operador de partícula–hueco  $\hat{\mathcal{P}}$  intercambia las partes de creación y destrucción de  $\Psi_k$ ,

$$\hat{\mathcal{P}} = \prod_k \hat{\tau}_k^x \hat{\kappa} \quad , \quad \hat{\tau}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (27)$$

<sup>8</sup>En todo caso, será posible diagonalizar el hamiltoniano, puesto que es cuadrático en los operadores fermiónicos (véase sec. 4.2).

donde  $\hat{\kappa}$  es el operador de conjugación compleja. El cuadrado de este operador es  $\hat{\mathcal{P}}^2 = \mathbb{I}$  y el sistema posee una simetría de partícula–hueco, ya que  $\{\hat{H}_{\text{BdG}}, \hat{\mathcal{P}}\} = 0$ . Esto implica que, dada una solución  $\{\epsilon, k\}$  del hamiltoniano, existe también otra solución  $\{-\epsilon, -k\}$ .

Para diagonalizar ahora el hamiltoniano, nos disponemos a realizar una transformación de Bogoliubov. Definimos así los nuevos operadores de creación y destrucción de cuasipartículas

$$\hat{\gamma}_k = u_k \hat{c}_k - i v_k \hat{c}_{-k}^\dagger, \quad \hat{\gamma}_k^\dagger = u_k^* \hat{c}_k^\dagger + i v_k^* \hat{c}_{-k}, \quad (28)$$

tales que satisfacen las relaciones de anticonmutación fermiónicas

$$\{\hat{\gamma}_k, \hat{\gamma}_q^\dagger\} = \delta_{kq}, \quad \{\hat{\gamma}_k, \hat{\gamma}_q\} = \{\hat{\gamma}_k^\dagger, \hat{\gamma}_q^\dagger\} = 0, \quad (29)$$

mientras que los coeficientes  $u_k$  y  $v_k$  cumplen las propiedades

$$u_k^2 + v_k^2 = 1, \quad u_{-k} = u_k, \quad v_{-k} = -v_k, \quad (30)$$

por lo que podemos parametrizarlos como

$$u_k = \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right), \quad v_k = \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right), \quad \tan(\theta_k) = \frac{\sin(k)}{g - \cos(k)}. \quad (31)$$

Sustituyendo estos resultados en el hamiltoniano (25), toma la forma diagonal

$$\hat{H}_{\text{diag}} = \sum_k \epsilon_k \left( \hat{\gamma}_k^\dagger \hat{\gamma}_k - \frac{1}{2} \right), \quad \epsilon_k = 2J \sqrt{1 + g^2 - 2g \cos(k)}. \quad (32)$$

En el punto crítico,  $g = g_c = 1$ , el gap de energía se anula idénticamente para un valor de  $k = 0$ . En la proximación de alta longitud de onda,  $\epsilon_k = 2J \sqrt{(1 - g)^2 + k^2}$  y, en el punto crítico,  $\epsilon_k = 2J|k|$ , de donde deducimos el exponente crítico dinámico  $z = 1$  ( $\epsilon_k \sim k^z$ ). En este régimen, emergen propiedades físicas de Dirac. En efecto, el hamiltoniano (25) puede escribirse en términos de matrices de Pauli,

$$\hat{H}_{\text{BdG}} = \sum_k \Psi_k^\dagger \hat{H}_{\text{Dirac}}(k) \Psi_k, \quad \hat{H}_{\text{Dirac}}(k) = m \hat{\tau}^z + Jk \hat{\tau}^y, \quad (33)$$

donde  $m = J(g - 1)$  es una masa en unidades naturales. Cuando  $m \rightarrow 0$ , el sistema tiene dos autoestados con energía  $E = \pm Jk$ , que también son autoestados de  $\hat{\tau}^y$ , y denotan una superposición equitativa de electrones y huecos, que no son sino modos de Majorana que pueden propagarse libremente en la cadena con velocidad  $v = J$ . En este límite sin masa, la teoría de fermiones libres es conformemente invariante, por lo que nos podemos servir de la teoría de campos conformes y la expansión de productos de operadores para extraer otros exponentes críticos.

### 4.3 Majorana zero-modes en la cadena de Kitaev

Se pueden definir formalmente los operadores de Majorana como

$$\hat{a}_j = \hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_j, \quad \hat{b}_j = i(\hat{c}_j - \hat{c}_j), \quad (34)$$

tales que definen campos reales,  $\hat{a}_j^\dagger = \hat{a}_j$ ,  $\hat{b}_j^\dagger = \hat{b}_j$ , y cumplen las relaciones de anticonmutación

$$\{\hat{a}_j, \hat{a}_{j'}\} = 2\delta_{jj'}, \quad \{\hat{b}_j, \hat{b}_{j'}\} = 2\delta_{jj'}, \quad \{\hat{a}_j, \hat{b}_{j'}\} = 0. \quad (35)$$

Es instructivo pensar que dos modos de Majorana forman un único fermión. En términos de estos operadores, el hamiltoniano (22) puede expresarse como

$$\hat{H}_{\text{Majorana}} = iJ \sum_j \left( \hat{a}_j \hat{b}_{j+1} + g \hat{a}_j \hat{b}_j \right). \quad (36)$$

En el límite  $g \gg 1$ , el acoplo domina la dinámica entre modos de Majorana  $\hat{a}_j$  y  $\hat{b}_j$  en la misma posición de la cadena, con estados de borde (triviales) de energía no nula. Por el contrario, cuando  $g \rightarrow 0$ , el acoplo domina entre modos de Majorana adyacentes, y los dos bordes de la cadena poseen modos “desapareados” (no triviales) de energía cero (véase fig. 2). El coste de energía para cada par de Majorana es  $gJ$  cuando  $g \gg 1$  y  $J$  cuando  $g \rightarrow 0$ , y el *bulk* de la cadena posee un gap en ambos regímenes.

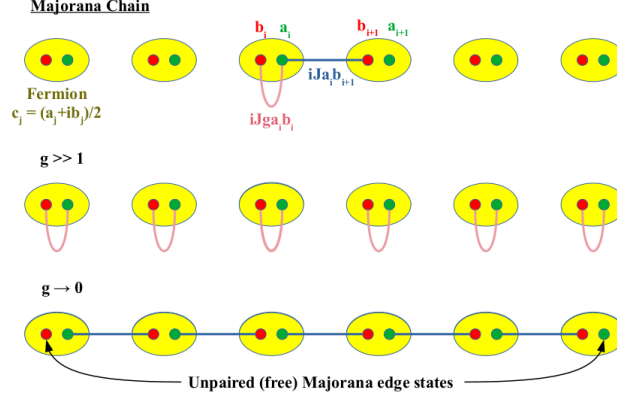


Figure 2: Cadena de Majorana en los límites  $g \gg 1$  y  $g \rightarrow 0$ . En el primer régimen, los Majoranas se aparean en la misma posición de la red, mientras que en el segundo lo hacen en posiciones adyacentes, dejando dos MZM “desapareados” en los bordes de la cadena [3].

Sin embargo, nótese que las soluciones MZM no están restringidas al límite estricto  $g \rightarrow 0$ . En todo el régimen  $g < 1$ , tenemos dos niveles de energía correspondientes a los MZM, alejados uno del otro y separados por un medio con gap (véase fig. 3). No es posible mover estos niveles de energía cero individualmente, puesto que se debe respetar la simetría partícula–hueco del espectro, centrado en  $\epsilon_k = 0$ . La única forma de romper los modos de Majorana es cerrando el gap de energía del *bulk*.

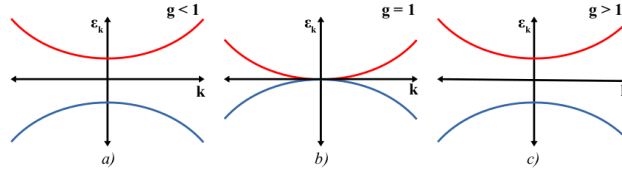


Figure 3: Relación de dispersión con simetría partícula–hueco para diferentes valores del parámetro de acoplo  $g$ . El gap del *bulk* se cierra en  $g = 1$  [3].

En matemáticas, dos objetos se consideran topológicamente inequivalentes si no pueden ser deformados de forma continua en el otro sin desgarrar o pegar partes. De forma análoga, no es posible moverse desde la fase que posee MZM hacia la fase que no los posee (y viceversa) sin cerrar el gap del *bulk*. Mientras el gap se mantenga abierto, los MZM están protegidos topológicamente. Entrar y salir de esta fase requiere cerrar el gap mediante una transición de fase topológica.

En la fase topológica no trivial, escogemos los modos de borde  $\hat{b}_0$  y  $\hat{a}_N$  tales que respetan la condición de contorno libre, esto es,  $[\hat{H}, \hat{b}_0] = [\hat{H}, \hat{a}_N] = 0$ , y construir a partir de ellos un modo fermiónico no local ( $d$ -fermión),

$$\hat{d}^\dagger = \frac{\hat{b}_0 + i\hat{a}_N}{2}, \quad (37)$$

que posee dos estados fundamentales degenerados: ocupado o vacío. De hecho, el estado fundamental doblemente degenerado de la fase ferromagnética del TFIM se mapea sobre la fase topológica no trivial de la cadena de Kitaev.

Estos  $d$ -fermiones pueden ser utilizados como qubits topológicamente protegidos de la decoheren-

cia,

$$|\uparrow\rangle = \hat{d}^\dagger|0\rangle \quad , \quad |\downarrow\rangle = |0\rangle . \quad (38)$$

Puesto que la energía de las cuasipartículas de Bogoliubov (32) no puede ser negativa, no pueden estar presentes en este estado fundamental ( $\hat{\gamma}_k|0\rangle = 0 \forall k$ ). Por otro lado, las  $n$ -ésimas excitaciones  $\hat{\gamma}_{k_1}^\dagger \cdots \hat{\gamma}_{k_n}^\dagger|0\rangle$  corresponden a excitaciones del modelo de Ising transverso de fronteras de dominio (fase ferromagnética) y volteos de espín (fase paramagnética).

Este estado fundamental difiere del estado de vacío  $|0\rangle_c$  en la representación de  $c$ -fermiones de la cadena de Kitaev, y puede construirse sobre éste a partir de una combinación arbitraria de pares de Cooper,

$$|0\rangle = \mathcal{N} \prod_q e^{\alpha_q \hat{c}_{-q}^\dagger \hat{c}_q} |0\rangle_c . \quad (39)$$

En esta interpretación, el límite  $g \rightarrow 0$  corresponde a pares de Cooper débilmente enlazados de tamaño infinito (el apareamiento débil es topológicamente no trivial), mientras que cuando  $g \gg 1$ , tenemos pares de Cooper de apareamiento fuerte sobre una longitud de escala de  $\zeta$  (el apareamiento fuerte es topológicamente trivial).

## 5 Inequivalencia física de los modelos de Ising y Kitaev

Aunque hayamos trazado una equivalencia formal entre los modelos de Ising y de Kitaev, el orden físico que presentan es muy distinto. El modelo de Ising presenta un tipo de orden convencional, donde la transición de fase se da por una ruptura espontánea de la simetría  $\mathbb{Z}_2$  de reflexión de espín. No existen elementos de matriz locales entre los dos estados fundamentales, puesto que se necesita voltear todos los espines de la cadena para pasar de uno a otro.

En el modelo de Kitaev, por el contrario, se presenta una fase SPT y la degeneración doble del estado fundamental se debe a la presencia de MZM. Ambos estados fundamentales se representan como (38) y su única diferencia es la ocupación del modo de Majorana que puede ser alterada con la simple creación y destrucción de fermiones en los bordes. Esto se traduce en una diferencia en la paridad fermiónica, que es una propiedad global, no local.

Por tanto, a pesar de la aparente similitud entre ambos modelos, su correlación es muy diferente. Una función de correlación es, como un parámetro de orden, un valor esperado de una serie de operadores sobre el estado fundamental. Mientras que en el modelo de Ising podemos medir el espín de un sitio concreto en cualquier momento, no existe un operador local correspondiente al modelo de Kitaev que proporcione tal información.

Cabe aclarar, por tanto, que existe una dicotomía [4] entre la equivalencia formal de ambos modelos y su no equivalencia física. Aunque podríamos pensar que el modelo de Ising posee fases topológicamente no triviales (y por lo tanto dar lugar a la emergencia de modos de Majorana), esto no es posible.

## Referencias

- [1] B. Zeng, *Quantum information meets quantum matter*. Springer, 2019.
- [2] J. B. Kogut, “An introduction to lattice gauge theory and spin systems,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 51, no. 659, pp. 659–713, 1979.
- [3] K. Chhajed, “From ising model to kitaev chain: an introduction to topological phase transitions,” *Resonance*, vol. 26, pp. 1539–1558, 2021.
- [4] M. Greiter, V. Schnells, and R. Thomale, “The 1d ising model and the topological phase of the kitaev chain,” *Annals of Physics*, vol. 351, pp. 1026–1033, 2014.
- [5] B. K. Chakrabarti, *Quantum Ising phases and transitions in transverse Ising models*. Springer, 2013.
- [6] L. Ortiz, *Topological orders with spins and fermions: quantum phases and computation*. PhD thesis, Universidad Complutense de Madrid, 2019.