

Honeycomb Kitaev Model

Anyons in an exactly solved model and beyond



Demetris Demetriades

Department of Physics
National and Kapodistrian University of Athens

Supervisor
Associate Professor
Ioannis Lelidis

University of Athens

May 2025

To my homeland, Cyprus.
The only European country still under occupation!

«Το νύν, ανταν να τρώτην γην, τρώει την γην θαρκέται,
μα πάντα τζιείνον τρώεται τζιαι τζιείνον καταλιέται.»
— Βασίλης Μιχαηλίδης

Acknowledgements

I would like to thank my supervisor, Associate Professor I. Lelidis, who trusted me with the opportunity and the freedom to work on such an interesting and active research topic. I would also thank him for his honest discussions, as well as for the valuable advice and information he was always willing to share with me.

Abstract

This thesis focuses on the Kitaev honeycomb model, a two-dimensional quantum system with three distinct Ising-type interactions, depending on the direction of each bond. This model has proven particularly important for describing quantum spin liquids, as well as for applications in topological quantum computing, due to its exotic topological properties. It constitutes the first exactly solvable theoretical model that fully captures the behavior of a quantum spin liquid. In this thesis, we begin by presenting the geometry of the model, the Hamiltonian that describes the system, and Alexei Kitaev's effort to obtain an exact analytical solution, based on the decomposition of the Hilbert space into flux sectors. We then present Ettore Majorana's observation that the Dirac equation also admits real solutions, leading to the theoretical prediction of Majorana fermions — particles that are identical to their antiparticles. We then examine how the spatial separation of Majorana operators leads to the rise of unbound Majorana fermions, showcase the exotic topological properties that manifest in physical systems such as superconducting wires. Next, we proceed to represent the Hamiltonian in the base of Majorana fermions, by expressing spin operators using four Majorana operators. This representation increases the system's degrees of freedom. The transition from the extended space $\tilde{\mathcal{L}}$ to the physical subspace \mathcal{L} is achieved through a gauge transformation of the \mathbb{Z}_2 group. Subsequently, we reformulate the Hamiltonian in the base of complex bond and matter fermions, transition to momentum space, and assume that the system lies in the zero-flux sector. Through the Bogoliubov–de Gennes transformation, we arrive at the final diagonalized Hamiltonian in the quasiparticle base. Finally, we represent the possible phases into which the system can transition — namely, the gapless phase (phase B) or the gapped phases (phase A_{α_i}). We compute the corresponding energy spectrum and present the complete phase diagram. Finally, by employing the correlation function, we show that all phases are characterized by strong quantum entanglement and spin fractionalization, features that classify the system as a quantum spin liquid.

Abstract

Η παρούσα πτυχιακή εργασία αφορά το μοντέλο κυψελοειδούς πλέγματος του Kitaev, ένα 2-διάστατο κβαντικό σύστημα με τρεις διαφορετικές αλληλεπιδράσεις τύπου Ising, ανάλογα με την κατεύθυνση κάθε δεσμού. Το μοντέλο αυτό έχει αποδειχθεί ιδιαίτερα σημαντικό για την περιγραφή κβαντικών υγρών σπιν, αλλά και για εφαρμογές στην τοπολογική κβαντική υπολογιστική, εξαιτίας των εξωτικών τοπολογικών ιδιοτήτων του. Αποτελεί το πρώτο ακριβώς λυμένο θεωρητικό πρότυπο που αναπαριστά με πληρότητα την κατάσταση ενός κβαντικού υγρού σπιν. Στην παρούσα εργασία παρουσιάζουμε αρχικά τη γεωμετρία του μοντέλου, τη Χαμιλτονιανή που περιγράφει το σύστημα καθώς και την προσέγγιση του Alexei Kitaev για εύρεση αναλυτικής λύσης μέσω αποσύνθεσης του χώρου Hilbert σε τομείς ροής. Έπειτα, παρουσιάζεται η θεμελιώδης παρατήρηση του Ettore Majorana ότι η εξίσωση Dirac επιδέχεται και πραγματικές λύσεις, γεγονός που οδηγεί στη θεωρητική πρόβλεψη των φερμιονίων Majorana — σωματίδια που ταυτίζονται με τα αντισωματίδια τους. Στη συνέχεια, εξετάζουμε πώς η χωρική αποσύνδεση των τελεστών Majorana οδηγεί στην εμφάνιση των αδέσμευτων φερμιονίων Majorana, παρουσιάζοντας τις εξωτικές τοπολογικές ιδιότητές τους σε υπεραγώγιμα καλώδια. Η αναπαράσταση της Χαμιλτονιανής στη βάση των φερμιονίων Majorana επιτυγχάνεται απεικονίζοντας τους τελεστές σπιν μέσω των τεσσάρων τελεστών Majorana. Η συγκεκριμένη αναπαράσταση αυξάνει τους βαθμούς ελευθερίας του συστήματος η μετάβαση από τον εκτεταμένο χώρο $\tilde{\mathcal{L}}$ στον φυσικό υποχώρο \mathcal{L} επιτυγχάνεται μέσω μετασχηματισμού βαθμίδας της ομάδας \mathbb{Z}_2 . Στη συνέχεια, αναδιατυπώνουμε τη Χαμιλτονιανή στη βάση των φερμιονίων ύλης και ροής, μεταβαίνοντας στον χώρο της ορμής και θεωρούμε ότι το σύστημα βρίσκεται στον τομέα μηδενικής ροής. Μέσω του μετασχηματισμού Bogoliubov–de Gennes, οδηγούμαστε στη τελική διαγωνιοποιημένη Χαμιλτονιανή, στη βάση των οιωνοί σωματιδίων. Έπειτα, παρουσιάζουμε τις δυνατές φάσεις στις οποίες μπορεί να μεταβεί το σύστημα: τη φάση χωρίς ενεργειακό χάσμα (gapless, φάση B) καθώς και τις φάσεις με χάσμα (gapped, φάση A_{α_i}). Υπολογίζουμε τα αντίστοιχα ενεργειακά φάσματα και παρουσιάζουμε το πλήρες διάγραμμα φάσεων. Τέλος, χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση συσχέτισης, δείχνουμε ότι όλες οι φάσεις χαρακτηρίζονται από ισχυρή κβαντική διεμπλοκή και κλασματοποίηση του σπιν, χαρακτηριστικά που κατατάσσουν το σύστημα στην κατηγορία των κβαντικών υγρών σπιν.

List of Mathematical Symbols

Symbol	Meaning
\mathcal{H}	Hamiltonian
\mathcal{H}_{BdG}	Bogoliubov–de Gennes Hamiltonian
$\tilde{\mathcal{H}}$	Hamiltonian in extended Fock space
σ^{α_i}	Pauli matrices
$\tilde{\sigma}^{\alpha_i}$	Pauli matrices in extended Fock space
σ^0	Identity matrix
\hat{w}_{p_n}	Flux operator
$u_{\langle ij \rangle}$	Local bond variable
\mathcal{L}	Full Hilbert space
$\tilde{\mathcal{L}}$	Full extended Fock space
\mathcal{M}	Physical 2-dimensional subspace of the Hilbert space
$\tilde{\mathcal{M}}$	Extended 4-dimensional Fock space
\mathcal{F}	Fermionic Fock space
\oplus	Direct sum of subspaces
γ^μ	Dirac matrices
γ^0	Time component of Dirac matrix
γ^i	Spatial component of Dirac matrix
$\tilde{\gamma}^\mu$	Majorana matrices
$\gamma, \gamma^x, \gamma^y, \gamma^z$	Majorana fermions
\hat{D}	Gauge operator
\hat{P}	Projection operator
C	Charge conjugation matrix
f_r^\dagger	Creation operator of a complex matter fermion
f_r	Annihilation operator of a complex matter fermion
χ^\dagger	Creation operator of a complex bond fermion
χ	Annihilation operator of a complex bond fermion

Δ	Pairing function
h	Hopping function
ξ	Correlation length

List of Abbreviations

Abbreviation	Description
MZMs	Majorana zero modes
UMBs	Unbound Majorana modes
BCS	Bardeen–Cooper–Schrieffer theory
BdG	Bogoliubov–de Gennes transformation
dcf	Dynamic Correlation Function
cmf	Complex Matter Fermion
cbf	Complex Bond Fermion
FT	Fourier Transform
QSL	Quantum Spin Liquid
mdf	massless Dirac fermions
qsp	quasiparticles
gp	gapless phase
gpp	gapped phase
BZ	Brillouin Zone
GT	Gauge Transformation
GO	Gauge Operator
$p - w$	p-wave

Table of contents

List of Mathematical Symbols	vi
List of Abbreviations	viii
List of figures	xi
1 Honeycomb Kitaev Model	1
1.1 Lattice geometry	1
1.2 Hamiltonian of lattice	3
1.3 Flux operator \hat{w}_{p_n}	4
1.4 Hilbert space divided into sectors	5
2 Majorana Fermions	8
2.1 Dirac equation	8
2.2 Majorana fermions	11
2.3 Systems with a large number of electrons	12
2.4 1D Topological Superconducting Wire	14
2.5 Fermionic Fock space	15
3 Representation of Hamiltonian by Majorana operators	18
3.1 Representation of spins by Majorana operators	18
3.2 Multi spin systems	21
3.3 Hamiltonian in terms of majorana fermions	22
3.4 Complex bond and matter fermions (cbf) & (cmf)	25
3.5 Unbound Majorana modes (UMBs) & Majorana zero modes (MZMs) . .	29
4 Relation Between Hamiltonians and Bogoliubov Transformations	31
4.1 Hamiltonian matrix in terms of Majorana fermions	31
4.2 Hamiltonian matrix in terms of cbf and cmf	33

4.3	Bogoliubov-de Gennes (BdG) tranformations	35
4.4	Ground State Flux Sector	39
5	Phase diagram and energy spectrum $E(q_x, q_y)$	44
5.1	Gapless phase	44
5.2	Gapped phase	47
5.3	Phase diagram	50
6	Applications	51
	Bibliography	53
	Appendix A Pauli Matrices	55
	Appendix B Transformation of the flux operator \hat{w}_{p_n}	57
	Appendix C Example of sectors in Hilbert space	59
	Appendix D Proof of relationship $\tan 2\theta_q = -\frac{\text{Im}(S_q)}{\text{Re}(S_q)}$	60
	Appendix E Relationship between phase transitions and S_q	63
	Appendix F Correlation function $S_{\langle ij \rangle}^{\alpha\beta}(t)$	65
	Appendix G MATLAB Implementation for Computing the Energy Spectrum $E(q_x, q_y)$	69

List of figures

1.1	Γεωμετρία του χυψελοειδούς πλέγματος στο μοντέλο Kitaev. Οι δεσμοί τύπου x , y και z επισημαίνονται ανάλογα με τον προσανατολισμό τους . . .	2
1.2	Τα δύο εναλλασσόμενα υποπλέγματα (περιττό και άρτιο) του χυψελοειδούς πλέγματος, στα οποία βασίζεται η δομή του μοντέλου Kitaev.	2
1.3	Οι τρεις τύποι αλληλεπιδράσεων (x -, y - και z -δεσμοί) που εμφανίζονται στο χυψελοειδές πλέγμα του μοντέλου Kitaev.	2
1.4	Αναπαράσταση εξαγωνικής πλακέτας του χυψελοειδούς πλέγματος.	4
1.5	Αναπαράσταση εξαγωνικής πλακέτας του χυψελοειδούς πλέγματος, όπου οι δεσμοί περιγράφονται μέσω του φορμαλισμού K_{ij}	4
3.1	Γραφική αναπαράσταση της Χαμιλτονιανής, όπως δίνεται στην εξ. (3.8). Κάθε σπιν αντιστοιχεί σε τέσσερις διακριτές κουκούδες, καθεμία εκ των οποίων αντιστοιχεί σε έναν τελεστή Majorana.	23
3.2	Γραφική αναπαράσταση complex bond και complex matter φερμιονίων στο πλέγμα	25
4.1	Η μοναδιαία χυψελίδα του χυψελοειδούς πλέγματος, όπως χρησιμοποιείται στο μοντέλο του Kitaev. Στην απεικόνιση φαίνονται και τα διανύσματα πλέγματος που καθορίζουν τις κατευθύνσεις των δεσμών x , y , και z	40
5.1	Το ενεργειακό φάσμα $E(q_x, q_y)$ απεικονίζεται για την ισοτροπική περίπτωση $J_x = J_y = J_z = 1$. Παρατηρούνται έξι σημεία μηδενικής ενέργειας (Dirac points) εντός της 1 ^{ης} ζώνης Brillouin (Brillouin Zone , BZ), όπου το $E(q_x, q_y) = 0$, υποδηλώνοντας ότι το φάσμα είναι χωρίς χάσμα. Η διασπορά κοντά σε αυτά τα σημεία είναι γραμμική, σχηματίζοντας χαρακτηριστικούς κώνους Dirac.	46

5.2	To ενεργειακό φάσμα $E(q_x, q_y)$ απεικονίζεται για την οριακή περίπτωση $J_x = J_y = 1$ και $J_z = 1.9$. Παρατηρούμε ότι υπάρχουν μόνο τέσσερις κώνοι Dirac εντός της 1 ^{ης} BZ, όπου το $E(q_x, q_y)$ μηδενίζεται. Τα σημεία Dirac έχουν αρχίσει να συγχωνεύονται.	47
5.3	To φάσμα $E(q_x, q_y)$, έχει απεικονιστεί παραπάνω για $J_x = J_y = 1$ και $J_z = 2.5$. To σύστημα εμφανίζει ενεργειακό χάσμα και βρίσκεται στη φάση A_z . . .	49
5.4	Διάγραμμα φάσης του μοντέλου Kitaev στον χώρο των παραμέτρων J_x, J_y, J_z . Η περιοχές A_{α_i} εμφανίζουν ενεργειακό χάσμα (gapped), ενώ η περιοχή Β είναι χωρίς χάσμα (gapless). Ένα σημείο μέσα στο παραπάνω τρίγωνο περιγράφει τις σχετικές τιμές των J_x, J_y, J_z . Στο κέντρο του τριγώνου εμφανίζεται το ισοτροπικό σημείο.	50
B.1	Σύγκριση πλακέτας πριν και μετά την εφαρμογή του φορμαλισμού K_{ij} . . .	57
F.1	Παρουσιάζεται πώς ένα spin διασπάται σε δύο στατικές π-ροές και ένα δυναμικό cmf. Η κατάσταση $ \psi\rangle$ είναι μια κατάσταση μηδενικής ροής. Εστω ότι η κατάσταση $ \psi\rangle$ βρίσκεται στον τομέα μηδενικής ροής. Εφαρμόζοντας τον τελεστή σ_i^z επί της κατάστασης $ \psi\rangle$, όπου η θέση i συνδέεται με τη θέση j μέσω του δεσμού $\langle ij \rangle$, προκύπτει η νέα κατάσταση $ \psi'\rangle$. Η κατάσταση $ \psi'\rangle$ περιέχει δύο στατικές π-ροές στις πλακέτες που βρίσκονται ανάμεσα στο δεσμό $\langle ij \rangle$, καθώς και ένα δυναμικό cmf, το οποίο αναπαριστάται ως μαύρος κύκλος.	65
F.2	Στο παραπάνω γράφημα απεικονίζεται η συσχέτιση $\langle \sigma_{1z} \sigma_{2z} \rangle$ σε έναν δεδομένο z-δεσμό. Έχουμε θέσει $J_x = J_y = 0.5$ και μεταβάλλουμε το J_z από 0 έως 1. Όπως αναμενόταν, για $J_z = 0$ η συσχέτιση είναι μηδενική, ενώ για μεγάλες τιμές του J_z συγκλίνει στο 1.	68

Chapter 1

Honeycomb Kitaev Model

Summary

Στο Κεφ. 1, βασισμένοι στα [1] και [2], αναλύουμε αρχικά τη γεωμετρία του μοντέλου. Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε τη Χαμιλτονιανή του συστήματος και, τέλος, την προσπάθεια του Alexei Kitaev για εύρεση αναλυτικής λύσης, διαχωρίζοντας τον χώρο Hilbert σε τομείς.

1.1 Lattice geometry

Στο Honeycomb Kitaev model εμφανίζεται ένα πλέγμα κυψελοειδούς δομής, όπου σε κάθε κορυφή της κυψελοειδούς δομής φιλοξενείται ένα σωματίδιο με σπιν $\pm 1/2$. Το κυψελοειδές πλέγμα χωρίζεται σε δύο ισοδύναμα υποπλέγματα (βλ Σχ. 1.2). Το υποπλέγμα με ονομασία περιττό (odd) το οποίο έχει ως κέντρο του μια μαύρη κουκκίδα και τρείς άσπρες κουκκίδες ως πρώτους γείτονες, και το υποπλέγμα με ονομασία άρτιο (even) το οποίο έχει ως κέντρο του μια άσπρη κουκκίδα και τρείς μαύρες κουκκίδες ως πρώτους γείτονες. Ανάλογα με την κατεύθυνση στην οποία βρίσκεται η μαύρη κουκκίδα σε σχέση με την άσπρη, εμφανίζονται τρείς μορφές αλληλεπίδρασης x links, y links, z links (βλ Σχ. 1.3).¹

¹: Οι μαύρες και οι άσπρες κουκκίδες δεν σχετίζονται με το γεγονός αν υπάρχει ή όχι σωματίδιο. Ανάλογα με τις γεωμετρικές θέσεις στις οποίες βρίσκονται οι μαύρες κουκκίδες σε σχέση με τις άσπρες, εμφανίζουν διαφορετικές μορφές αλληλεπίδρασης (x-, y-, z links) μεταξύ των σωματιδίων.

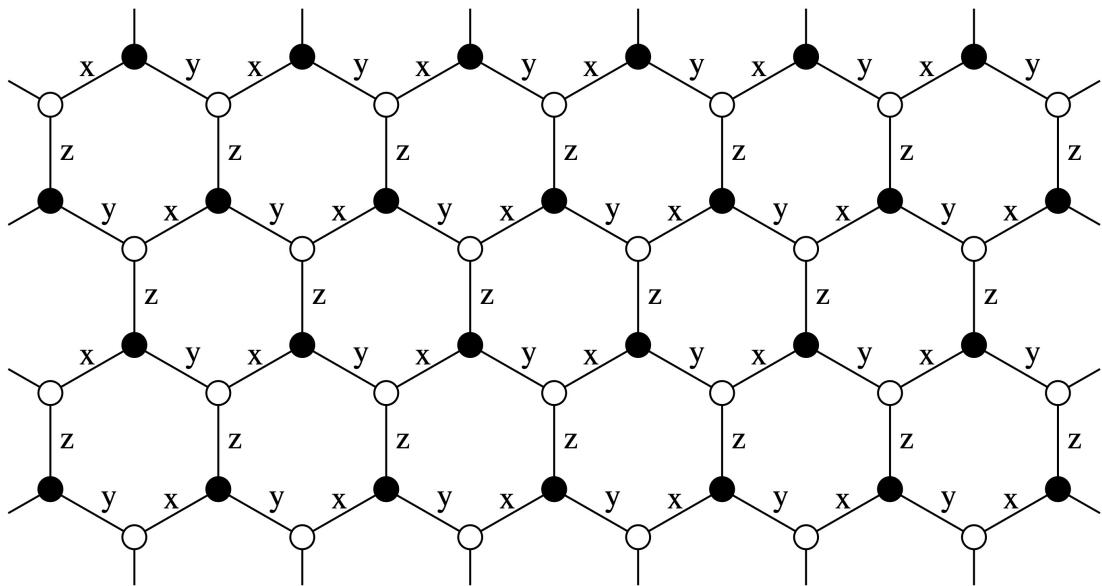


Fig. 1.1 Γεωμετρία του κυψελοειδούς πλέγματος στο μοντέλο Kitaev. Οι δεσμοί τύπου x, y και z επισημαίνονται ανάλογα με τον προσανατολισμό τους

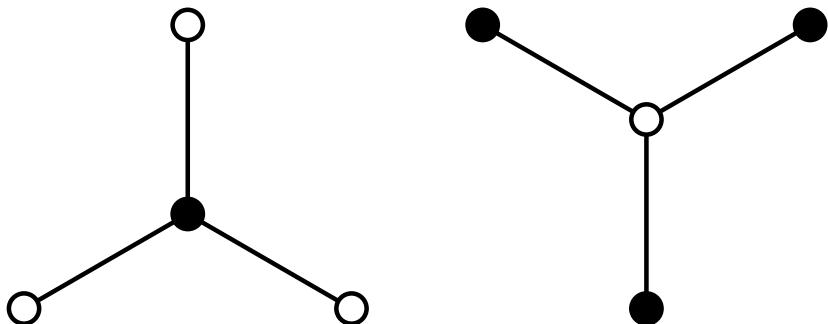


Fig. 1.2 Τα δύο εναλλασσόμενα υποπλέγματα (περιττό και άρτιο) του κυψελοειδούς πλέγματος, στα οποία βασίζεται η δομή του μοντέλου Kitaev.

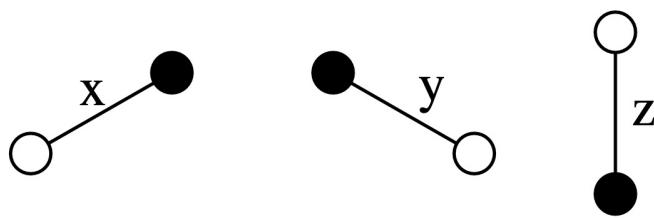
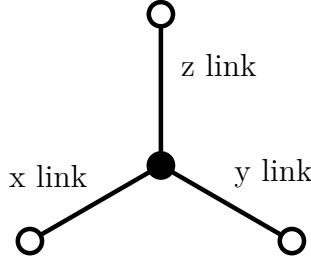


Fig. 1.3 Οι τρεις τύποι αλληλεπιδράσεων (x -, y - και z -δεσμοί) που εμφανίζονται στο κυψελοειδές πλέγμα του μοντέλου Kitaev.

1.2 Hamiltonian of lattice



Για να δημιουργήσουμε το ανάπτυγμα της Χαμιλτονιανής χρησιμοποιούμε μόνο τα περιττά υποπλέγματα. Το ανάπτυγμα της Χαμιλτονιανής για ένα τυχαίο περιττό υποπλέγμα είναι:

$$\mathcal{H} = -J_x \sigma_i^x \sigma_j^x - J_y \sigma_i^y \sigma_j^y - J_z \sigma_i^z \sigma_j^z.$$

όπου $\sigma_i^{\alpha_i} \sigma_j^{\alpha_i}$ αφορά αλληλεπιδράσεις πρώτων γειτόνων, με $\alpha_i = (x, y, z)$ αναλόγως με τον τύπο του δεσμού (link).

Για η περιττά υποπλέγματα καταλήγουμε στην Χαμιλτονιανή του συστήματος:

$$\mathcal{H} = -J_x \sum_{\text{x-links}} \sigma_i^x \sigma_j^x - J_y \sum_{\text{y-links}} \sigma_i^y \sigma_j^y - J_z \sum_{\text{z-links}} \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad (1.1)$$

όπου J_x , J_y , και J_z σταθερές σύζευξης που περιγράφουν την ισχύ της αλληλεπίδρασης κατά μήκος των x-, y- και z-δεσμών του πλέγματος. σ^x, σ^y και σ^z είναι οι πίνακες Pauli ². Η Χαμιλτονιανή του συστήματος παρουσιάζει μια συζευκτική συμπεριφορά τύπου σιδηρομαγνητικοί (ferromagnetic). Για κάθε ζεύγος της μορφής $\sigma_i^{\alpha_i} \sigma_j^{\alpha_i}$, παρατηρείται η προδιάθεση στα σπιν να βρίσκονται σε ομόρροπες κατευθύνσεις, δηλαδή είτε και τα δύο να είναι +1 είτε και τα δύο -1, με αποτέλεσμα το γινόμενο να είναι θετικό:

$$(+) (+) = +1, \quad (-) (-) = +1.$$

Το πρόσημο μπροστά από κάθε σταθερά σύζευξης J_x , J_y και J_z είναι αρνητικό, προκειμένου να ελαχιστοποιείται η ενέργεια του συστήματος όταν τα σπιν βρίσκονται σε ομόρροπη διάταξη.

²Η μορφή και απόδειξη των πινάκων Pauli βρίσκεται στο Appendix A

1.3 Flux operator \hat{w}_{p_n}

Ας εξετάσουμε μια τυχαία πλακέτα από το κυψελοειδές πλέγμα.

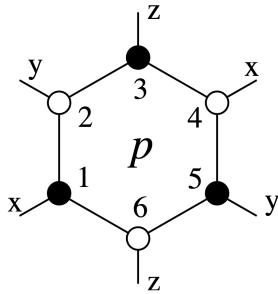


Fig. 1.4 Αναπαράσταση εξαγωνικής πλακέτας του κυψελοειδούς πλέγματος.

Ορίζουμε τον τελεστή ροής:

$$\hat{w}_{p_n} = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z, \quad (1.2)$$

όπου p_n ο αριθμός της πλακέτας.

Στη συνέχεια, εισάγουμε ένα νέο φορμαλισμό για τη Χαμιλτονιανή του συστήματος, ορίζοντας τον τελεστή K_{ij} :

$$K_{ij} = \begin{cases} \sigma_i^x \sigma_j^x, & \text{αν } \langle i, j \rangle \text{ είναι } x\text{-δεσμός,} \\ \sigma_i^x \sigma_j^y, & \text{αν } \langle i, j \rangle \text{ είναι } y\text{-δεσμός,} \\ \sigma_i^x \sigma_j^z, & \text{αν } \langle i, j \rangle \text{ είναι } z\text{-δεσμός.} \end{cases} \quad (1.3)$$

Χρησιμοποιώντας πλέον τον νέο φορμαλισμό, ο τελεστής ροής είναι:

$$\hat{w}_{p_n} = K_{12} K_{23} K_{34} K_{45} K_{56} K_{61}.^3 \quad (1.4)$$

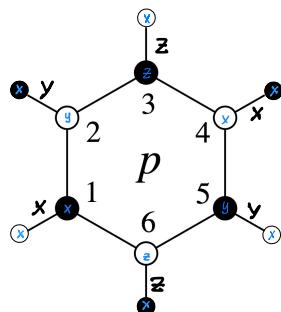


Fig. 1.5 Αναπαράσταση εξαγωνικής πλακέτας του κυψελοειδούς πλέγματος, όπου οι δεσμοί περιγράφονται μέσω του φορμαλισμού K_{ij} .

³Ο μετασχηματισμός της σχ. (1.2) στην (1.4) παρουσιάζεται αναλυτικά στο Appendix B.

Ορίσαμε προηγουμένως στην εξ. (1.2) τον τελεστή ροής:

$$\hat{w}_{p_n} = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$$

Κάθε τελεστής $\sigma_i^{\alpha_i}$ δρα αποκλειστικά επί του αντίστοιχου σωματιδίου i , χωρίς να επηρεάζει τα υπόλοιπα. Για παράδειγμα, ο σ_1^x δρα μόνο στο σωματίδιο 1, ενώ ο σ_2^y μόνο στο σωματίδιο 2 και ούτω καθεξής. Ο καθένας από αυτούς τους τελεστές αντιστοιχεί σε έναν δισδιάστατο υποχώρῳ εντός του συνολικού χώρου Hilbert. Καθώς ο τελεστής ροής περιλαμβάνει έξι σωματίδια, ο πλήρης χώρος Hilbert έχει διάσταση $2^6 = 64$. Η αναπαράσταση του \hat{w}_{p_n} σε μορφή πίνακα είναι :

$$\begin{aligned} \hat{w}_{p_n} = & (\sigma^x \otimes I \otimes I \otimes I \otimes I \otimes I)(I \otimes \sigma^y \otimes I \otimes I \otimes I \otimes I) \\ & (I \otimes I \otimes \sigma^z \otimes I \otimes I \otimes I)(I \otimes I \otimes I \otimes \sigma^x \otimes I \otimes I) \\ & (I \otimes I \otimes I \otimes I \otimes \sigma^y \otimes I)(I \otimes I \otimes I \otimes I \otimes I \otimes \sigma^z), \end{aligned} \quad (1.5)$$

όπου \otimes αντιστοιχεί σε άθροισμα υποχώρων και I στον ταυτοτικό πίνακα.

Η πρώτη παρένθεση αντιστοιχεί στην αναπαράσταση του σ_1^x στον πλήρη χώρο Hilbert. Η ίδια αντιστοιχία ισχύει και για τα $\sigma_2^y, \sigma_3^z, \sigma_4^x, \sigma_5^y$ και σ_6^z . Βασιζόμενοι στη μαθηματική ιδιότητα του τανυστικού γινομένου:

$$A \otimes B = (n \cdot p) \times (m \cdot q),$$

όπου $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$ και $B \in \mathbb{C}^{p \times q}$, προκύπτει ότι ο τελεστής ροής \hat{w}_{p_n} αναπαρίσταται από έναν πίνακα διαστάσεων 64×64 , δεδομένου ότι ο συνολικός Hilbert χώρος είναι $2^6 = 64$ διαστάσεων. Η τόσο μεγάλη διάσταση καθιστά την άμεση εύρεση ιδιοτιμών του πίνακα δύσκολη υπολογιστικά. Ωστόσο, παρατηρούμε ότι ο τελεστής ροής αποτελείται αποκλειστικά από γινόμενα των πινάκων Pauli και μοναδιαίων πινάκων (βλ. εξ. (1.5)). Δεδομένου ότι οι ιδιοτιμές των πινάκων Pauli είναι ± 1 , ενώ του μοναδιαίου πίνακα είναι 1, καταλήγουμε ότι και ο τελεστής ροής \hat{w}_{p_n} θα εμφανίζει ιδιοτιμές ± 1 .

1.4 Hilbert space divided into sectors

Γνωρίζοντας πλέον ότι ο τελεστής ροής ορίζεται:

$$\hat{w}_{p_n} = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z = \prod_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^{\alpha_i} \sigma_j^{\alpha_i} = K_{12} K_{23} K_{34} K_{45} K_{56} K_{61}. \quad (1.6)$$

Παρατηρούμε ότι τα εξής μεγέθη μετατίθονται:

$$[\hat{K}_{ij}, \hat{w}_{p_n}] = \hat{K}_{ij}\hat{w}_{p_n} - \hat{w}_{p_n}\hat{K}_{ij} = 0$$

$$[\hat{w}_{p_i}, \hat{w}_{p_j}] = \hat{w}_{p_i}\hat{w}_{p_j} - \hat{w}_{p_j}\hat{w}_{p_i} = 0$$

$$[\hat{w}_{p_i}, \hat{\mathcal{H}}] = \hat{w}_{p_i}\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{w}_{p_i} = 0$$

Η Χαμιλτονιανή $\hat{\mathcal{H}}$ μετατίθεται με τον τελεστή ροής \hat{w}_{p_n} , ως αποτέλεσμα τα δύο μεγέθη εμφανίζουν ένα κοινό σύστημα ιδιοκαταστάσεων. Επιπλέον, οι τελεστές ροής \hat{w}_{p_i} και \hat{w}_{p_j} μετατίθενται μεταξύ τους. Αυτό σημαίνει ότι οι εν λόγω τελεστές μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα, επιτρέποντας μια κοινή βάση ιδιοκαταστάσεων. Σε αυτό το σημείο εμφανίζεται η ιδιαίτερα έξυπνη ιδέα του Kitaev: να απλοποιήσει το πρόβλημα χωρίζοντας το σύστημα σε διαχριτούς τομείς σταθερής ροής, στους οποίους οι τιμές των \hat{w}_{p_i} παραμένουν σταθερές. Με αυτόν τον τρόπο, η εύρεση των ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής περιορίζεται σε κάθε τομέα ξεχωριστά, μειώνοντας δραστικά την πολυπλοκότητα του προβλήματος.

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος ορίζεται πλέον:

$$\mathcal{H} = -J_{\alpha_i} \sum_i \hat{w}_{p_i}, \quad i: \text{αριθμός της πλακέτας}. \quad (1.7)$$

Χωρίζουμε τον χώρο \mathcal{L} του συστήματος σε άθροισμα τομέων ροής:

$$\mathcal{L} = \bigoplus_{w_{p_1}, \dots, w_{p_i}} \mathcal{L}_{w_{p_1}, \dots, w_{p_i}}, \quad (1.8)$$

όπου τομέας αποτελεί έναν υποχώρο του πλήρη χώρου Hilbert, ο οποίος αντιστοιχεί σε ένα δυνατό συνδυασμό των ιδιοτιμών του \hat{w}_{p_i} . Κάθε τελεστής ροής \hat{w}_{p_i} έχει ιδιοτιμές ± 1 , επομένως κάθε τομέας θα αντιστοιχεί σε έναν από τους δυνατούς συνδυασμούς του ± 1 .

Ας εξετάσουμε έναν συγκεκριμένο τομέα ροής:

$$\mathcal{L}_{w_{p_1}, \dots, w_{p_i}}.$$

Κάθε κυψελίδα στο πλέγμα αποτελείται από 6 κορυφές. Κάθε κορυφή συνεισφέρει συνολικά σε 3 κυψελίδες, με αποτέλεσμα κάθε πλακέτα να αποτελείται από 2 κορυφές. Καταλήγουμε λοιπόν στη σχέση $m = \frac{n}{2}$, όπου m δηλώνει τον συνολικό αριθμό πλακετών και n τον αριθμό των κορυφών στο κυψελοειδές πλέγμα. Η διάσταση του τομέα δίνεται από τη σχέση:

$$\frac{2^n}{2^m} = 2^{\frac{n}{2}}.$$

Για $n = 100$, ο τομέας⁴ παρουσιάζει 2^{50} διάσταση, ένας τεράστιος αριθμός που αντιστοιχεί σε εξαιρετικά πολλούς βαθμούς ελευθερίας, ο στόχος της εύρεσης ιδιοτιμών σε κάθε τομέα καθίσταται πρακτικά αδύνατο. Συμπεραίνουμε, επομένως, ότι ο διαχωρισμός του χώρου Hilbert σε τομείς ροής, αν και μειώνει ψεωρητικά την πολυπλοκότητα, δεν επαρκεί για την αναλυτική επίλυση του προβλήματος. Στο Κεφ. 4, θα παρουσιάσουμε μια νέα μέθοδο που θα επιτρέψει τον ακριβή υπολογισμό των ιδιοτιμών του συστήματος.

⁴Δείτε το παραδείγμα στο Appendix C για περισσότερες λεπτομέρειες σχετικά με τον τομέα

Chapter 2

Majorana Fermions

Summary

Στο Κεφ. 2, βασισμένοι στα [3], [4], [5] και [6], παρουσιάζουμε αρχικά, μέσω της εξίσωσης Dirac, τον τρόπο εμφάνισης των φερμιονίων Majorana. Στη συνέχεια, αναλύουμε τη χρήση των τελεστών Majorana σε συστήματα με μεγάλο αριθμό ηλεκτρονίων και, τέλος, παρουσιάζουμε φυσικά συστήματα στα οποία εμφανίζονται αδέσμευτα φερμιόνια Majorana. Η ανάλυση του Κεφ. 2 παρέχει ένα βασικό μαθηματικό υπόβαθρο για καλύτερη κατανόηση των επόμενων Κεφαλαίων.

2.1 Dirac equation

Η εξίσωση Dirac αποτελεί τη θεμελιώδη εξίσωση για τη σχετικιστική περιγραφή σωματιδίων με σπιν $1/2$, ενσωματώνοντας την ειδική θεωρία της σχετικότητας στην κβαντική μηχανική. Η δομή της εξίσωσης επιτρέπει την πρόβλεψη της ύπαρξης αντισωματιδίων και τη διάκριση μεταξύ θετικών και αρνητικών ενεργειακών καταστάσεων. Στην παρούσα Ενότητα παρουσιάζουμε τη μορφή της εξίσωσης Dirac και, στη συνέχεια, διερευνούμε τις συνθήκες υπό τις οποίες αυτή μπορεί να αναχθεί σε πραγματική μορφή, οδηγώντας στην περιγραφή των Majorana φερμιονίων — σωματιδίων ταυτόσημων με τα αντισωματία τους.

Ξεκινούμε αρχικά με τη πιο γενική μορφή της εξ Dirac¹:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}_{\text{Dirac}} \Psi = (\alpha^i \cdot p + \beta m) \Psi, \quad (2.1)$$

όπου α^i ($i = x, y, z$) είναι πίνακες που περιγράφουν τη σχετικιστική σύνδεση της ορμής με το σπιν του σωματιδίου. Ο πίνακας β περιγράφει τη συμβολή της μάζας στο ενεργειακό επίπεδο, διαχωρίζοντας τα σωματίδια με τα αντισωματίδια (θετική και αρνητική ενέργεια).

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Ορίζουμε τον τανυστή $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^i) = (\beta, \beta \alpha^i)$, όπου γ^0 αντιστοιχεί στη χρονική συνιστώσα του τανυστή και γ^i αντιστοιχεί στη χωρική συνιστώσα του τανυστή.

Η εξ. (2.1) λαμβάνει την εξής μορφή :

$$i \gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \gamma^0 (\gamma^i p_i + m) \Psi, \quad \rightarrow \hat{\mathcal{H}}_{\text{Dirac}} = \gamma^0 (\gamma^i p_i + m). \quad (2.3)$$

Η δράση του τελεστή $\hat{\mathcal{H}}_{\text{Dirac}}$ δύο φορές στην εξ. (2.1) μας δίνει πολύ ενδιαφέρουσες λύσεις. Οι ιδιοτιμές των λύσεων βρίσκονται ως εξής:

$$\begin{aligned} (\hat{\mathcal{H}}_{\text{Dirac}})^2 &= (\gamma^0 (\gamma^i p_i + m))^2 \\ &= \gamma^0 (\gamma^i p_i + m) \gamma^0 (\gamma^i p_i + m) \\ &= \gamma^0 \gamma^i p_i \gamma^0 \gamma^j p_j + \gamma^0 \gamma^i p_i \gamma^0 m + \gamma^0 m \gamma^0 \gamma^i p_i + \gamma^0 m \gamma^0 m \\ &= \gamma^0 [m \gamma^0 (m + \gamma^i p_i) + \gamma^i p_i \gamma^0 (m + \gamma^j p_j)] \\ &= \gamma^0 [m^2 \gamma^0 + m \gamma^0 \gamma^i p_i + m \gamma^i p_i \gamma^0 + \gamma^i p_i \gamma^0 \gamma^j p_j] \\ &= \gamma^0 [m^2 \gamma^0 - m \gamma^i \gamma^0 p_i + m \gamma^i \gamma^0 p_i + \gamma^i p_i \gamma^0 \gamma^j p_j], \quad [\gamma^\mu, \gamma^\nu]_+ = 2\eta_{\mu\nu} I \text{ και } \gamma^0 \gamma^i = -\gamma^i \gamma^0 \\ &= (\gamma^0)^2 m^2 + (-\gamma^0)^2 \gamma^i \gamma^j (p_i p_j), \quad (\gamma^0)^2 = 1 \text{ και } \gamma^i \gamma^j = \delta^{ij} I \\ &= m^2 + (\delta^{ij} p_i p_j), \quad \text{για } i = j \\ &= m^2 + p^2, \end{aligned} \quad (2.4)$$

όπου $\eta_{\mu\nu}$ αντιστοιχεί στη μετρική Minkowski.

¹Για λόγους απλοποίησης, θέτουμε $\hbar = c = 1$.

Η αντικατάσταση της εξ. (2.1) στην εξ. (2.4) οδηγεί στη παρακάτω εξίσωση:

$$\begin{aligned} \left(i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 &= (m^2 + p^2) \Psi, \quad p = -i \nabla \\ \Rightarrow \quad \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2 \right) \Psi &= 0, \quad (\text{Klein-Gordon equation}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Συνεπώς, αποδεικνύουμε ότι $(\hat{\mathcal{H}}_{\text{Dirac}})^2 = E^2$, με $E^2 = m^2 + p^2$, που αποτελεί τη σχετικιστική σχέση ενέργειας-ορμής. Οι λύσεις της εξίσωσης Dirac αντιστοιχούν σε κυματοσυναρτήσεις τύπου σπίνορα με τέσσερις συνιστώσες, δηλαδή $\Psi \in \mathbb{C}^4$. Ο τετραδιάστατος αυτός χώρος προκύπτει από το γεγονός ότι οι πίνακες Dirac γ^μ , οι οποίοι ικανοποιούν την άλγεβρα Clifford [7] σε $3+1$ διαστάσεις, έχουν ελάχιστη αναπαράσταση 4×4 . Κατά συνέπεια, η Ψ πρέπει να είναι τετραδιάστατος σπίνορας, ώστε η εξίσωση να είναι συνεπής. Κάθε συνιστώσα του αντιστοιχεί σε μια φυσική κατάσταση — σωμάτιο ή αντισωμάτιο, με σπιν πάνω ή κάτω.

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \psi_1 &: \text{σωματίδιο με θετική ενέργεια και σπιν "πάνω"}, \\ \psi_2 &: \text{σωματίδιο με θετική ενέργεια και σπιν "κάτω"}, \\ \psi_3 &: \text{αντισωματίδιο με αρνητική ενέργεια και σπιν "πάνω"}, \\ \psi_4 &: \text{αντισωματίδιο με αρνητική ενέργεια και σπιν "κάτω"}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Η εύρεση αντισωματιδίων όπως το αντι-ηλεκτρόνιο (ποζιτρόνιο) συνέβη λίγο μετά τη δημοσίευση του Dirac [8], και το έργο του θεωρήθηκε ως πρόβλεψη της ύπαρξής τους. Ας γράψουμε τώρα λίγο διαφορετικά την εξ. (2.1), πολλαπλασιάζοντας και τα δύο μέλη της εξίσωσης με γ^0 :

$$\begin{aligned} \gamma^0 i \gamma^0 \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= ((\gamma^0)^2 \gamma^i p_i + (\gamma^0)^2 m) \Psi \\ i \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \gamma^i p_i \Psi - m \Psi &= 0 \\ (i \gamma^\mu \partial_\mu - m) \Psi &= 0, \quad p^\mu = (p^0, p^i) = (i \partial_0, -i \partial_i) \\ (\gamma^\mu p_\mu - m) \Psi &= 0, \end{aligned} \quad (2.7)$$

όπου $\partial_0 \equiv \frac{\partial}{\partial t}$, $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i}$.

Οι πίνακες που ικανοποιούν την εξ. (2.7) ονομάζονται πίνακες Dirac και ορίζονται:

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^\mu \\ \hat{\sigma}^\mu & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

όπου $\sigma^\mu = (\sigma^0, -\sigma^i)$, $\hat{\sigma}^\mu = (\sigma^0, \sigma^i)$, σ^0 ο ταυτοτικός πίνακας και σ^i $i = (x, y, z)$ οι πίνακες Pauli.

2.2 Majorana fermions

Ο Ettore Majorana παρατήρησε ότι, για συγκεκριμένες επιλογές των πινάκων α^i και β , η εξ. (2.1) μπορεί να πάρει πραγματική μορφή. Συγκεκριμένα, καθίσταται δυνατή η επιλογή της κυματοσυνάρτησης ψ ώστε να είναι πραγματική, δηλαδή $\psi = \psi^*$. Η μορφή αυτή της εξίσωσης αποτελεί παραλλαγή της εξ. (2.7) και περιγράφει σωματίδια τα οποία είναι ταυτόχρονα τα δικά τους αντισωματίδια, δηλαδή ικανοποιούν τη σχέση $\psi = \psi^c$, όπου ψ^c είναι το συζυγές φορτίου του ψ .

$$\begin{aligned} \psi &= \psi^c, \quad \psi^c: \text{κυματοσυνάρτηση αντισωματίδιου} \\ &= C(\bar{\psi})^T, \quad C: \text{συζυγής πίνακας φορτίου} \\ &= C(\psi^\dagger \gamma^0)^T, \quad \text{όπου } C(\gamma^\mu)^T C^{-1} = \gamma^\mu. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Για φερμιόνια Majorana γνωρίζουμε ότι $C = \gamma^0 \gamma^2$. Η αντικατάσταση $C = \gamma^0 \gamma^2$ στην εξ. (2.9) οδηγεί στην ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned} \psi &= C(\psi^\dagger \gamma^0)^T \\ &= \gamma^0 \gamma^2 (\psi^\dagger \gamma^0)^T \\ &= \gamma^0 \gamma^2 \gamma^0 (\psi^\dagger)^T \\ &= \gamma^0 \gamma^2 \gamma^0 \psi^* \\ &= -(\gamma^0)^2 \gamma^2 \psi^* \\ &= -\gamma^2 \psi^* \\ &= \psi^*. \end{aligned}$$

Αποδείξαμε, λοιπόν, ότι ο σπίνοράς μας είναι ίσος με τον συζυγή του, δηλαδή $\psi = \psi^c$, κάτι που ισχύει αποκλειστικά για σπίνορες Majorana. Συνεπώς, η κυματοσυνάρτηση μπορεί να επιλεγεί ώστε να είναι πραγματική. Τα φερμιόνια Majorana είναι σωματίδια που

ταυτίζονται με τα αντισωματίδιά τους και δεν μπορούμε να τα διαχρίνουμε μεταξύ τους. Η ισότητα $\psi = \psi^c$ εκφράζει ακριβώς αυτήν τη φυσική ιδιότητα. Ως αποτέλεσμα, ο χώρος σπινορικών καταστάσεων γίνεται ιδιοσύστατος ως προς τη δράση του τελεστή συζυγούς φορτίου \hat{C} , δηλαδή η εφαρμογή του \hat{C} σε οποιαδήποτε συνιστώσα του σπινορικού χώρου αφήνει το σύστημα αμετάβλητο.

Οι πίνακες γ^μ στην αναπαράσταση Majorana συμβολίζονται ως $\tilde{\gamma}^\mu$ και λαμβάνουν την μορφή:

$$\begin{aligned}\tilde{\gamma}^0 &= i \begin{pmatrix} 0 & -\sigma^1 \\ \sigma^1 & 0 \end{pmatrix}, & \tilde{\gamma}^1 &= i \begin{pmatrix} 0 & \sigma^0 \\ \sigma^0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \tilde{\gamma}^2 &= i \begin{pmatrix} \sigma^0 & 0 \\ 0 & -\sigma^0 \end{pmatrix}, & \tilde{\gamma}^3 &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma^2 \\ -\sigma^2 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Η εξίσωση Dirac μπορεί να θεωρηθεί ως σύστημα τεσσάρων συζευγμένων εξισώσεων, καθεμία από τις οποίες αντιστοιχεί σε μία από τις συνιστώσες του τετραδιάστατου σπίνορα Ψ . Εισάγοντας τον φορμαλισμό Majorana, η εξίσωση μπορεί να διασπαστεί σε δύο ανεξάρτητα πραγματικά υποσυστήματα, καθένα από τα οποία περιλαμβάνει δύο συζευγμένες εξισώσεις για τις αντίστοιχες πραγματικές μεταβλητές. Η λύση ενός από αυτά τα υποσυστήματα περιγράφει ένα ουδέτερο φερμιόνιο με σπιν $\frac{1}{2}$, το οποίο ταυτίζεται με το αντισωματίδιό του, σύμφωνα με τη συνθήκη $\psi = \psi^c$.

2.3 Systems with a large number of electrons

Συστήματα με πολλαπλά ηλεκτρόνια περιγράφονται μέσω Χαμιλτονιανών που περιλαμβάνουν τελεστές δημιουργίας και καταστροφής, με όρους γραμμικής ή μη-γραμμικής τάξης, ανάλογα με το είδος των αλληλεπιδράσεων. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι το μοντέλο Hubbard.

Η δράση ενός τελεστή δημιουργίας a^\dagger σε μια κενή κβαντική κατάσταση² $|n\rangle$ δημιουργεί μια νέα κατειλημμένη κβαντική κατάσταση³ $|n+1\rangle$

$$a^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle.$$

Η δράση ενός τελεστή δημιουργίας a^\dagger σε μια κατειλημμένη κβαντική κατάσταση $|n\rangle$ μας δίνει 0, δεν επιτρέπεται στην ίδια κβαντική κατάσταση να βρίσκονται δύο ηλεκτρόνια

²κενή κβαντική κατάσταση: κατάσταση χωρίς ηλεκτρόνιο

³κατειλημμένη κβαντική κατάσταση: κατάσταση στην οποία βρίσκεται ένα ηλεκτρόνιο

(Στατιστική Fermi-Dirac).

$$\alpha^\dagger |n\rangle = 0.$$

Η δράση ενός τελεστή καταστροφής α σε μια κενή κβαντική κατάσταση $|n\rangle$ μας δίνει 0:

$$\alpha |n\rangle = 0.$$

Η δράση ενός τελεστή καταστροφής α σε μια κατειλημμένη κβαντική κατάσταση $|n\rangle$ μας δίνει μια νέα κβαντική κατάσταση $|n-1\rangle$, στην οποία αφαιρεί ένα ηλεκτρόνιο:

$$\alpha |n\rangle = |n-1\rangle.$$

Οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής εμφανίζουν τις εξής ομοιομεταθετικές ιδιότητες:

$$[\alpha_i^\dagger, \alpha_j^\dagger]_+ = [\alpha_i, \alpha_j]_+ = 0, \quad [\alpha_i^\dagger, \alpha_j]_+ = \delta_{ij}.$$

Χωρίς καμία απώλεια της γενικότητας μπορούμε να εκφράσουμε τους τελεστές α^\dagger και α στη βάση Majorana:

$$\alpha_j = \frac{1}{2}(\gamma_{j1} + i\gamma_{j2}), \quad \alpha_j^\dagger = \frac{1}{2}(\gamma_{j1} - i\gamma_{j2}). \quad (2.11)$$

Οι τελεστές Majorana εμφανίζουν τις εξής ομοιομεταθετικές ιδιότητες:

$$[\gamma_i, \gamma_j]_+ = 2\delta_{ij}I, \quad \gamma_{i\alpha}^\dagger = \gamma_{i\alpha}. \quad (2.12)$$

Φανταστείτε τον τελεστή γ_1 ως το «πραγματικό» μέρος του ηλεκτρονίου και τον γ_2 ως το «φανταστικό» του μέρος. Οι δύο τελεστές είναι δεμένοι μεταξύ τους, δηλαδή βρίσκονται στην ίδια χωρική θέση και δεν μπορούν να διαχωριστούν τοπικά. Μαζί κωδικοποιούν πλήρως την πληροφορία για την κβαντική κατάσταση του ηλεκτρονίου, όπως φάνηκε από τη σύνθεση τους σε τελεστή δημιουργίας (βλ. εξ. (2.11)). Από τη σχέση (2.12) παρατηρούμε ότι οι τελεστές είναι πραγματικοί και ομοιομεταθετικοί. Η δράση ενός μεμονωμένου τελεστή Majorana γ σε μια κβαντική κατάσταση $|n\rangle$ δεν αρκεί για να καθορίσει την παρουσία ή απουσία ηλεκτρονίου, η πληροφορία δεν είναι πλήρως κωδικοποιημένη. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο οι γ_1 και γ_2 εμφανίζονται πάντοτε σε γραμμικό συνδυασμό.

Η ύπαρξη ή μη ενός ηλεκτρονίου εξαρτάται από τον συνδυασμό των δύο τελεστών Majorana, δηλαδή από τον αριθμό κατοχής n (occupation number):

$$n = \alpha^\dagger \alpha = \frac{1}{2} (1 - i\gamma_1 \gamma_2).$$

Ο αριθμός κατοχής n λαμβάνει την τιμή 0 αν δεν υπάρχει ηλεκτρόνιο και την τιμή 1 αν υπάρχει ηλεκτρόνιο. Ο συνδυασμός $i\gamma_1 \gamma_2$ καθορίζει την κατάσταση του συστήματος και μπορεί να λάβει τις τιμές ± 1 , αντιστοιχώντας στις δύο δυνατές τιμές του n . Το $i\gamma_1 \gamma_2$ είναι μη-ερμητιανό μέγεθος:

$$(i\gamma_1 \gamma_2)^\dagger = -i\gamma_2 \gamma_1 = -i\gamma_1 \gamma_2.$$

Η ποσότητά μας δεν μετατίθεται, συνεπώς είναι αδύνατη η ταυτόχρονη μέτρηση μέσω αυτού του συνδυασμού. Αποδείξαμε ξανά, λοιπόν, ότι η μόνη λύση για την πλήρη κωδικοποίηση του ηλεκτρονίου είναι μόνο μέσω γραμμικού συνδυασμού των γ_1 και γ_2 . Επομένως οποιοδήποτε σύστημα ηλεκτρονίων μπορούμε να το εκφράσουμε στη βάση Majorana. Στις περισσότερες περιπτώσεις, αυτός ο μετασχηματισμός δεν έχει κάποιο νόημα και απλώς περιπλέκει τις πράξεις μας. Οι τελεστές γ_1 και γ_2 βρίσκονται στην ίδια χωρική θέση και η σύνθεσή τους αντιστοιχεί σε έναν τελεστή δημιουργίας ηλεκτρονίου. Συνεπώς, δεν έχει κάποιο νόημα να εκφράσουμε το ίδιο το ηλεκτρόνιο ως δύο ξεχωριστές οντότητες στη βάση Majorana. Όμως σε τοπολογικά υπεραγώγιμα συστήματα έχουμε διαχωρισμό των φερμιονίων Majorana, δηλαδή τα γ_1 και γ_2 βρίσκονται σε διαφορετικές χωρικές θέσεις πλέον, η αναπαράσταση του συστήματος στη βάση Majorana γίνεται ουσιώδης, καθώς καμία άλλη βάση δεν μπορεί να περιγράψει τους βαθμούς ελευθερίας του συστήματος. Τα αδέσμευτα φερμιόνια Majorana εμφανίζουν απίστευτα ενδιαφέρουσες τοπολογικές ιδιότητες με απίστευτες εφαρμογές σε πρωτοποριακές τεχνολογίες [9],[10].

2.4 1D Topological Superconducting Wire

Ο διαχωρισμός των φερμιονίων Majorana γίνεται πιο εύκολα κατανοητός όταν εκφράσουμε την εξ. (2.11) στη μορφή:

$$\gamma_{j1} = \alpha_j^\dagger + \alpha_j, \quad \gamma_{j2} = i(\alpha_j^\dagger - \alpha_j). \quad (2.13)$$

Μέσα σε ένα τοπολογικό υπεραγώγιμο σύρμα, όπως γνωρίζουμε, τα ηλεκτρόνια δημιουργούν ζεύγη Cooper, τα οποία κινούνται μέσα στο υλικό χωρίς κάποια αντίσταση. Αναπαριστώντας τώρα τα ηλεκτρόνια στη βάση Majorana, παρατηρούμε ότι οι τελεστές

Majorana στα ακριανά ζεύγη Cooper, δηλαδή αυτά που βρίσκονται κοντά στα άκρα του σύρματος διαχωρίζονται, σχηματίζοντας αδέσμευτα φερμιόνια Majorana. Σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες, μέσα σε ένα τοπολογικό υπεραγώγιμο σύρμα και με συνδυασμό μιας εξωτερικής διαταραχής στο σύστημά, εμφανίζεται η πιθανότητα παρουσίας ενός μεμονωμένου ηλεκτρονίου σε ένα από τα δύο άκρα του σύρματος. Μέσω του φαινομένου της κβαντικής σύραγγας, το ηλεκτρόνιο εμφανίζει την πιθανότητα να “προσδεθεί” με ένα από τα διαχωρισμένα φερμιόνια Majorana, π.χ. γ₁ ή γ₂, δημιουργώντας μια νέα δυαδική κβαντική κατάσταση (παρουσία ή απουσία “προσδεμένου” ηλεκτρονίου) στο άκρο. Αυτή η κβαντική κατάσταση μπορεί να θεωρηθεί ως κβαντικό bit (qubit), το οποίο αντιπροσωπεύει την κβαντική πληροφορία σε αυτή τη θέση. Οι κβαντικές καταστάσεις στα άκρα του συστήματος είναι προστατευμένες από διαταραχές του εξωτερικού περιβάλλοντος. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η διαταραχή των μεμονωμένων γ δεν αλλάζει την πληροφορία του ηλεκτρονίου, διότι πολύ απλά από μόνα τους δεν κωδικοποιούν την πλήρη πληροφορία του ηλεκτρονίου, με συνέπεια η κβαντική κατάσταση να είναι προστατευμένη. Τα εξωτικά αυτά φαινόμενα βρίσκονται στο επίκεντρο της σύγχρονης έρευνας, με ιδιαίτερο ενδιαφέρον για εφαρμογές στην υλοποίηση τοπολογικών κβαντικών υπολογιστών [11].

2.5 Fermionic Fock space

Σε τοπολογικά φερμιονικά κβαντικά συστήματα δεν χρησιμοποιούμε τον χώρο Hilbert αλλά τον φερμιονικό χώρο Fock. Στην πιο γενική περίπτωση, δεν αποτελεί υποχώρο του χώρου Hilbert, αλλά κατασκευάζεται ως άμεση άθροιση όλων των Hilbert χώρων με διαφορετικό αριθμό φερμιονίων, από 0 έως άπειρο:

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \dots \quad (2.14)$$

- \mathcal{F}_0 : είναι ο υπόχωρος με 0 φερμιόνια (κενή κατάσταση).
- \mathcal{F}_1 : είναι ο υπόχωρος με 1 φερμιόνιο.
- \mathcal{F}_2 : είναι ο υπόχωρος με 2 φερμιόνια, κ.ο.κ.

Ισοδύναμα, μπορούμε να γράψουμε:

$$\mathcal{F} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots, \quad (2.15)$$

όπου \oplus αντιστοιχεί σε άθροιση υποχώρων. Οι σχέσεις (2.14) και (2.15) είναι ισοδύναμες, συνήθως προτιμάμε την γραφή (2.14). Ο χώρος Fock αποτελείται από ένα άθροισμα

υποχώρων \mathcal{F}_n , όπου n ο αριθμός φερμιονίων. Σε κάθε υποχώρο \mathcal{F}_n παρουσιάζονται όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί κβαντικών καταστάσεων που αντιστοιχούν στα n φερμιόνια. Ας δούμε κάποια απλά παραδείγματα για καλύτερη κατανόηση της ερμηνείας του χώρου. Υποθέτουμε ότι το σύστημά που μελετάμε αποτελείται από τρεις κβαντικές καταστάσεις, $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ και $|\gamma\rangle$. Για τον υποχώρο \mathcal{F}_2 θα έχουμε τους εξής συνδυασμούς κβαντικών καταστάσεων:

- Αντισυμμετρική κατάσταση δύο φερμιονίων στις καταστάσεις α και β :

$$|\psi_{\alpha\beta}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle - |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle).$$

- Αντισυμμετρική κατάσταση δύο φερμιονίων στις καταστάσεις α και γ :

$$|\psi_{\alpha\gamma}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle \otimes |\gamma\rangle - |\gamma\rangle \otimes |\alpha\rangle).$$

- Αντισυμμετρική κατάσταση δύο φερμιονίων στις καταστάσεις β και γ :

$$|\psi_{\beta\gamma}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\beta\rangle \otimes |\gamma\rangle - |\gamma\rangle \otimes |\beta\rangle).$$

Στο παράδειγμα του τοπολογικά υπεραγώγιμου σύρματος, ορίζουμε τον υποχώρο \mathcal{F}_0 ως τον υποχώρο με μηδενικό αριθμό προσκολλημένων ηλεκτρονίων. Υποθέτουμε ότι στο αριστερό άκρο του σύρματος βρίσκονται τα αδέσμευτα φερμιονικά γ_1 και γ_2 , ενώ στο δεξί άκρο τα γ_3 και γ_4 . Στον υποχώρο \mathcal{F}_1 , όπου υπάρχει ακριβώς ένα προσκολλημένο ηλεκτρόνιο, μπορούμε να σχηματίσουμε τους εξής τελεστές δημιουργίας και καταστροφής: Στο αριστερό άκρο:

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

Στο δεξί άκρο:

$$\alpha_R = \frac{1}{2}(\gamma_3 + i\gamma_4), \quad \alpha_R^\dagger = \frac{1}{2}(\gamma_3 - i\gamma_4).$$

Οι δύο δυνατές κατειλημμένες καταστάσεις στον υποχώρο \mathcal{F}_1 περιγράφονται από τους εξής συνδυασμούς:

1. Κατειλημμένη κατάσταση στο αριστερό άκρο:

$$|\psi_L\rangle = \alpha_L^\dagger |0\rangle = |1_L\rangle.$$

2. Κατειλημμένη κατάσταση στο δεξί όχρο:

$$|\psi_R\rangle = \alpha_R^\dagger |0\rangle = |1_R\rangle.$$

Chapter 3

Representation of Hamiltonian by Majorana operators

Sammury

Στο Κεφ. 3, βασισμένοι στα [1], [2], [12], [13], παρουσιάζουμε πώς η Χαμιλτονιανή του συστήματος μπορεί να εκφραστεί στη βάση Majorana, την εισαγωγή των φερμιονίων ροής και ύλης, καθώς και την τεχνική μετάβασης από τον εκτεταμένο χώρο στον φυσικό υπόχωρο.

3.1 Representation of spins by Majorana operators

Όπως γνωρίζουμε, ένα φερμιονικό σύστημα μπορεί να περιγραφεί πλήρως χρησιμοποιώντας τους τελεστές δημιουργίας α^\dagger και καταστροφής α . Χωρίς καμία βλάβη της γενικότητας, εκφράζουμε τους δύο τελεστές στη βάση Majorana:

$$\gamma_{j1} = \alpha_j^\dagger + \alpha_j, \quad \gamma_{j2} = i(\alpha_j^\dagger - \alpha_j).$$

Η αναπαράσταση του σπιν στη βάση Majorana επιτυγχάνεται μέσω τεσσάρων τελεστών Majorana¹, δηλαδή των $\gamma^x, \gamma^y, \gamma^z$ και γ , οι οποίοι αντιστοιχούν στον συμβολισμό $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ και γ_4 . Οι τέσσερις τελεστές Majorana δημιουργούν έναν τετραδιάστατο εκτεταμένο χώρο Fock. Ο φυσικός χώρος του συστήματος αποτελείται από έναν διδιάστατο χώρο Hilbert που αντιστοιχεί στις κβαντικές καταστάσεις με σπιν πάνω $|\uparrow\rangle$ και κάτω $|\downarrow\rangle$. Οι τέσσερις τελεστές Majorana δημιουργούν περισσότερους βαθμούς ελευθερίας από αυτούς

¹Η αναπαράσταση της άλγεβρας των τελεστών Pauli στον εκτεταμένο χώρο επιτυγχάνεται με τη χρήση τεσσάρων τελεστών Majorana.

που αντιστοιχούν στον φυσικό χώρο Hilbert, συνεπώς κάποιοι βαθμοί ελευθερίας να μην αντιστοιχούν σε φυσικές ιδιότητες του συστήματός. Ο περιορισμός του εκτεταμένου χώρου Fock στον φυσικό χώρο Hilbert επιτυγχάνεται μέσω της συμμετρίας \mathbb{Z}_2 . Ορίζουμε αρχικά τον τελεστή βαθμίδας $\hat{D} = \gamma^x \gamma^y \gamma^z \gamma$ (Gauge Operator, GO). Με τη χρήση του GO, ορίζουμε τον φυσικό χώρο \mathcal{M} ως υποχώρο του εκτεταμένου χώρου $\tilde{\mathcal{M}}$, δηλαδή $\mathcal{M} \subseteq \tilde{\mathcal{M}}$, με την προϋπόθεση να ισχύει:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{M} \quad \text{αν και μόνο αν} \quad \hat{D}|\psi\rangle = |\psi\rangle, \quad \text{όπου} \quad \hat{D} = \gamma^x \gamma^y \gamma^z \gamma. \quad (3.1)$$

Μπορούμε να φανταστούμε τον GO ως ένα "φίλτρο" ή "φύλακα" ο οποίος μας επιτρέπει να αναγνωρίσουμε ποιες κβαντικές καταστάσεις του εκτεταμένου χώρου $\tilde{\mathcal{M}}$ αντιστοιχούν σε κβαντικές καταστάσεις του φυσικού υποχώρου \mathcal{M} .

$$\begin{aligned} \hat{D}|\psi\rangle &= +|\psi\rangle, & D = +1 &\rightarrow \text{φυσικό υπόχωρο}, \\ \hat{D}|\psi\rangle &= -|\psi\rangle, & D = -1 &\rightarrow \text{μη φυσικό υπόχωρο}. \end{aligned}$$

Όταν η δράση του GO στην κατάσταση $|\psi\rangle$ δώσει ιδιοτυπή $+1$, τότε η κατάσταση αντιστοιχεί στον φυσικό υποχώρο. Όταν η ιδιοτυπή είναι -1 , τότε η κατάσταση $|\psi\rangle$ δεν αντιστοιχεί στον φυσικό υποχώρο. Ο GO μπορεί να θεωρηθεί ως ένας μετασχηματισμός βαθμίδας (Gauge Transformation, GT) της ομάδας \mathbb{Z}_2 .

GT:

$$\begin{aligned} \gamma^x &\rightarrow -\gamma^x, \quad \gamma^y \rightarrow -\gamma^y, \quad \gamma^z \rightarrow -\gamma^z, \quad \gamma \rightarrow -\gamma, \\ D &\rightarrow -D, \\ -D|\psi\rangle &= -|\psi\rangle \rightarrow D = +1. \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι οποιαδήποτε αλλαγή προσήμου στους τέσσερις τελεστές Majorana δεν επηρεάζει τη φυσική του συστήματος. Παρουσιάζεται λοιπόν μια βαθμιδική συμμετρία της ομάδας \mathbb{Z}_2 , δηλαδή την ελευθερία αναδιατύπωσης της περιγραφής του συστήματος χωρίς να μεταβάλλονται οι παρατηρήσιμες φυσικές ποσότητες.

Οι αναπαραστάσεις των πινάκων Pauli στον εκτεταμένο χώρο $\tilde{\mathcal{M}}$ είναι:

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}^x &= i\gamma^x \gamma, \\ \tilde{\sigma}^y &= i\gamma^y \gamma, \\ \tilde{\sigma}^z &= i\gamma^z \gamma. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Για να είναι συνεπής η περιγραφή του συστήματος στον εκτεταμένο χώρο, οι πίνακες Pauli $\tilde{\sigma}^x, \tilde{\sigma}^y, \tilde{\sigma}^z$ θα πρέπει να ικανοποιούν δύο βασικές συνθήκες. Υπό GT να αναπαρίστανται από τους πίνακες Pauli του φυσικού υποχώρου \mathcal{M} και να υπακούν στην άλγεβρα των πινάκων Pauli εντός του \mathcal{M} . Οι πίνακες $\tilde{\sigma}^{\alpha_i}$ (όπου $\alpha_i = x, y, z$) είναι ερμητιανοί και μοναδιαίοι:

$$(\tilde{\sigma}^{\alpha_i})^\dagger = \tilde{\sigma}^{\alpha_i}, \quad (\tilde{\sigma}^{\alpha_i})^2 = 1.$$

Οι πίνακες $\tilde{\sigma}^{\alpha_i}$ μετατίθενται με τον GO:

$$[\tilde{\sigma}^{\alpha_i}, \hat{D}] = 0.$$

Επομένως, τα δύο μεγέθη διαθέτουν κοινές ιδιοκαταστάσεις. Συνεπώς, η δράση των $\tilde{\sigma}^{\alpha_i}$ δεν αλλάζει την ιδιοκατάσταση του GO, διασφαλίζοντας τη συμβατότητα με τον φυσικό υποχώρο.

Προτού προχωρήσουμε στην ενότητα 3.2, ας εξετάσουμε αν η σχέση (3.2) πληροί τις δύο συνθήκες.

Συνθήκη (1):

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}^x \tilde{\sigma}^y \tilde{\sigma}^z &= i\gamma^x \gamma^y \gamma^z \gamma \\ &= i\hat{D}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}^x \tilde{\sigma}^y \tilde{\sigma}^z |\psi\rangle &= i\hat{D}|\psi\rangle, \quad D = +1 \rightarrow \text{Φυσικό υπόχωρο} \\ &= \sigma^x \sigma^y \sigma^z |\psi\rangle, \quad \text{'Οπου } i = \sigma^x \sigma^y \sigma^z \rightarrow \text{Συνεπές με το φυσικό υποχώρο.} \end{aligned}$$

Συνθήκη (2):²

$$\begin{aligned} [\sigma_i, \sigma_j] &= 2i\varepsilon_{ijk}\sigma^k \rightarrow \text{Άλγεβρα Pauli.} \\ [\sigma_j^x, \sigma_j^y] &= [-i\gamma_j^y \gamma_j^z, -i\gamma_j^z \gamma_j^x] \\ &= -i[\gamma_j^y \gamma_j^z, \gamma_j^z \gamma_j^x] \\ &= -i(\gamma_j^y \{\gamma_j^z, \gamma_j^z\} \gamma_j^x - \gamma_j^z \{\gamma_j^x, \gamma_j^y\} \gamma_j^z) \\ &= 2(-i\gamma_j^y \gamma_j^x) \\ &= 2i\sigma_j^z \rightarrow \text{Συνεπές με την άλγεβρα Pauli.} \end{aligned}$$

²Στη Συνθήκη (2) χρησιμοποιήθηκε η ταυτότητα $[AB, CD] = A\{B, C\}D - C\{D, A\}B$ καθώς και η εξ. (3.7).

3.2 Multi spin systems

Για πολυσπινικά συστήματα έχουμε:

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_j^{\alpha_i} &:= i\gamma_j^{\alpha_i}\gamma_j, \quad j : \text{αριθμός σωματιδίου.} \\ \hat{D}_j &:= \gamma_j^x\gamma_j^y\gamma_j^z\gamma_j.\end{aligned}\quad (3.3)$$

Βάσει του ορισμού (3.3), μπορούμε να εκφράσουμε τον πλήρη φυσικό χώρο \mathcal{L} ως υποχώρο του πλήρους εκτεταμένου χώρου $\tilde{\mathcal{L}}$, δηλαδή $\mathcal{L} \subseteq \tilde{\mathcal{L}}$, με την προϋπόθεση να ισχυεί:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{L} \quad \text{αν και μόνο αν} \quad \hat{D}_j|\psi\rangle = |\psi\rangle, \quad \text{για όλα } \tau \alpha j. \quad (3.4)$$

Χωρίς καμία βλάβη της γενικότητας μπορούμε να εκφράσουμε τα σπίν $\sigma_j^{\alpha_i}$ του φυσικού υποχώρου \mathcal{L} ως γινόμενο του GO και των πινάκων Pauli του εκτεταμένου χώρου $\tilde{\mathcal{L}}$:

$$\sigma_j^{\alpha_i} = \hat{D}_j \tilde{\sigma}_j^{\alpha_i}, \quad (3.5)$$

$$\sigma_j^{\alpha_i} = i\gamma_j^{\alpha_i}\gamma_j, \quad D = +1 \text{ φυσικό υπόχωρο.} \quad (3.6)$$

Αναπτύσσουμε τη σχέση (3.5):

$$\begin{aligned}\sigma_j^{\alpha_i} &= \hat{D}_j \tilde{\sigma}_j^{\alpha_i} \\ &= (\gamma_j^x\gamma_j^y\gamma_j^z\gamma_j)(i\gamma_j^{\alpha_i}\gamma_j) \\ &= -i\gamma_j^x\gamma_j^y\gamma_j^z\gamma_j^{\alpha_i}(\gamma_j)^2 \\ &= -i\gamma_j^x\gamma_j^y\gamma_j^z\gamma_j^{\alpha_i}, \quad \text{'Οπου } (\alpha_i=\text{x,y,z}).\end{aligned}$$

Η αντικατάσταση του α_i οδηγεί στην σχέση:

$$\sigma_j^x = -i\gamma_j^y\gamma_j^z, \quad \sigma_j^y = -i\gamma_j^z\gamma_j^x, \quad \sigma_j^z = -i\gamma_j^x\gamma_j^y. \quad (3.7)$$

Το πρόσημο – εισάγεται ώστε να ικανοποιείται η άλγεβρα των πινάκων Pauli.

Καταφέραμε, λοιπόν, να εκφράσουμε τους τελεστές σ^x , σ^y και σ^z αποκλειστικά μέσω των τριών τελεστών Majorana γ^x , γ^y και γ^z . Για οποιοδήποτε φερμιονικό σύστημα, μπορούμε να επαναδιατυπώσουμε τη Χαμιλτονιανή $\mathcal{H}\{\sigma_j^{\alpha_i}\}$ ως:

$$\tilde{\mathcal{H}}\{\gamma_j^{\alpha_i}, \gamma_j\} = \tilde{\mathcal{H}}\{\sigma_j^{\alpha_i}\},$$

όπου η ισότητα υπονοεί ότι η Χαμιλτονιανή του εκτεταμένου χώρου $\tilde{\mathcal{L}}$ περιορίζεται στον φυσικό υποχώρο \mathcal{L} , υπό την προϋπόθεση ότι ικανοποιείται η εξ. (3.4).

3.3 Hamiltonian in terms of majorana fermions

Αρχικά, προτού αντικαταστήσουμε τη σχέση (3.7) στη Χαμιλτονιανή του συστήματος, αναπαριστούμε τους τελεστές Majorana γ^x , γ^y , γ^z και γ ως κουκίδες (θα γίνει κατανοητό στην πορεία το γιατί):

$$\begin{array}{c} \gamma^z \\ \bullet \\ \bullet \gamma \\ \gamma^x \bullet \qquad \bullet \gamma^y \end{array}$$

Ξεκινούμε από τη Χαμιλτονιανή του συστήματος, όπως δίνεται στην εξ. (1.1):

$$\mathcal{H} = -J_x \sum_{\text{x-links}} \sigma_i^x \sigma_j^x - J_y \sum_{\text{y-links}} \sigma_i^y \sigma_j^y - J_z \sum_{\text{z-links}} \sigma_i^z \sigma_j^z.$$

Με την εφαρμογή του μετασχηματισμού (1.4) η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -J_{\alpha_k} \sum_{j,k} K_{jk} \\ &= -J_{\alpha_k} \sum_{j,k} \tilde{K}_{jk} \\ &= -J_{\alpha_i} \sum_{\langle j,k \rangle} \tilde{\sigma}_j^{\alpha_i} \tilde{\sigma}_k^{\alpha_i}, \quad \text{εφαρμόζουμε τη σχέση (3.6)} \\ &= -J_{\alpha_i} \sum_{\langle j,k \rangle} (i\gamma_j^{\alpha_i} \gamma_j) (i\gamma_k^{\alpha_i} \gamma_k) \\ &= iJ_{\alpha_i} \sum_{\langle j,k \rangle} i\gamma_j^{\alpha_i} \gamma_k^{\alpha_i} \gamma_j \gamma_k, \quad \hat{u}_{jk} = (i\gamma_j^{\alpha_{jk}} \gamma_k^{\alpha_{jk}}) \quad \alpha_{jk} = \alpha_i \\ \tilde{\mathcal{H}} &= \frac{i}{4} \sum_{\langle j,k \rangle} \hat{A}_{jk} \gamma_j \gamma_k, \quad A_{jk} = \begin{cases} 2J_{\alpha_{jk}} \hat{u}_{jk}, & \text{αν } j \text{ και } k \text{ ενώνονται,} \\ 0, & \text{οτιδήποτε άλλο.} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Κατά την κατασκευή του αθροίσματος στην εξ. (3.8), κάθε δεσμός u_{jk} μετριέται δύο φορές λόγω της μορφής του πλέγματος, γεγονός που διορθώνεται με την εισαγωγή συντελεστή $\frac{1}{2}$. Ο πίνακας A_{jk} περιλαμβάνει επιπλέον έναν παράγοντα 2, ώστε να ληφθεί υπόψη η πλήρης ενεργειακή συνεισφορά κάθε δεσμού ανα πλακέτα, καθώς κάθε δεσμός συμμετέχει σε δύο διαφορετικές πλακέτες. Τέλος, η προσθήκη του συντελεστή $\frac{1}{2}$ εξισορροπεί τον παράγοντα 2 του πίνακα A_{jk} , οδηγώντας σε συνολικό συντελεστή $\frac{1}{4}$. Η γραφική αναπαράσταση της Χαμιλτονιανής (3.8) παρουσιάζεται στο Σχ. 3.1

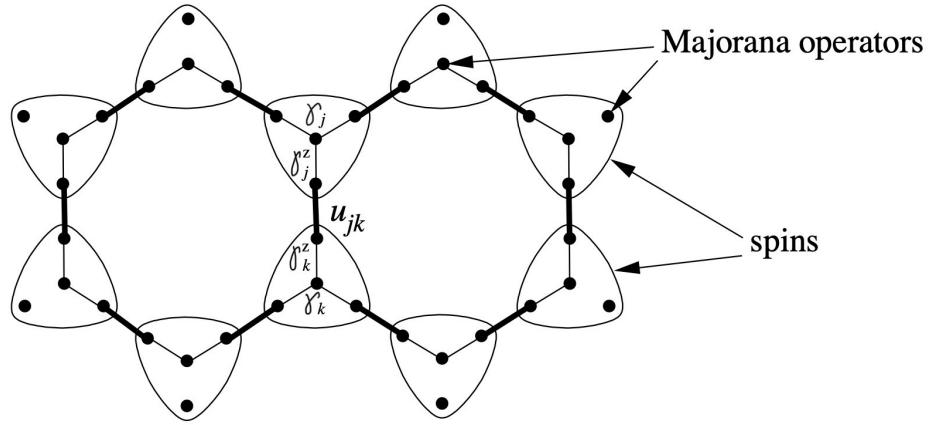


Fig. 3.1 Γραφική αναπαράσταση της Χαμιλτονιανής, όπως δίνεται στην εξ. (3.8). Κάθε σπιν αντιστοιχεί σε τέσσερις διακριτές κουκκίδες, καθεμία εκ των οποίων αντιστοιχεί σε έναν τελεστή Majorana.

Ο τελεστής δεσμού \hat{u}_{jk} είναι αντισυμμετρικός, δηλαδή ισχύει $u_{jk} = -u_{kj}$:

$$\begin{aligned}\hat{u}_{jk}^\dagger &= (i\gamma_j^{\alpha_{jk}} \gamma_k^{\alpha_{jk}})^\dagger \\ &= ((i\gamma_j^{\alpha_{jk}} \gamma_k^{\alpha_{jk}})^T)^* \\ &= (i\gamma_k^{\alpha_{jk}} \gamma_j^{\alpha_{jk}})^* \\ &= -i\gamma_k^{\alpha_{jk}} \gamma_j^{\alpha_{jk}} \\ &= -u_{kj}, \quad \text{QED.}\end{aligned}$$

Ο τελεστής \hat{u}_{jk} μετατίθεται με τον εαυτό του και την εξ. (3.8), $[\hat{u}_{jk}^i, \hat{u}_{jk}^s] = [\hat{u}_{jk}^i, \tilde{\mathcal{H}}] = 0$, τα δύο μεγέθη εμφανίζουν ένα κοινό σύστημα ιδιοκαταστάσεων. Οι ιδιοτιμές του τελεστή \hat{u}_{jk} είναι:

$$\begin{aligned}u_{jk}^2 &= (i\gamma_j^{\alpha_{jk}} \gamma_k^{\alpha_{jk}})^2 \\ &= -(\gamma_j^{\alpha_{jk}} \gamma_k^{\alpha_{jk}})(\gamma_j^{\alpha_{jk}} \gamma_k^{\alpha_{jk}}) \\ &= \gamma_j^{\alpha_{jk}} \gamma_j^{\alpha_{jk}} \gamma_k^{\alpha_{jk}} \gamma_k^{\alpha_{jk}} \\ &= (\gamma_j^{\alpha_{jk}})^2 (\gamma_k^{\alpha_{jk}})^2 \\ &= 1.\end{aligned}$$

$$u_{jk} = \pm 1.$$

Συνεπώς οι μόνες δυνατές ιδιοτιμές του τελεστή u_{jk} είναι ± 1 . Είμαστε πλέον έτοιμοι να χωρίσουμε τον εκτεταμένο χώρο $\tilde{\mathcal{L}}$ του συστήματός σε τομέας, όπου κάθε τομέας θα αντιστοιχεί σε έναν δυνατό συνδυασμό ιδιοτιμών του τελεστή \hat{u}_{jk} :

$$\tilde{\mathcal{L}} = \bigoplus_u \tilde{\mathcal{L}}_u. \quad (3.9)$$

Η εξ. (3.8) γράφεται πλέον:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{4} \sum_{\langle j,k \rangle} A_{jk} \gamma_j \gamma_k. \quad (3.10)$$

Αφαιρούμε το καπέλο από τον τελεστή A_{jk} , καθώς κάθε τομέας είναι ήδη χωρισμένος σε επιτρεπτούς συνδυασμούς ιδιοτιμών του τελεστή \hat{u}_{jk} . Η εξ. (3.10) είναι μία τετραγωνική μορφή (quadratic form). Η μετάβαση της κατάστασης $|\tilde{\Psi}_u\rangle$ από τον εκτεταμένο χώρο $\tilde{\mathcal{L}}$ στο φυσικό υποχώρο \mathcal{L} δεν είναι και τόσο απλή σαν το παράδειγμα (3.4).

Ο εκτεταμένος χώρος $\tilde{\mathcal{L}} = \bigoplus_u \tilde{\mathcal{L}}_u$ δεν είναι αναλλοίωτος κάτω από GT της ομάδας \mathbb{Z}_2 . Η δράση του \hat{D}_j στους δεσμούς u_{jk} προκαλεί αντιστροφή :

$$D_j u_{jk} D_j^{-1} = -u_{jk}, \quad \forall k \sim j. \quad (3.11)$$

Πιο συγκεκριμένα, η δράση του \hat{D}_j επηρεάζει τους δεσμούς της κορυφής j που ενώνονται με τους τρεις πλησιέστερους γείτονες k_1, k_2 και k_3 :

$$u_{jk_1} \rightarrow -u_{jk_1}, \quad u_{jk_2} \rightarrow -u_{jk_2}, \quad u_{jk_3} \rightarrow -u_{jk_3}.$$

Συνεπώς εχουμε μετάβαση του τομέα $\tilde{\mathcal{L}}_u$ σε ενα νέο τομέα $\tilde{\mathcal{L}}'_u$:

$$\tilde{\mathcal{L}}_u \rightarrow \tilde{\mathcal{L}}'_u, \quad \text{όπου } u'_{jk} \rightarrow -u_{jk}, \quad \forall k \sim j. \quad (3.12)$$

Όπως γνωρίζουμε, οι καταστάσεις $|\Psi_w\rangle$ στον φυσικό υποχώρο είναι βαθμωτά συμμετρικές, δηλαδή αναλλοίωτες κάτω από GT. Για να επιτύχουμε τη συμμετρικοποίηση της κατάστασης $|\tilde{\Psi}_u\rangle$ καθώς μεταβαίνει στον φυσικό υποχώρο, θα πρέπει να αναζητήσουμε ένα μηχανισμό ο οποίος δεν θα εξαρτάται από τις διαμορφώσεις του u_{jk} . Στην επόμενη παράγραφο περιγράφεται αναλυτικά ο μηχανισμός αυτός.

3.4 Complex bond and matter fermions (cbf) & (cmf)

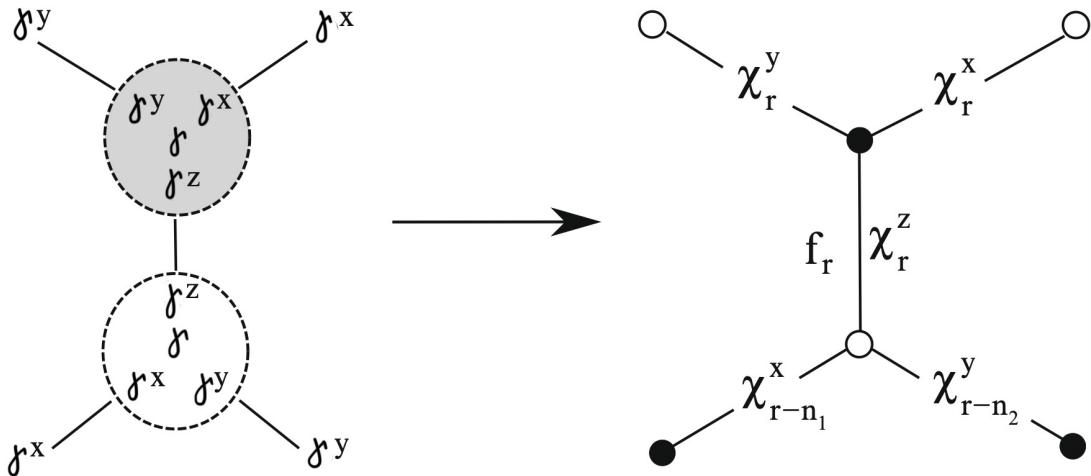


Fig. 3.2 Γραφική αναπαράσταση complex bond και complex matter φερμιονίων στο πλέγμα

Ορίζουμε τα cbf μέσω των τελεστών $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger$ και $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}$, οι οποίοι περιγράφουν την κατάσταση στις ενώσεις του δεσμού $\langle ij \rangle$, με τον δείκτη α να δηλώνει τη διεύθυνση του δεσμού.

$$\chi_{\langle ij \rangle_\alpha} = \frac{1}{2} (\gamma_i^\alpha - i\gamma_j^\alpha), \quad \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger = \frac{1}{2} (\gamma_i^\alpha + i\gamma_j^\alpha). \quad (3.13)$$

Μπορείτε να φανταστείτε τους τελεστές $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger$ και $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}$ σαν τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής:

$$\begin{aligned} \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger &\rightarrow \text{δημιουργία cbf στο δεσμό}, \\ \chi_{\langle ij \rangle_\alpha} &\rightarrow \text{καταστροφή cbf στο δεσμό}. \end{aligned}$$

Μετασχηματίζουμε την εξ. (3.13) στην ακόλουθη μορφή (θα την αξιοποιήσουμε αργότερα):

$$\gamma_i^\alpha = \chi_{\langle ij \rangle_\alpha} + \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger, \quad i\gamma_j^\alpha = \chi_{\langle ij \rangle_\alpha} - \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger \quad (3.14)$$

Η έκφραση του δεσμού $u_{\langle ij \rangle_\alpha}$ σε συνάρτηση των $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger$ και $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}$ είναι:

$$\begin{aligned} u_{\langle ij \rangle_\alpha} &= (i\gamma_i^\alpha \gamma_j^\alpha) \\ &= (\chi_{\langle ij \rangle_\alpha} + \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger)(\chi_{\langle ij \rangle_\alpha} - \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger) \\ &= \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger \chi_{\langle ij \rangle_\alpha} - (\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger)^2 + (\chi_{\langle ij \rangle_\alpha})^2 - \chi_{\langle ij \rangle_\alpha} \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger, \quad [\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger, \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}]_+ = \delta_{ij} \\ &= 2\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger \chi_{\langle ij \rangle_\alpha} - 1. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Αναλόγως της τιμής $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}$ παρουσιάζονται τα εξής αποτελέσματα:

$$\begin{aligned} \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger \chi_{\langle ij \rangle_\alpha} &= +1, \quad \rightarrow u_{\langle ij \rangle_\alpha} = +1, \text{ Κανονική διάδοση.} \\ \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger \chi_{\langle ij \rangle_\alpha} &= 0, \quad \rightarrow u_{\langle ij \rangle_\alpha} = -1, \text{ Αλλαγή φάσης } \pi, \text{ που αντιστοιχεί σε τοπικό flux.} \end{aligned}$$

Ορίζουμε τα cmf μέσω των τελεστών f_r και f_r^\dagger , οι οποίοι περιγράφουν της ενώσεις των κεντρικών φερμιονίων majorana από το υπόπλεγμα A (even) στο υπόπλεγμα B (odd):

$$f_r = \frac{1}{2}(\gamma_{A,r} + i\gamma_{B,r}), \quad f_r^\dagger = \frac{1}{2}(\gamma_{A,r} - i\gamma_{B,r}). \quad (3.16)$$

Μπορείτε να φανταστείτε τους τελεστές f_r^\dagger και f_r σαν τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής:

$$\begin{aligned} f_r^\dagger &\rightarrow \text{δημιουργία cmf,} \\ f_r &\rightarrow \text{καταστροφή cmf.} \end{aligned}$$

Μετασχηματίζουμε την εξ. (3.16) στην ακόλουθη μορφή (θα την αξιοποιήσουμε αργότερα):

$$\gamma_{A,r} = f_r + f_r^\dagger, \quad i\gamma_{B,r} = f_r - f_r^\dagger \quad (3.17)$$

Με βάση την εξ. (3.13) και (3.16) ο τελεστής βαθμίδας $\hat{D} = \gamma^x \gamma^y \gamma^z \gamma$ του υποπλέγματος A και B μετασχηματίζεται:³

$$D_{A,r} = [(\chi_r^x)^\dagger + \chi_r^x] [(\chi_r^y)^\dagger + \chi_r^y] [(\chi_r^z)^\dagger + \chi_r^z] [f_r^\dagger + f_r]. \quad (3.18)$$

$$D_{B,r} = \left[\left(\chi_{r-n_1}^x \right)^\dagger - \chi_{r-n_1}^x \right] \left[\left(\chi_{r-n_2}^y \right)^\dagger - \chi_{r-n_2}^y \right] \left[\left(\chi_r^z \right)^\dagger - \chi_r^z \right] [f_r^\dagger - f_r]. \quad (3.19)$$

³ Ισχύει ότι $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha} \equiv \chi_r^\alpha$ και $\chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger \equiv (\chi_r^\alpha)^\dagger$.

Με βάση την εξ. (3.18) και (3.19), ορίζουμε τον προβολικό τελεστή όπως παρουσιάστηκε από τον Hong Yao στο [13]:

$$P = \frac{1 + \sum_{\nu} D_{\nu} + \sum_{\nu < \nu'} D_{\nu} D_{\nu'} + \cdots + \prod_{\nu} D_{\nu}}{2^N}. \quad (3.20)$$

- Ο όρος $1 + \sum_{\nu} D_{\nu}$: Περιλαμβάνει την "κενή κατάσταση" (δηλαδή χωρίς καμία εφαρμογή των D_{ν}).
- Ο όρος $\sum_{\nu} D_{\nu}$: Περιλαμβάνει όλους τους μεμονωμένους τοπικούς περιορισμούς.
- Ο όρος $\sum_{\nu < \nu'} D_{\nu} D_{\nu'}$: Περιλαμβάνει όλους τους συνδυασμούς δύο τοπικών περιορισμών.
- Ο όρος $\prod_{\nu} D_{\nu}$: Περιλαμβάνει τον πλήρη συνδυασμό όλων των τοπικών περιορισμών.
- Ο παράγοντας 2^N στον παρονομαστή είναι για κανονικοποίηση, επίσης ο προβολικός τελεστής P πρέπει να πληρεί την συνθήκη $P^2 = P$.

Ας υποθέσουμε ότι εξετάζουμε ένα σύστημα που αποτελείται από 8 φερμιόνια Majorana. Το σύστημα αυτό περιλαμβάνει $N = 2$ τοποθεσίες, δηλαδή $\nu = 1, 2$, με τους D_1 και D_2 να αντιστοιχούν στους τοπικούς περιορισμούς. Ο προβολικός τελεστής, σύμφωνα με την εξ. (3.20) είναι:

$$\begin{aligned} P &= \frac{1 + D_1 + D_2 + D_1 D_2}{4} \\ &= \prod_{\nu=1}^2 \frac{1 + D_{\nu}}{2} \quad (\text{παραγοντοποίηση κατά Yao}) \\ &= \frac{1 + D_1}{2} \cdot \frac{1 + D_2}{2} \\ &= \frac{1 + D_1 + D_2 + D_1 D_2}{4}. \end{aligned}$$

Συνεπώς η εξ. (3.20) απλοποιείται μέσω της παραγοντοποίησης κατά Yao [13] ως:

$$P = \prod_{\nu} \frac{1 + D_{\nu}}{2}. \quad (3.21)$$

Με βάση πλέον την τελική μορφή του προβολικού τελεστή P , η μετάβαση της κατάστασης $|\tilde{\Psi}_u\rangle$ από τον εκτεταμένο χώρο $\tilde{\mathcal{L}}$ στο φυσικό υπόχωρο $\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{flux}} \otimes \mathcal{L}_{\text{matter}}$ επιτυχάνεται:

$$|\Psi_w\rangle = \prod_{\nu} \frac{1 + D_{\nu}}{2} |\tilde{\Psi}_u\rangle. \quad (3.22)$$

Με τη χρήση του προβολικού τελεστή P , καταφέραμε να πραγματοποιήσουμε συμμετροποίηση της κβαντικής κατάστασης $|\tilde{\Psi}_u\rangle$ ως προς όλους τους τοπικούς GT δηλαδή καταφέραμε να συνυπολογίζουμε όλες τις δυνατές διαμορφώσεις του u_{jk} που προκύπτουν από το D_ν .

Παράδειγμα:

Έστω ότι έχουμε μια διαμόρφωση u_{jk} για έναν συγκεκριμένο δεσμό. Όπως γνωρίζουμε, οι δυνατές τιμές του δεσμού είναι $u_{jk} = \pm 1$. Η κατάσταση $|\tilde{\Psi}_u\rangle$ εξαρτάται από τη διαμόρφωση u_{jk} . Εφαρμόζοντας τον προβολικό τελεστή P στην $|\tilde{\Psi}_u\rangle$, δημιουργούμε μια νέα κατάσταση $|\Psi_w\rangle$ που περιλαμβάνει και τις δύο δυνατές διαμορφώσεις, η νέα κατάσταση πλέον δεν εξαρτάται από τις τιμές u_{jk} λόγω συμμετροποιήσης της:

$$|\Psi_w\rangle = \frac{1}{2}(|\tilde{\Psi}_{u_{jk}=+1}\rangle + |\tilde{\Psi}_{u_{jk}=-1}\rangle).$$

Οι καταστάσεις $|\Psi_w\rangle$ εμφανίζουν εξάρτηση μόνο από την τοπολογική κλάση w_p :

$$w_{pn} = \prod_{(j,k) \in \text{boundary}(p)} u_{jk}, \quad (j \in \text{even υποπλέγμα}, \kappa \in \text{odd υποπλέγμα}). \quad (3.23)$$

Οι δεσμοί (j, k) λαμβάνονται με κατεύθυνση από την κορυφή j , που ανήκει στο even υποπλέγμα, προς την κορυφή k , που ανήκει στο odd υποπλέγμα. Αυτός ο προσανατολισμός εξασφαλίζει ότι το w_{pn} υπολογίζεται με συνέπεια για όλες τις πλακέτες. Η εξ. (3.25) αποτελείται από ένα γινόμενο έξι τοπικών δεσμών u_{jk} για κάθε πλακέτα.

Παράδειγμα:

Έστω για μια συγκεκριμένη πλακέτα οι έξι τοπικοί δεσμοί παρουσιάζουν την εξής διαμόρφωση ($u_1 = +1, u_2 = +1, u_3 = -1, u_4 = +1, u_5 = -1, u_6 = -1$), συνεπώς ο τελεστής ροής w_p παρουσιάζει την εξής τιμή:

$$\begin{aligned} w_p &= (u_1)(u_2)(u_3)(u_4)(u_5)(u_6) \\ &= (+1)(+1)(-1)(+1)(-1)(-1) \\ &= -1, \quad \text{εμφάνιση ροής στην πλακέτα.} \end{aligned}$$

3.5 Unbound Majorana modes (UMBs) & Majorana zero modes (MZMs)

⁴Έστω ότι εξετάζουμε μία συγκεκριμένη πλακέτα του συστήματος. Όπως είναι γνωστό, κάθε πλακέτα αποτελείται από έξι δεσμούς (cbf) και τρεις κεντρικές ενώσεις φερμιονίων ύλης (cmf) (βλ. Σχ. 3.1). Η τοπική ροή $u_{\langle ij \rangle}$ στους δεσμούς συνδέεται μέσω της εξ. (3.15), και μπορεί να λάβει τις τιμές $u_{\langle ij \rangle} = \pm 1$. Όταν το γινόμενο των $u_{\langle ij \rangle}$ (βλ. εξ. (3.23)), δώσει $w_p = +1$, η πλακέτα βρίσκεται σε φάση χωρίς ροή. Σε αυτή την περίπτωση, τα cmf παραμένουν εντός των κεντρικών τους ψέσεων και η κυματοσυνάρτησή τους ψεωρείται απεντοπισμένη. Πολύ ενδιαφέροντα φαινόμενα εμφανίζονται όταν η πλακέτα βρίσκεται σε φάση με ροή (vison), δηλαδή όταν $w_p = -1$. Σε αυτή την περίπτωση, οι κυματοσυναρτήσεις των cmf ψεωρούνται εντοπισμένες, με τα cmf να παραμένουν παγιδευμένα εντός των συνόρων της πλακέτας εμφανίζοντας εξωτικές ιδιότητες ανάλογα με τις συνοριακές συνθήκες στους τοπικούς δεσμούς. Αν γύρω από το cmf παρατηρείται συμμετρία στους τοπικούς δεσμούς, δηλαδή $u_{\langle ij \rangle} = +1$ και $w_p = -1$, τότε το cmf παραμένει εντοπισμένο μέσα στα όρια της πλακέτας και ενδέχεται να εμφανίσει συμπεριφορά τύπου ζευγαρώματος, παρόμοια με το Cooper pairing. Αντιθέτως, σε περίπτωση σπασίματος συμμετρίας στους τοπικούς δεσμούς, δηλαδή $u_{\langle ij \rangle} = \pm 1$ και $w_p = -1$, το cmf διασπάται σε δύο UMBs⁵, τα οποία κινούνται παγιδευμένα μέσα στα σύνορα της πλακέτας.

Έστω ότι το cmf βρίσκεται πλέον στο όριο μεταξύ μιας πλακέτας χωρίς ροή ($w_p = +1$) και μιας με ροή ($w_p = -1$). Ποια ως είναι η συμπεριφορά του;⁶ Ορίζουμε αρχικά το ενεργειακό κόστος αλλαγής ροής:

$$\Delta_{\text{flux}} := E_{\min}^{w_p=-1} - E_{\min}^{w_p=+1}. \quad (3.24)$$

Αν το hopping h είναι πολύ μικρό σε σχέση με το Δ_{flux} , δηλαδή $h \ll \Delta_{\text{flux}}$, τότε το cmf δεν μπορεί να ξεφύγει από την περιοχή με $w_p = -1$. Σε αυτή την περίπτωση, παραμένει παγιδευμένο στην περιοχή ροής και διασπάται σε δύο UMBs. Αντίθετα, όταν $h \gg \Delta_{\text{flux}}$, το cmf διαθέτει αρκετή κινητική ενέργεια ώστε να υπερβεί το ενεργειακό φράγμα της περιοχής με ροή. Τότε, μπορεί να διαφύγει προς περιοχές $w_p = +1$, όπου κινείται ελεύθερα.

⁴Το w_p μετρά την τοπική ροή σε μία συγκεκριμένη πλάκα. Το W_p μπορεί να αναφέρεται στη συνολική κατάσταση του συστήματος ή σε ένα άνθροισμα από πλακέτες.

⁵UMBs ≡ Αδέσμευτα φερμιόνια Majorana

⁶Οι όροι Δ_{flux} και hopping h ως αναλυθούν εκτενώς στο Κεφ. 4.

Η ενέργεια σύζευξης μεταξύ των UMBs είναι:

$$\Delta E \sim e^{-L/\xi}, \quad (3.25)$$

όπου ξ είναι το μήκος συσχέτισης. Στην περίπτωση που η απόσταση μεταξύ των δύο UMBs γίνει πολύ μεγαλύτερη από το μήκος συσχέτισης, δηλαδή $L \gg \xi$, η ενέργεια σύζευξης τους τείνει στο μηδέν, δηλαδή $\Delta E = 0$. Αυτό επιτρέπει τον σχηματισμό μηδενικών καταστάσεων Majorana (MZMs). Στις 19/2/2025, η Microsoft παρουσίασε το Majorana 1 chip [14], το οποίο αποτελείται από έξι χβαντικά qubits βασισμένα σε MZMs. Το chip αυτό είναι βασισμένο στο μοντέλο του Kitaev σε μία διάσταση [15] (Kitaev 1D chain). Αν το hopping h είναι συγχρίσιμο με το ενεργειακό κόστος αλλαγής ροής, δηλαδή $h \sim \Delta_{\text{flux}}$, τότε το cmf μπορεί είτε να παγιδευτεί είτε να διαφύγει, ανάλογα με τις τοπικές διακυμάνσεις. Η πιθανότητα διαφυγής εξαρτάται από τις λεπτομέρειες του gauge πεδίου και από θερμικές διακυμάνσεις του συστήματος.

Chapter 4

Relation Between Hamiltonians and Bogoliubov Transformations

Sammury

Στο Κεφ. 4, βασισμένοι στα [1], [2], [16] [17], [18], [19], [20], παρουσιάζουμε πώς η Χαμιλτονιανή από τη βάση Majorana μεταβαίνει στη βάση των cbf και cmf. Στη συνέχεια, εισάγουμε τους μετασχηματισμούς Bogoliubov-de Gennes και παρουσιάζουμε τη διαγωνοποιημένη πλέον Χαμιλτονιανή στη θεμελιώδη κατάσταση (Ground state), την οποία χρησιμοποιήσουμε στο Κεφ. 5 για εξαγωγή του διαγράμματος φάσης.

4.1 Hamiltonian matrix in terms of Majorana fermions

Όπως ήδη γνωρίζουμε από την εξ. (3.10), η Χαμιλτονιανή στη βάση Majorana ορίζεται:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{4} \sum_{\langle j,k \rangle} A_{jk} \gamma_j \gamma_k, \quad A_{jk} = \begin{cases} 2J_{\alpha_{jk}} \hat{u}_{jk}, & \text{αν } j \text{ και } k \text{ ενώνονται,} \\ 0, & \text{οτιδήποτε άλλο.} \end{cases}$$

Θα προσπαθήσουμε να εκφράσουμε τη Χαμιλτονιανή ως γινόμενο πινάκων, αργότερα στο Κεφάλαιο θα γίνει κατανοητό γιατί επιλέξαμε αυτή τη μορφή.

Αρχικά εκφράζουμε την Χαμιλτονιανή σε άθροισμα υποπλεγμάτων A και B:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{4} \sum_{\langle j,k \rangle} A_{jk} \gamma_{A_r} \gamma_{B_r}.$$

Τα δυο κεντρικά φερμιόνια Majorana $\gamma_{A_r}, \gamma_{B_r}$ μπορούν να εκφραστούν μέσο ενός πίνακα:

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} \gamma_{A_r} \\ \gamma_{B_r} \end{pmatrix}.$$

Εκφράζουμε το A_{jk} ως ένα πίνακα (2X2) ο οποίος αποτελείται από τέσσερεις υποπίνακες:

$$A = \begin{pmatrix} F & M \\ -M^T & -D \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

- F : περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο διαδοχικών υποπλεγμάτων A (δεύτεροι γείτονες).
- D : περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο διαδοχικών υποπλεγμάτων B (δεύτεροι γείτονες).
- M : περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των υποπλεγμάτων A και B (Πρώτοι γείτονες). Ο πίνακας M ορίζεται ως $M = u_{\langle ij \rangle} J_{\alpha_i}$.

Γενικά ο πίνακας A αναπαριστά τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των διάφορων θέσεων μέσα στο πλέγμα. Ο πίνακας A είναι αντισυμετρικός επομένως ($F^T = -F$ και $D^T = -D$). Η Χαμιλτονιανή πλέον του συστήματος παίρνει τη μορφή:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{2} \boldsymbol{\gamma}^T A \boldsymbol{\gamma}.$$

Σε μορφή πίνακα :

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \gamma_{A_r} & \gamma_{B_r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F & M \\ -M^T & -D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{A_r} \\ \gamma_{B_r} \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Στο μοντέλο του Kitaev δεν λαμβάνουμε υπόψη τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ δεύτερων γειτόνων. Θεωρούμε, λοιπόν, ότι ($F = D = 0$), η Χαμιλτονιανή πλέον είναι:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \gamma_{A_r} & \gamma_{B_r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & M \\ -M^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{A_r} \\ \gamma_{B_r} \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Η εξ. (4.3) δεν μπορεί να αποδώσει την πλήρη εικόνα στο μοντέλο του Kitaev. Όπως γνωρίζουμε, στη θεμελιώδη κατάσταση έχουμε απουσία ροών (no visons). Όλες οι πλακέτες εμφανίζουν τοπικούς δεσμούς $u_{\langle ij \rangle} = +1$ συνεπώς $w_{p_i} = +1$ για κάθε i . Σε

αυτήν την περίπτωση, λόγω μεταθετικής συμμετρίας¹ του συστήματος, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι $F = D = 0$. Η εισαγωγή ροών στο σύστημα προκαλεί σπάσιμο της μεταθετικής συμμετρίας, συνεπώς $F \neq D \neq 0$.

4.2 Hamiltonian matrix in terms of cbf and cmf

Είμαστε πλέον έτοιμοι να εκφράσουμε την εξ. (4.2) στη βάση των cbf και cmf.

Με βάση την εξ. (3.17):

$$\gamma_{A_r} = f_r + f_r^\dagger, \quad \gamma_{B_r} = i(f_r^\dagger - f_r).$$

Η μορφή της εξ. (4.2) στη βάση cbf και cmf είναι:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} f_r + f_r^\dagger & i(f_r^\dagger - f_r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F & M \\ -M^T & -D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_r + f_r^\dagger \\ i(f_r^\dagger - f_r) \end{pmatrix}.$$

Βήμα 1:

$$\begin{pmatrix} F & M \\ -M^T & -D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_r + f_r^\dagger \\ i(f_r^\dagger - f_r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(f_r + f_r^\dagger) + iM(f_r^\dagger - f_r) \\ -M^T(f_r + f_r^\dagger) - iD(f_r^\dagger - f_r) \end{pmatrix}.$$

Βήμα 2:

$$\begin{pmatrix} f_r + f_r^\dagger & i(f_r^\dagger - f_r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(f_r + f_r^\dagger) + iM(f_r^\dagger - f_r) \\ -M^T(f_r + f_r^\dagger) - iD(f_r^\dagger - f_r) \end{pmatrix}.$$

Από τον πολλαπλασιασμό στο βήμα 2 καταλήγουμε στην εξής Χαμιλτονιανή:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{2} & \left[(f_r + f_r^\dagger)^T F (f_r + f_r^\dagger) + (f_r + f_r^\dagger)^T iM (f_r^\dagger - f_r) \right. \\ & \left. + i(f_r^\dagger - f_r)^T (-M^T) (f_r + f_r^\dagger) + i(f_r^\dagger - f_r)^T (-iD) (f_r^\dagger - f_r) \right]. \end{aligned}$$

¹Η μεταθετική συμμετρία αναφέρεται στην ομοιογένεια του συστήματος, δηλαδή αν οι φυσικές ιδιότητες παραμένουν αναλλοίωτες κάτω από μετατοπίσεις στο πλέγμα

Στη συνέχεια απλοποιούμε τους τέσσερεις ορούς:

Πρώτος όρος:

$$\begin{aligned}(f_r + f_r^\dagger)^T F (f_r + f_r^\dagger) &= \cancel{f_r^T F f_r} + f_r^T F f_r^\dagger + f_r^{\dagger T} F f_r + \cancel{f_r^{\dagger T} F f_r^\dagger} \\ &= f_r^T F f_r^\dagger + f_r^{\dagger T} F f_r.\end{aligned}$$

Δεύτερος όρος:

$$(f_r + f_r^\dagger)^T iM (f_r^\dagger - f_r) = i f_r^T M f_r^\dagger - i f_r^T M f_r + i f_r^{\dagger T} M f_r^\dagger - i f_r^{\dagger T} M f_r.$$

Τρίτος όρος:

$$i(f_r^\dagger - f_r)^T (-M^T) (f_r + f_r^\dagger) = -i f_r^{\dagger T} M^T f_r - i f_r^{\dagger T} M^T f_r^\dagger + i f_r^T M^T f_r + i f_r^T M^T f_r^\dagger.$$

Τέταρτος όρος:

$$\begin{aligned}i(f_r^\dagger - f_r)^T (-iD) (f_r^\dagger - f_r) &= \cancel{f_r^{\dagger T} D f_r^\dagger} - f_r^{\dagger T} D f_r - f_r^T D f_r^\dagger + \cancel{f_r^T D f_r} \\ &= -f_r^{\dagger T} D f_r - f_r^T D f_r^\dagger.\end{aligned}$$

Η Χαμιλτονιανή καταλήγει στην εξής μορφή:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}} = \frac{i}{2} &\left[f_r^T F f_r^\dagger + f_r^{\dagger T} F f_r + i f_r^T M f_r^\dagger - i f_r^T M f_r + i f_r^{\dagger T} M f_r^\dagger - i f_r^{\dagger T} M f_r \right. \\ &\left. - i f_r^{\dagger T} M^T f_r - i f_r^{\dagger T} M^T f_r^\dagger + i f_r^T M^T f_r + i f_r^T M^T f_r^\dagger - f_r^{\dagger T} D f_r - f_r^T D f_r^\dagger \right].\end{aligned}$$

Ομαδοποιούμε τους όρους:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \left[f_r^\dagger (M + M^T + i(F - D)) f_r + f_r^\dagger (M + M^T + i(F + D)) f_r^\dagger + f_r (M + M^T - i(F + D)) f_r \right].$$

Ορίζουμε τα στοιχεία πίνακα:

$$\Delta = M - M^T + i(F + D), \quad (4.4)$$

$$h = M + M^T + i(F - D). \quad (4.5)$$

Η Χαμιλτονιανή πλέον σε μορφή πίνακα παίρνει την μορφή:

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} f_r^\dagger & f_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h & \Delta \\ \Delta^\dagger & -h^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_r \\ f_r^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

- h : Αντιστοιχεί στη διάδοση (hopping) των cmf υπό σταθερό υπόβαθρο των gauge πεδίων $u_{\langle ij \rangle}$. Με απλά λόγια, εκφράζει την πιθανότητα κίνησης του cmf από τη θέση i στη θέση j .
- Δ : Αντιστοιχεί στη σύζευξη (pairing) των cmf και σχετίζεται με την τοπολογική υπεραγωγιμότητα (topological superconductivity). Δηλαδή, τα cmf μιμούνται τις ιδιότητες των ζευγών Cooper, με μόνη διαφορά ότι το φαινόμενο της σύζευξης προκαλείται από το gauge πεδίο και την τοπολογία του πλέγματος, και όχι από τα φωνόνια, όπως στο κλασικό μοντέλο BCS (Bardeen–Cooper–Schrieffer theory) [21].

4.3 Bogoliubov-de Gennes (BdG) transformations

Παρατηρούμε ότι η Χαμιλτονιανή της εξ. (4.6) εμφανίζει τη μορφή BdG. Γενικά, Χαμιλτονιανές της μορφής BdG περιγράφουν συστήματα υπεραγωγιμότητας (superconductivity). Στο μοντέλο του Kitaev, η μορφή BdG χρησιμοποιείται για να εξηγήσει τις τοπολογικές φάσεις, όπου τα cmf εμφανίζουν όρους διάδοσης (hopping terms) και όρους ζεύξης (pairing terms).

Εφαρμόζουμε αρχικά τον BdG μετασχηματισμό όπως αυτός παρουσιάστηκε στην [20]. Η Σημαντικότητα του μετασχηματισμού BdG θα φανεί στη συνέχεια:

$$\begin{pmatrix} f_r \\ f_r^\dagger \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Ο μετασχηματισμός BdG επιτρέπει την έκφραση των cmf σε μια νέα βάση, η οποία αποτελείται από quasiparticles (qsp) α_n . Η μετάβαση αυτή πραγματοποιείται μέσω ενός μοναδιαίου τελεστή \hat{T} , ο οποίος ικανοποιεί:

$$TT^\dagger = 1.$$

Η χρήση του τελεστή \hat{T} εξασφαλίζει ότι η φυσική του συστήματος παραμένει αναλλοίωτη, διατηρώντας τις αντιμεταθετικές ιδιότητες των φερμιονικών τελεστών, δηλαδή:

$$[\alpha_i, \alpha_j^\dagger]_+ = \delta_{ij}.$$

Ορίζουμε ως \mathcal{H}_{BdG} :

$$\mathcal{H}_{BdG} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ \Delta^\dagger & -h^T \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Τα ιδιοδυανίσματα και οι ιδιοτιμές της \mathcal{H}_{BdG} βρίσκονται μέσω της εξίσωσης:

$$\mathcal{H}_{BdG} \Psi_n = E_n \Psi_n. \quad (4.9)$$

Τα ιδιοδιανύσματα της εξ. (4.9) έχουν τη μορφή:

$$\Psi_n = \begin{pmatrix} X_n \\ Y_n \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Η αντικατάσταση των εξ. (4.8) και (4.10) στην (4.9) οδηγεί στις εξισώσεις:

$$hX_n + \Delta Y_n = E_n X_n, \quad (4.11)$$

$$\Delta^\dagger X_n - h^T Y_n = E_n Y_n. \quad (4.12)$$

Με βάση την εξ. (4.11) και (4.12), και δεδομένου ότι $TT^\dagger = 1$, ο πίνακας T προκύπτει ως συνδυασμός των ιδιοδιανυσμάτων της \mathcal{H}_{BdG} :

$$T = \begin{pmatrix} X^T & Y^\dagger \\ Y^T & X^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Οι πίνακες X και Y έχουν την ίδια διάσταση με τη Χαμιλτονιανή \mathcal{H}_{BdG} και αποτελούνται από έναν συνδυασμό των ιδιοδιανυσμάτων της \mathcal{H}_{BdG} . Οι πίνακες X και Y ικανοποιούν τις ακόλουθες ιδιότητες εξασφαλίζοντας ότι ο πίνακας T είναι μονάδιακός:

$$\begin{aligned} XX^\dagger + YY^\dagger &= I, \\ XY^T - YX^T &= 0. \end{aligned}$$

Γνωρίζοντας πλέον τη μορφή του πίνακα T , είμαστε σε θέση, μέσω της εξ. (4.7), να παρουσιάσουμε πώς οι τελεστές cmf εκφράζονται στη βάση των α_n . Τα α_n είναι μια σύνθετη κατάσταση που εξαρτάται και από τη τοπική ροή $u_{\langle ij \rangle}$ και από τα cmf:

$$\begin{aligned} f_{r_i} &= X_{ik}^T a_k + Y_{ik}^\dagger a_k^\dagger, \\ f_{r_j}^\dagger &= Y_{jl}^T a_l + X_{jl}^\dagger a_l^\dagger. \end{aligned}$$

Ό μοναδιαίος μετασχηματισμός (unitary transformation) $T^\dagger \mathcal{H}_{BdG} T$ αποδίδει ενα διαγώνιο πίνακα με στοιχεία πίνακα τις ιδιοτιμές της \mathcal{H}_{BdG} . Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η αναπαράσταση του πίνακα T βρίσκεται στη βάση των ιδιοκαταστάσεων της \mathcal{H}_{BdG} .

$$T^\dagger \mathcal{H}_{BdG} T = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Η εφαρμογή του μετασχηματισμού BdG (βλ. εξ. (4.7)) στην εξ (4.6) οδηγεί στην ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2} (\alpha^\dagger \ \alpha) T^\dagger \begin{pmatrix} h & \Delta \\ \Delta^\dagger & -h^T \end{pmatrix} T \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (\alpha^\dagger \ \alpha) T^\dagger \mathcal{H}_{BdG} T \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (\alpha^\dagger \ \alpha) \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (\alpha^\dagger \ \alpha) \begin{pmatrix} E\alpha \\ -E\alpha^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n>0} (\alpha_n^\dagger E_n \alpha_n - \alpha_n E_n \alpha_n^\dagger) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n>0} (E_n \alpha_n^\dagger \alpha_n - E_n \alpha_n \alpha_n^\dagger), \quad [\alpha_n^\dagger, \alpha_n]_+ = \delta_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n>0} (E_n \alpha_n^\dagger \alpha_n - E_n (1 - \alpha_n^\dagger \alpha_n)) \\ &= \sum_{n>0} E_n \alpha_n^\dagger \alpha_n - \frac{1}{2} \sum_{n>0} E_n \\ &= \sum_{n>0} E_n (\alpha_n^\dagger \alpha_n - \frac{1}{2}), \quad n : \text{Ο αριθμός της πλακέτας.} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Οι διεγέρσεις α_n δίνονται από τις ιδιοτιμές E_n , οι οποίες καθορίζουν τη συμπεριφορά των cmf υπό την επίδραση της ροής.

Ορίζουμε ως θεμελιώδη κατάσταση:

$$\alpha_i |0\rangle = 0, \quad (4.16)$$

δηλαδή, την κατάσταση μηδενικής διεγερσιμότητας του συστήματος. Πρόκειται για την κατάσταση στην οποία δεν υπάρχουν qsp, καθώς βρίσκονται κλειδωμένα στις θέσεις τους

υπό σταθερό gauge πεδίο, δηλαδή στον τομέα χωρίς ροές. Όλα τα qsp βρίσκονται στη θεμελιώδη στάθμη $E_{g.s}$ (vacum state).

Η Ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης (ground state):

$$E_{g.s} = \langle 0 | \tilde{\mathcal{H}} | 0 \rangle = -\frac{1}{2} \sum_n E_n. \quad (4.17)$$

Ο πρώτος όρος στην εξ. (4.15) περιγράφει τις διεγέρσεις των qsp που κινούνται στο gauge field. Η αλλαγή $w_p = +1 \rightarrow w_p = -1$ δημιουργεί (διεγέρει) δύο ελεύθερα qsp στην ανώτερη ενεργειακή στάθμη. Η αλλαγή ροής επηρεάζει το $E_{g.s}$ λόγω μεταβολής του τοπικού πεδίου $u_{\langle ij \rangle}$.

Στη εξ. (4.15) δεν αναφερθήκαμε στη διάκριση μεταξύ παρουσίας ή απουσίας ροής. Θα παρουσιάσουμε πώς οι ιδιοκαταστάσεις διαφορετικών τομέων ροής μπορούν να σχετίζονται μεταξύ τους. Έστω ότι οι β και α είναι οι τελεστές στους οποίους διαγωνοποιούνται δύο διαφορετικοί τομείς ροής. Με δείκτη F υποθέτουμε ένα σύστημα με ροές και με δείκτη 0 ένα σύστημα χωρίς ροές.

Κάθε σύστημα διαγωνοποιείται μέσω του δικού του μετασχηματισμού BdG [20]:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} X_0^* & Y_0^* \\ Y_0 & X_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ f^\dagger \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} \quad \text{αντιστροφή} \quad \begin{pmatrix} X_0^T & Y_0^\dagger \\ Y_0^T & X_0^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ f^\dagger \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} X_F^* & Y_F^* \\ Y_F & X_F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ f^\dagger \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} \quad \text{αντιστροφή} \quad \begin{pmatrix} X_F^T & Y_F^\dagger \\ Y_F^T & X_F^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ f^\dagger \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Εξισώνουμε της δύο εκφράσεις:

$$\begin{pmatrix} X_0^T & Y_0^\dagger \\ Y_0^T & X_0^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_F^T & Y_F^\dagger \\ Y_F^T & X_F^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix}.$$

Πολλαπλασιάζουμε την εξ με τον αντίστροφο πίνακα του $\begin{pmatrix} X_F^T & Y_F^\dagger \\ Y_F^T & X_F^\dagger \end{pmatrix}$:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} X_F^* & Y_F^* \\ Y_F & X_F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_0^T & Y_0^\dagger \\ Y_0^T & X_0^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} X_F^* X_0^T + Y_F^* Y_0^T & X_F^* Y_0^\dagger + Y_F^* X_0^\dagger \\ Y_F X_0^T + X_F Y_0^T & Y_F Y_0^\dagger + X_F X_0^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \mathcal{X}^* & \mathcal{Y}^* \\ \mathcal{Y} & \mathcal{X} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^\dagger \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} b \\ b^\dagger \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Η σχέση (4.18) περιγράφει τη μεταβολή των qsp κατά την αλλαγή του τομέα ροής του συστήματος. Ουσιαστικά, δείχνει πώς η παρουσία ή η απουσία ροής επηρεάζει και μετασχηματίζει τα qsp. Αυτό είναι σημαντικό γιατί δείχνει πώς το σύστημα μεταβαίνει από έναν τομέα ροής σε έναν άλλο, διατηρώντας όμως την τοπολογική του δομή. Η μελέτη του διαγράμματος φάσης σε συστήματα όπου υπάρχουν ροές είναι ιδιαίτερα δύσκολη. Ο αριθμός των πιθανών τομέων ροής αυξάνεται εκθετικά με το μέγεθος του συστήματος. Για N πλακέτες, υπάρχουν 2^N διαφορετικές καταστάσεις ροής, γεγονός που καθιστά αδύνατη την πλήρη χαρτογράφηση όλων των διαμορφώσεων σε μεγάλες κλίμακες. Οι πλακέτες w_{p_i} δεν είναι ανεξάρτητες, αλλά συνδέονται μέσω των δεσμών $u_{\langle ij \rangle}$. Αν αλλάξει μία ροή σε μία πλακέτα, μπορεί να επηρεάσει τις γειτονικές ροές, μεταβάλλοντας τη συνολική ενεργειακή διαμόρφωση του συστήματος. Αυτό δημιουργεί μακροσκοπικές συσχετίσεις, που δυσκολεύουν την αναλυτική μελέτη του συστήματος.

4.4 Ground State Flux Sector

Έστω ότι επιψυμούμε την εύρεση του απόλυτου ελάχιστου στο σύστημα, για να το πετύχουμε αυτό θα πρέπει να συγκρίνουμε όλες τις τιμές $E_{g.s}$ για όλους τους πιθανούς τομείς ροής. Αυτό είναι πρακτικά αδύνατο. Ευτυχώς, λόγω της μεταθετικής συμμετρίας του συστήματος, γνωρίζουμε ότι η θεμελιώδης κατάσταση εμφανίζεται στον τομέα χωρίς ροές, δηλαδή όταν όλες οι πλακέτες παρουσιάζουν ιδιοτιμή $w_{p_i} = +1$. Αν και όλες οι πλακέτες έχουν την ίδια ιδιοτιμή $+1$, η διαμόρφωση των τοπικών δεσμών για κάθε w_{p_i} δεν είναι απαραίτητα ίδια (βλ. εξ. (3.25)), συνεπώς οι τιμές στο άθροισμα $E_{g.s}$ (βλ. εξ. (4.17)) να διαφέρουν για κάθε πλακέτα. Θεωρούμε ότι το σύστημα βρίσκεται σε χαμηλές θερμοκρασίες, όπου όλες οι πλακέτες εμφανίζουν την ίδια τοπική διαμόρφωση $u_{\langle ij \rangle} = +1$. Η κατάσταση χωρίς ροή ονομάζεται $|G^0\rangle$, με την αντίστοιχη θεμελιώδη κατάσταση των

cmf να συμβολίζεται ως $|\mathcal{M}_0\rangle$. Η πιθανότητα να αλλάξει ένας δεσμός $u_{\langle ij \rangle}$ ακολουθεί την κατανομή Boltzmann:

$$P \sim e^{-\Delta_{\text{flux}}/k_B T}. \quad (4.19)$$

Για χαμηλές θερμοκρασίες ($k_B T \ll \Delta_{\text{flux}}$), η πιθανότητα να αλλάξει ένας δεσμός είναι εκθετικά μικρή.

Θεωρούμε ότι το σύστημα βρίσκεται σε χαμηλές θερμοκρασίες, εντός του τομέα χωρίς ροές, δηλαδή στη θεμελιώδη κατάσταση. Για την απλοποίηση των πράξεων, μεταβαίνουμε στο χώρο των ορμών εφαρμόζοντας μετασχηματισμό Fourier (Fourier transform, Ft) στα cmf:

$$f_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_r e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} f_r,$$

Με αυτόν τον μετασχηματισμό, η εξ (4.6) παίρνει την ακόλουθη μορφή στο χώρο των ορμών:

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \begin{pmatrix} f_q^\dagger & f_{-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_q & -\Delta_q \\ -\Delta_q^* & -h_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_q \\ f_{-q}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Εκφράζουμε τα δυναμικά αλληλεπίδρασις J_x, J_y, J_z στο χώρο των ορμών μέσο της εξίσωσης:

$$S_q = \sum_{n_i} J_{\alpha_{n_i}} e^{iqn_i}, \quad (4.21)$$

όπου τα διανύσματα $\mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_x = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$, $\mathbf{n}_2 = \mathbf{n}_y = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$, $\mathbf{n}_3 = \mathbf{n}_z = (0, 0)$

εκφράζονται σε μονάδες του μήκους δεσμού και περιγράφουν τις ύπερσεις των γειτονικών ατόμων στο κυψελοειδές πλέγμα.

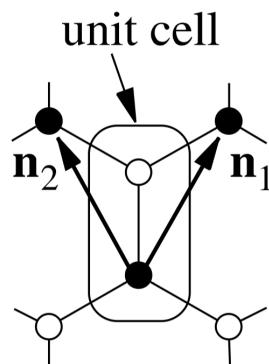


Fig. 4.1 Η μοναδιαία κυψελίδα του κυψελοειδούς πλέγματος, όπως χρησιμοποιείται στο μοντέλο του Kitaev. Στην απεικόνιση φαίνονται και τα διανύσματα πλέγματος που καθορίζουν τις κατευθύνσεις των δεσμών x , y , και z .

Διαχωρίζουμε την εξ. (4.21) σε πραγματικό και φανταστικό μέρος,

$$S_q = \text{Re}(S_q) + i\text{Im}(S_q):$$

$$\begin{aligned} S_q &= J_x e^{iqn_x} + J_y e^{iqn_y} + J_z \\ &= [J_x \cos(qn_x) + J_y \cos(qn_y) + J_z] + i[J_x \sin(qn_x) + J_y \sin(qn_y)] \\ \text{Re}(S_q) &= [J_x \cos(qn_x) + J_y \cos(qn_y) + J_z] \\ \text{Im}(S_q) &= [J_x \sin(qn_x) + J_y \sin(qn_y)]. \end{aligned}$$

Γενικά, γνωρίζουμε ότι στα μοντέλα του Kitaev εμφανίζονται φαινόμενα *p-wave* υπεραγωγιμότητας [22] (*p-wave, p-w*). Για να εξασφαλίσουμε *p-w*, απαιτούμε η συνάρτηση σύζευξης να είναι καθαρά φανταστική και αντισυμμετρική, δηλαδή $\Delta_q = -\Delta_{-q}$. Επιπλέον, η συνάρτηση h_q , η οποία περιγράφει τη διασπορά των cmf, δηλαδή πώς μεταβάλλεται η ενέργεια των cmf συναρτήσει της ορμής, απαιτούμε να είναι συμμετρική $h_q = h_{-q}$ και πραγματική. Συνεπώς, οι συναρτήσεις παίρνουν την εξής μορφή:

$$\Delta_q = -i\text{Im}(S_q) \text{ και } h_q = \text{Re}(S_q).$$

Ορίζουμε ως \mathcal{H}_{BdG} στο χώρο των ορμών:

$$\mathcal{H}_{BdG} = \begin{pmatrix} h_q & -\Delta_q \\ -\Delta_q^* & -h_q \end{pmatrix}.$$

Γνωρίζοντας πλέον την μορφή των Δ_q και h_q η \mathcal{H}_{BdG} ορίζεται:

$$\mathcal{H}_{BdG} = \begin{pmatrix} \text{Re}(S_q) & i\text{Im}(S_q) \\ -i\text{Im}(S_q) & -\text{Re}(S_q) \end{pmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές της \mathcal{H}_{BdG} (βλ. εξ. (4.9)) προσδιορίζονται από την εξίσωση:

$$\det(\mathcal{H}_{BdG} - EI) = 0.$$

Αναπτύσσοντας την ορίζουσα:

$$\det \begin{pmatrix} \text{Re}(S_q) - E_q & i\text{Im}(S_q) \\ -i\text{Im}(S_q) & -\text{Re}(S_q) - E_q \end{pmatrix} = 0,$$

$$(Re(S_q) - E_q)(-Re(S_q) - E_q) - (+i\text{Im}(S_q))(-i\text{Im}(S_q)) = 0$$

$$-(Re(S_q)^2 + \cancel{E_q Re(S_q)} - \cancel{E_q Re(S_q)} - E_q^2) - \text{Im}(S_q)^2 = 0$$

$$E_q^2 = \text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2$$

$$E_q = \pm \sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2}$$

$$E_q = \pm |S_q|. \quad (4.22)$$

Τα ιδιοδυανίσματα της \mathcal{H}_{BdG} ($\beta\lambda$ εξ. (4.9)) δίνονται ως:

$$\Psi = \begin{pmatrix} X_q \\ Y_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_q \\ -i\sin\theta_q \end{pmatrix},$$

όπου $\tan(2\theta_q) = -\frac{\text{Im}(S_q)}{\text{Re}(S_q)}$.²

Έχοντας βρει πλέον τα ιδιοδιανύσματα Ψ , ο μετασχηματισμός BdG παίρνει την μορφή:

$$\begin{pmatrix} f_q \\ f_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} f_q \\ f_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_q & -i\sin\theta_q \\ -i\sin\theta_q & \cos\theta_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Όταν $2\theta_q = 0$ τότε ο μετασχηματισμός BdG γίνεται:

$$\begin{pmatrix} f_q \\ f_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix}.$$

Τα cmf (f_q) παραμένουν τα ίδια με τα qsp (a_q). Δεν υπάρχει καμία ανάμειξη μεταξύ των f_q και των αντισωματίων τους f_{-q}^\dagger . Ο όρος σύζευξης Δ_q είναι μηδενικός. Το σύστημα συμπεριφέρεται σαν ένα σύστημα από ελεύθερα φερμιόνια χωρίς όρους σύζευξης.

²Η απόδειξη της σχέσης $\tan(2\theta_q) = -\frac{\text{Im}(S_q)}{\text{Re}(S_q)}$ και η εξήγηση της μορφής των X_q και Y_q βρίσκονται στο Appendix D.

Όταν $2\theta_q = \frac{\pi}{2}$, τότε έχουμε μέγιστο pairing, και ο BdG μετασχηματισμός είναι:

$$\begin{pmatrix} f_q \\ f_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{-q}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Τα cmf f_q δεν υπάρχουν πλέον ως ανεξάρτητες καταστάσεις. Έχουν αναμειχθεί πλήρως με τα αντισωματίδια τους f_{-q}^\dagger και έχουν γίνει Bogoliubov qsp. Η σύζευξη Δ_q είναι μέγιστη, και κάθε f_q έχει συνδυαστεί με ένα αντισωματίδιο f_{-q}^\dagger σχηματίζοντας μια υπεραγώγιμη κατάσταση.

Η γωνία $2\theta_q$ ελέγχει πόσο ισχυρό είναι η σύζευξη:

$2\theta_q = 0, \rightarrow$ Καμία ανάμειξη και μηδενική σύζευξη.

$0 < 2\theta_q < \frac{\pi}{2}, \rightarrow$ Μερικη σύζευξη, μερική ανάμειξη.

$2\theta_q = \frac{\pi}{2}, \rightarrow$ Μέγιστη σύζευξη, πλήρης ανάμειξη.

Ο μοναδιαίος μετασχηματισμός μας δίνει:

$$T^\dagger \mathcal{H}_{BdG} T = \begin{pmatrix} |S_q| & 0 \\ 0 & -|S_q| \end{pmatrix}.$$

Η εφαρμογή του μετασχηματισμού BdG (βλ. εξ. (4.23)) στην εξ. (4.20) αποδίδει την τελική, διαγωνοποιημένη μορφή της Χαμιλτονιανής του συστήματος στον τομέα μηδενικής ροής (η διαδικασία είναι ανάλογη με αυτή που ακολουθήθηκε για την εξαγωγή της Χαμιλτονιανής στην εξ. (4.15)):

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \sum_q |S_q| (2\alpha_q^\dagger \alpha_q - 1)$$

(4.25)

Μεταβάλλοντας τις παραμέτρους J_x , J_y και J_z στην εξ. (4.25), υπολογίζουμε τα ενεργειακά φάσματα που αντιστοιχούν σε όλες τις δυνατές φάσεις του συστήματος, όπως παρουσιάζονται στα Σχ. 5.1, 5.2 και 5.3. Οι φάσεις αυτές συνοψίζονται στο συνολικό διάγραμμα φάσης του Σχ. 5.4.

Chapter 5

Phase diagram and energy spectrum $E(q_x, q_y)$

Sammury

Στο Κεφ. 5, βασισμένοι στα [1], [2], [23], [24], [25], [26] παρουσιάζουμε αρχικά τη φυσική σημασία της Χαμιλτονιανής (4.25). Στη συνέχεια, αναλύουμε τις διάφορες φάσεις στις οποίες μπορεί να μεταβεί το σύστημα, μαζί με το αντίστοιχο ενεργειακό φάσμα, και τέλος παρουσιάζουμε το διάγραμμα φάσης του συστήματος.

5.1 Gapless phase

Ξεκινάμε από την τελική διαγωνοποιημένη Χαμιλτονιανή, όπως παρουσιάστηκε στην εξ. (4.25):

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = \sum_q |S_q| (2\alpha_q^\dagger \alpha_q - 1).$$

Ορίζουμε ως θεμελιώδη κατάσταση (ground state) την κατάσταση όπου όλα τα qsp βρίσκονται στη θεμελιώδη στάθμη $E_{g.s.}$:

$$\alpha_q |\mathcal{M}_0\rangle = 0, \quad \forall q. \tag{5.1}$$

- $|\mathcal{M}_0\rangle$: Η κατάσταση του cmf στον τομέα μηδενικής ροής (zero flux sector).

Η θεμελιώδης ενέργεια $E_{g.s.}$ ορίζεται:

$$E_{g.s.} = \langle \mathcal{M}_0 | \tilde{\mathcal{H}}_0 | \mathcal{M}_0 \rangle = - \sum_q |S_q|. \tag{5.2}$$

Οι διεγερμένες καταστάσεις δίνονται από την $\alpha^\dagger |\mathcal{M}_0\rangle$, ενώ οι αντίστοιχες ενεργειακές τιμές E_c είναι:

$$E_c = 2 \sum_q |S_q| \alpha_q^\dagger \alpha_q = \begin{cases} 2|S_q|, & \text{αν } \alpha_q^\dagger \alpha_q = 1 \rightarrow \exists \text{ διεγερμένο quasiparticle,} \\ 0, & \text{αν } \alpha_q^\dagger \alpha_q = 0 \rightarrow \nexists \text{ διεγερμένο quasiparticle.} \end{cases}$$

Το σύστημα εισέρχεται σε φάση χωρίς ενεργειακό χάσμα (Φάση B), γνωστή ως gapless phase (gp), όταν ικανοποιείται η εξής συνθήκη:

$$S_q = 0, \text{ για κάποιο } q. \quad (5.3)$$

Η συνθήκη (5.3) ισχύει για δύο περιπτώσεις¹:

Στην ισοτροπική περίπτωση δηλαδή $J_x = J_y = J_z$, το σύστημα μεταβαίνει στη gp, όπου εμφανίζονται δύο σημεία Dirac (παρόμοια με εκείνα του γραφενίου [27]) στις θέσεις:

$$Q = \pm \left(\frac{2\pi}{3}, \frac{-2\pi}{3} \right).$$

Στα σημεία Dirac ισχύει $S_q = 0$, άρα και $E_c = 0$, γεγονός που υποδεικνύει ότι το ενεργειακό χάσμα σε αυτά τα σημεία είναι μηδενικό. Κοντά στα σημεία Dirac, η ενέργεια αυξάνεται γραμμικά σύμφωνα με τη σχέση $E \propto |q - Q|$, σχηματίζοντας κωνικές επιφάνειες γύρω από το ελάχιστο Q του φάσματος (βλ. Σχ. 5.1). Οι επιφάνειες αυτές είναι γνωστές ως κώνοι Dirac (Dirac cones). Αντίστοιχη δομή παρατηρείται και για τις αρνητικές τιμές ενέργειας, μέχρι το πλήρες γέμισμα της θεμελιώδους στάθμης $E_{g.s.}$ από qsp (Fermi sea). Οι αρνητικοί κώνοι Dirac είναι ανεστραμμένοι και έχουν ως ανώτατο σημείο το ίδιο Q (βλ. Σχ. 5.1). Στη gp, τα cmf κυριαρχούν, καθώς είναι τα μόνα gapless σωματίδια (βρίσκονται στη θεμελιώδη στάθμη) σε αντίθεση με τα cbf τα οποία εμφανίζουν ενεργειακό χάσμα (gapped). Σε χαμηλές θερμοκρασίες, τα cbf διεγείρονται αυθαίρετα σε υψηλότερες ενεργειακές στάθμες χωρίς ενεργειακό κόστος. Τα διεγερμένα cmf κινούνται ελεύθερα εντός ενός σταθερού \mathbb{Z}_2 gauge πεδίου και συμπεριφέρονται ως massless Dirac fermions (mdf).

¹Η απόδειξη ότι η συνθήκη (5.3) ισχύει για τις συγκεκριμένες περιπτώσεις βρίσκεται αναλυτικά στο Appendix E.

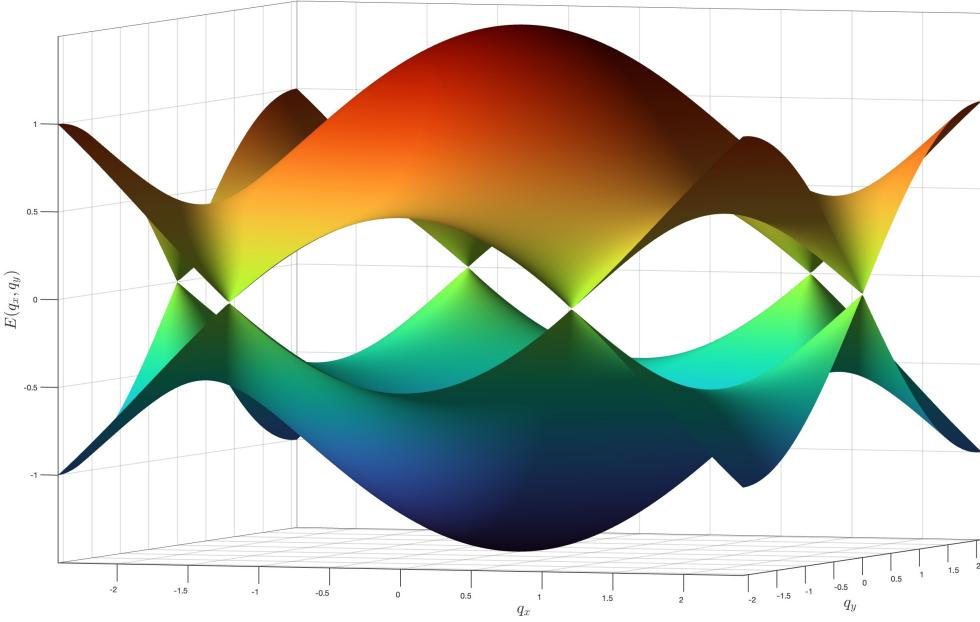


Fig. 5.1 Το ενεργειακό φάσμα $E(q_x, q_y)$ απεικονίζεται για την ισοτροπική περίπτωση $J_x = J_y = J_z = 1$. Παρατηρούνται έξι σημεία μηδενικής ενέργειας (Dirac points) εντός της 1^{ης} ζώνης Brillouin (Brillouin Zone, BZ), όπου το $E(q_x, q_y) = 0$, υποδηλώνοντας ότι το φάσμα είναι χωρίς χάσμα. Η διασπορά κοντά σε αυτά τα σημεία είναι γραμμική, σχηματίζοντας χαρακτηριστικούς κώνους Dirac.

Όταν ισχύουν και οι τρεις τριγωνικές ανισότητες το σύστημα βρίσκεται στη gρ:

$$|J_z| < |J_x| + |J_y|, \quad (5.4)$$

$$|J_y| < |J_x| + |J_z|, \quad (5.5)$$

$$|J_x| < |J_z| + |J_y|. \quad (5.6)$$

Καθώς μεταβάλλουμε τις παραμέτρους J_x, J_y, J_z , τα σημεία Dirac μετατοπίζονται και αρχίζουν να συγχωνεύονται. Όταν έστω και μία από τις ανισότητες (5.4), (5.5) ή (5.6) παύει να ισχύει, όλα τα σημεία Dirac συγχωνεύονται και τελικά εξαφανίζονται. Το ενεργειακό φάσμα αποκτά χάσμα και το σύστημα μεταβαίνει στη φάση με ενεργειακό χάσμα, γνωστή ως gapped phase (gpp).

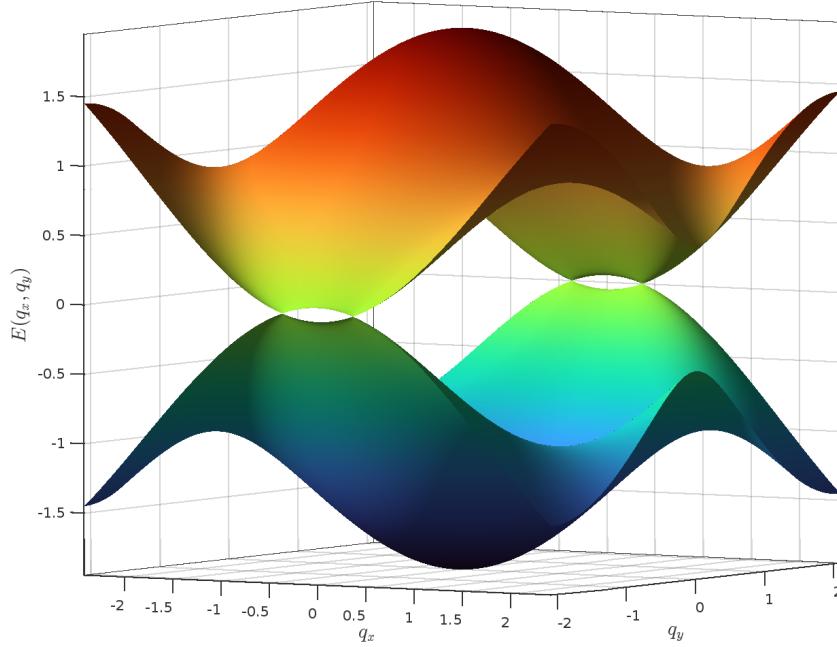


Fig. 5.2 Το ενεργειακό φάσμα $E(q_x, q_y)$ απεικονίζεται για την οριακή περίπτωση $J_x = J_y = 1$ και $J_z = 1.9$. Παρατηρούμε ότι υπάρχουν μόνο τέσσερις κώνοι Dirac εντός της 1^{ης} BZ, όπου το $E(q_x, q_y)$ μηδενίζεται. Τα σημεία Dirac έχουν αρχίσει να συγχωνεύονται.

Στη gp, το σύστημα συμπεριφέρεται ως ένα gapless κβαντικό υγρό σπιν [28] (Quantum Spin Liquid, QSL) μικρής εμβέλειας (short-range) λόγω της παρουσίας σημείων Dirac όπου το ενεργειακό φάσμα μηδενίζεται, επιτρέποντας την ύπαρξη κβαντικών διεγέρσεων χωρίς ενεργειακό χάσμα, γεγονός που οδηγεί σε ισχυρή κβαντική διεμπλοκή και αποσύνθεση των αρχικών βαθμών ελευθερίας του σπιν σε δύο διαφορετικούς τύπους κλασματικών διεγέρσεων (fractionalization)².

5.2 Gapped phase

Το σύστημα μεταβαίνει στη gpp όταν ισχύει η συνθήκη:

$$S_q > 0, \text{ για } \forall q. \quad (5.7)$$

Όπως αναφέραμε και στην Ενότητα 5.1, αν έστω και μία από τις ανισότητες (5.4), (5.5) και (5.6) παύσει να ισχύει, το σύστημα αποκτά ενεργειακό χάσμα και μεταβαίνει στη gpp.

²Η απόδειξη για τον χαρακτηρισμό του συστήματος ως QSL παρουσιάζεται αναλυτικά στο Appendix F.

³Η απόδειξη γιατί το σύστημα μεταβαίνει στη gpp όταν ισχύει η συνθήκη (5.7) βρίσκεται αναλυτικά στο Appendix E.

Συγκεκριμένα, ανάλογα με το ποια ανισότητα παραβιάζεται, το σύστημα μεταβαίνει στη φάση A_{α_i} :

$$|J_z| > |J_x| + |J_y|, \rightarrow \text{Φάση } A_z, \quad (5.8)$$

$$|J_y| > |J_x| + |J_z|, \rightarrow \text{Φάση } A_y, \quad (5.9)$$

$$|J_x| > |J_z| + |J_y|, \rightarrow \text{Φάση } A_x. \quad (5.10)$$

Αναλόγως σε ποια φάση A_{α_i} βρισκόμαστε κυριαρχούν οι συγκεκριμένοι α_i δεσμοί πχ στη φάση A_z στο σύστημα κυριαρχούν οι z δεσμοί.

Υποθέτουμε ότι βρισκόμαστε στη φάση A_z :⁴

Μόλις το $|J_z|$ γίνει μεγαλύτερο από το άθροισμα $|J_x| + |J_y|$, το σύστημα εισέρχεται στη φάση A_z . Οι συσχετίσεις στους z-δεσμούς ($S_{\langle ij \rangle}^{zz}(t) = \langle \sigma_i^z(t) \sigma_j^z(0) \rangle$) αρχίζουν να κυριαρχούν. Οι συσχετίσεις στους x και y δεσμούς εξασθενούν σταδιακά. Όταν πλέον $J_z \gg J_x, J_y$, εμφανίζεται πλήρης δευτερογενής συζευγμένη φάση full dimerization στους z-δεσμούς. Οι υπόλοιπες συσχετίσεις x και y είναι ουσιαστικά μηδενικές (βλ Σχ. F.2):

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^z(t) \sigma_j^z(0) \rangle &\approx 1, \\ \langle \sigma_i^x(t) \sigma_j^x(0) \rangle &\approx 0, \\ \langle \sigma_i^y(t) \sigma_j^y(0) \rangle &\approx 0. \end{aligned}$$

Στη φάση A_{α_i} , το σύστημα διασπάται σε τοπικά διμερή⁵ (dimers) κατά μήκος των δεσμών τύπου α_i , οι οποίοι έχουν έντονη συσχέτιση, ενώ οι υπόλοιπες κατευθύνσεις είναι πρακτικά ασύνδετες. Όταν λέμε ότι οι υπόλοιπες κατευθύνσεις είναι πρακτικά ασύνδετες, εννοούμε ότι τα σπιν στους άλλους δύο δεσμούς παραμένουν παγωμένα. Δεν συμβάλλουν στην ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης. Η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος επιλέγει να ελαχιστοποιήσει την ενέργεια μόνο μέσω των κυρίαρχων δεσμών (π.χ. z-δεσμών στη φάση A_z). Στη φάση A_{α_i} , οι διεγέρσεις των ροών (cbf) βρίσκονται σε χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες από αυτές των cmf, δηλαδή σε αντίθεση με τη gp. Η δημιουργία ενός ζεύγους ροών (π.χ. δύο π-ροών σε μία πλακέτα) έχει χαμηλότερο ενεργειακό κόστος σε σχέση με τη διέγερση ενός cmf.

⁴Προτού προχωρήσετε στη συνέχεια, συνιστάται να διαβάσετε πρώτα το Appendix F, το οποίο σχετίζεται με τη συνάρτηση συσχέτισης $S_{\langle ij \rangle}^{\alpha\beta}(t)$.

⁵Διμερές είναι ένα ζεύγος συζευγμένων σωματιδίων (εδώ spins), τα οποία είναι ισχυρά συσχετισμένα μεταξύ τους (μέγιστη συσχέτιση) και απομονωμένα από τα υπόλοιπα του συστήματος.

Την ποινήτευμας πάλι ότι βρίσκομαστε στη φάση A_z :

Στο όρο $J_z >> J_x, J_y$ πρωτικά $J_x = J_y$ τα cmf γίνονται πάρα πολύ βαριά δηλαδή έχουν μεγάλο χάσμα ($\Delta_{cmf} \propto J_z$). Οι ροές μπορούν να δημιουργηθούν μόνο μέσω των J_x, J_y οι οποίες είναι πιο φτηνές διεγέρσεις:

$$\Delta_{flux} \propto \frac{J_x^4}{J_z^3}. \quad (5.11)$$

Η εξ. (5.11) δείχνει ότι η ροές ενεργοποιούνται μόνο λόγω ασθενούς διαταραχής στους dimers και επιβεβαιώνει ότι η φάση A_z είναι βαθιά dimerized.

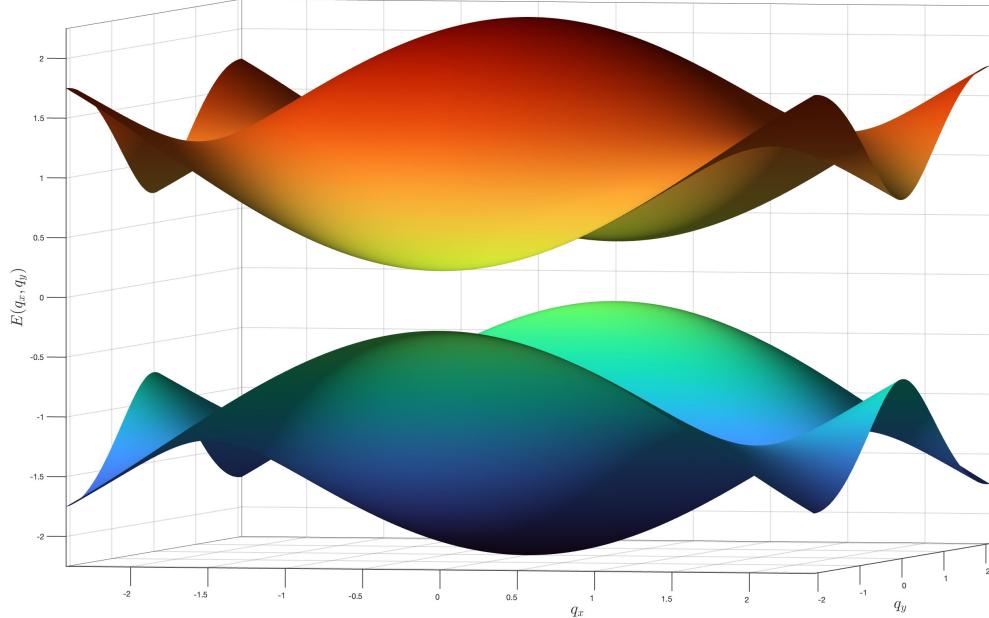


Fig. 5.3 Το φάσμα $E(q_x, q_y)$, έχει απεικονιστεί παραπάνω για $J_x = J_y = 1$ και $J_z = 2.5$. Το σύστημα εμφανίζει ενεργιακό χάσμα και βρίσκεται στη φάση A_z .

Στη gpp το σύστημα συμπεριφέρεται ως ένα gapped QSL⁶ λόγω της εμφάνισης ενεργειακού χάσματος στο φάσμα, ενώ η έντονη κβαντική διεμπλοκή και οι κλασματοποιημένες διεγέρσεις παραμένουν, διατηρώντας τον μη-ταξινομημένο χαρακτήρα της.

⁶Η απόδειξη γιατί το σύστημα χαρακτηρίζεται ως QSL βρίσκεται αναλυτικά στο Appendix F.

5.3 Phase diagram

Το διάγραμμα φάσης είναι τριγωνικό, καθώς ικανοποιεί τη σχέση $J_x + J_z + J_y = 1$ και συνοψίζει όλες της δυνατές φάσεις της οποίες αναφέραμε στην Ενότητα 5.1 και 5.2.

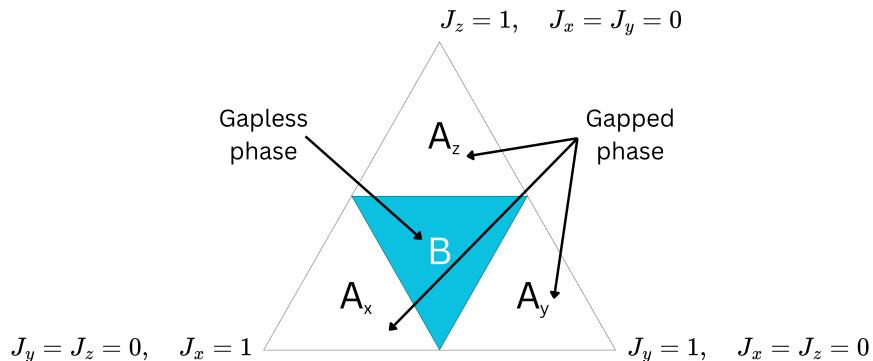
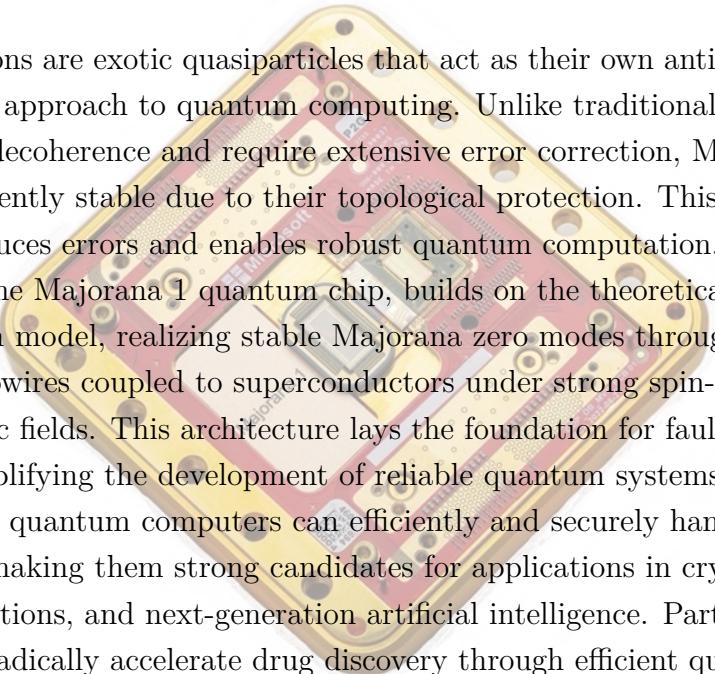


Fig. 5.4 Διάγραμμα φάσης του μοντέλου Kitaev στον χώρο των παραμέτρων J_x, J_y, J_z . Η περιοχής A_{α_i} εμφανίζουν ενεργειακό χάσμα (gapped), ενώ η περιοχή B είναι χωρίς χάσμα (gapless). Ένα σημείο μέσα στο παραπάνω τρίγωνο περιγράφει τις σχετικές τιμές των J_x, J_y, J_z . Στο κέντρο του τριγώνου εμφανίζεται το ισοτροπικό σημείο.

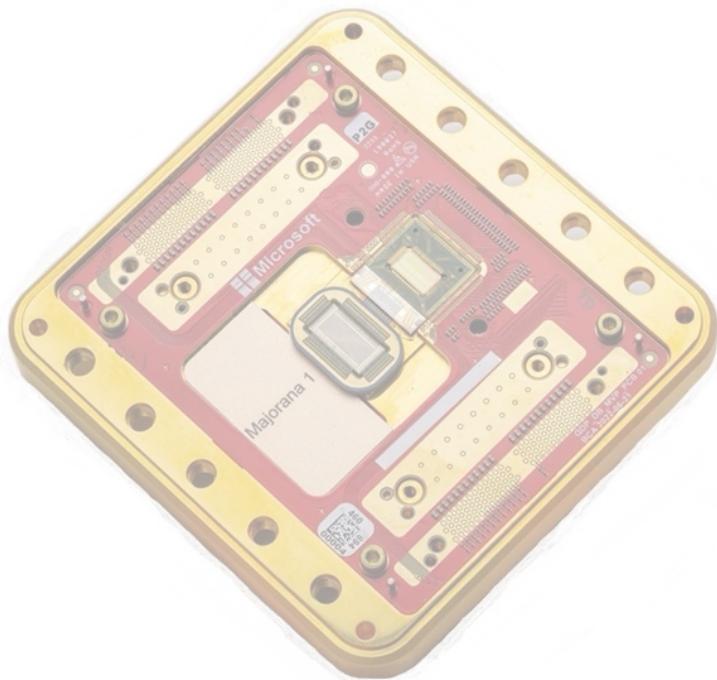
Chapter 6

Applications



Majorana fermions are exotic quasiparticles that act as their own antiparticles, offering a groundbreaking approach to quantum computing. Unlike traditional qubits, which are prone to rapid decoherence and require extensive error correction, Majorana-based qubits are inherently stable due to their topological protection. This unique property significantly reduces errors and enables robust quantum computation. Microsoft's recent breakthrough, the Majorana 1 quantum chip, builds on the theoretical framework of the Kitaev 1D chain model, realizing stable Majorana zero modes through specially engineered nanowires coupled to superconductors under strong spin-orbit coupling and applied magnetic fields. This architecture lays the foundation for fault-tolerant quantum computing, simplifying the development of reliable quantum systems. As a result, Majorana-based quantum computers can efficiently and securely handle complex computations, making them strong candidates for applications in cryptography, quantum simulations, and next-generation artificial intelligence. Particularly exciting is its capacity to radically accelerate drug discovery through efficient quantum simulations of molecular interactions, promising transformative impacts in medicine and biotechnology. The race for quantum supremacy is accelerating, with tech giants like Microsoft, Google, and IBM investing billions in quantum research. Majorana-based quantum computing offers a more stable and scalable path toward practical quantum advantage, eliminating the primary obstacles of error rates and qubit scalability. The first company to successfully commercialize Majorana qubits will gain a monopoly on secure quantum computation, ultra-fast AI processing, and next-generation cybersecurity—markets worth trillions of dollars. Majorana fermions are more than just a theoretical curiosity; they are the cornerstone of the next technological revolution. Their application in quantum computing, cryptography, energy, and AI will redefine how we process information, communicate, and innovate.

With industry leaders like Microsoft already making significant strides, the commercialization of Majorana-based quantum technologies is not a question of "if," but "when." The companies and investors who position themselves now will lead the quantum future.



Bibliography

- [1] Alexei Kitaev. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Annals of Physics*, 2008.
- [2] Johannes Knolle. *Dynamics of a Quantum Spin Liquid*. Springer Theses. Springer International Publishing, 2016.
- [3] C. W. J. Beenakker. Search for majorana fermions in superconductors. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2013. arXiv:1112.1950v2.
- [4] Steven R. Elliott and Marcel Franz. Colloquium: Majorana fermions in nuclear, particle and solid-state physics. *Reviews of Modern Physics*, 2015. arXiv:1403.4976v2.
- [5] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill, 1971. Lecture Notes.
- [6] J. D. Bjorken and S. D. Drell. *Relativistic Quantum Mechanics*. McGraw-Hill, 1964.
- [7] Pertti Lounesto. *Clifford Algebras and Spinors*, volume 286 of *London Mathematical Society Lecture Note Series*. Cambridge University Press, 2nd edition, 2001.
- [8] Paul A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 117(778):610–624, 1928.
- [9] T. Hyart, B. van Heck, I. C. Fulga, M. Burrello, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker. Flux-controlled quantum computation with majorana fermions. *Physical Review B*, 88:035121, 2013.
- [10] T. E. O’Brien, P. Rožek, and A. R. Akhmerov. Majorana-based fermionic quantum computation. *Physical Review Letters*, 120:220504, 2018.
- [11] Alexei Kitaev. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Annals of Physics*, 303(1):2–30, 2003.
- [12] Eduardo Fradkin. *Field Theories of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 2013.
- [13] Shou-Cheng Zhang Hong Yao and Steven A. Kivelson. Algebraic spin liquid in an exactly solvable spin model. *arXiv preprint arXiv:0810.5347*, 2008. Available at <https://arxiv.org/abs/0810.5347v1>.

- [14] Microsoft News. Microsoft’s majorana-1 chip carves new path for quantum computing, 2024. Accessed: February 28, 2025.
- [15] Alexei Yu. Kitaev. Unpaired majorana fermions in quantum wires. *arXiv preprint*, 2000. Accessed: February 28, 2025.
- [16] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Reviews of Modern Physics*, 80:1083, 2008.
- [17] P. G. de Gennes. *Superconductivity of Metals and Alloys*. Addison-Wesley, 1999.
- [18] M. Tinkham. *Introduction to Superconductivity*. Dover, 2004.
- [19] A. Altland and B. Simons. *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2010.
- [20] Jean-Paul Blaizot and Georges Ripka. *Quantum Theory of Finite Systems*. MIT Press, Cambridge, MA, 1986.
- [21] John Bardeen, Leon N. Cooper, and J. Robert Schrieffer. Theory of superconductivity. *Physical Review*, 108(5):1175–1204, 1957.
- [22] Jean-Paul Brison. p-wave superconductivity and d -vector representation. In F. Scheurer E. Beaurepaire, H. Bulou and J.-P. Kappler, editors, *Magnetism and Accelerator-Based Light Sources*, pages 161–185. Springer, 2021.
- [23] Saptarshi Mandal and Arun M. Jayannavar. An introduction to kitaev model-i. *arXiv preprint arXiv:2006.11549*, 2020. Available at <https://arxiv.org/abs/2006.11549>.
- [24] Jiannis K. Pachos. *Introduction to Topological Quantum Computation*. Cambridge University Press, 2012.
- [25] J. Knolle, D. L. Kovrizhin, J. T. Chalker, and R. Moessner. Dynamics of a two-dimensional quantum spin liquid: signatures of emergent majorana fermions and fluxes. *Phys. Rev. Lett.*, 112(20):207203, 2014.
- [26] G. Baskaran, S. Mandal, and R. Shankar. Exact results for spin dynamics and fractionalization in the kitaev model. *Phys. Rev. Lett.*, 98(24):247201, 2007.
- [27] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Physical Review*, 71(9):622–634, 1947.
- [28] P. W. Anderson. The resonating valence bond state in la_2cuo_4 and superconductivity. *Science*, 235(4793):1196–1198, 1987.

Appendix A

Pauli Matrices

Για σωματίδια με σπιν $\pm \frac{1}{2}$, ο χώρος του σπίνορα έχει διάσταση $n = 2$. Η ιδιοτιμή $+\frac{1}{2}$ αντιστοιχεί στην κβαντική κατάσταση $|\uparrow\rangle$, ενώ η ιδιοτιμή $-\frac{1}{2}$ στην κατάσταση $|\downarrow\rangle$.

Ορίζουμε τον τελεστή \hat{S}_z , ο οποίος αντιστοιχεί στη ζεύξη του σπιν ως προς τον άξονα z , η δράση του στις ιδιοκαταστάσεις δίνει:

$$\hat{S}_z |\uparrow\rangle = \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle \quad \text{και} \quad \hat{S}_z |\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle. \quad (\text{B.1})$$

Η αναπαράσταση του τελεστή \hat{S}_z στο χώρο του σπίνορα δίνεται από τον αντίστοιχο πίνακα:

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \left\langle \uparrow \middle| \hat{S}_z \middle| \uparrow \right\rangle & \left\langle \uparrow \middle| \hat{S}_z \middle| \downarrow \right\rangle \\ \left\langle \downarrow \middle| \hat{S}_z \middle| \uparrow \right\rangle & \left\langle \downarrow \middle| \hat{S}_z \middle| \downarrow \right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Για να υπολογίσουμε την αναπαράσταση των τελεστών \hat{S}_x και \hat{S}_y , εισάγουμε τους τελεστές ανάβασης \hat{S}_+ και κατάβασης \hat{S}_- , συνεπώς οι τελεστές \hat{S}_x και \hat{S}_y μετασχηματίζονται:

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ &= \hat{S}_x + i\hat{S}_y, & \hat{S}_- &= \hat{S}_x - i\hat{S}_y. \\ \rightarrow \hat{S}_x &= \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-), & \hat{S}_y &= \frac{1}{2i} (\hat{S}_+ - \hat{S}_-). \end{aligned}$$

Γνωρίζουμε ότι η δράση των τελεστών \hat{S}_+ και \hat{S}_- στις κβαντικές καταστάσεις είναι:

$$\hat{S}_\pm |(s, m_s)\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |(s, m_s \pm 1)\rangle. \quad (\text{B.2})$$

Συνεπώς η αναπαράσταση του τελεστή \hat{S}_y στο χώρο του σπίνορα δίνεται από τον αντίστοιχο πίνακα:

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} \left\langle \uparrow \middle| \hat{S}_+ - \hat{S}_- \middle| \uparrow \right\rangle & \left\langle \uparrow \middle| \hat{S}_+ - \hat{S}_- \middle| \downarrow \right\rangle \\ \left\langle \downarrow \middle| \hat{S}_+ - \hat{S}_- \middle| \uparrow \right\rangle & \left\langle \downarrow \middle| \hat{S}_+ - \hat{S}_- \middle| \downarrow \right\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Η αναπαράσταση του τελεστή \hat{S}_x στο χώρο του σπίνορα δίνεται από τον αντίστοιχο πίνακα:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \left\langle \uparrow \left| \hat{S}_+ + \hat{S}_- \right| \uparrow \right\rangle & \left\langle \uparrow \left| \hat{S}_+ + \hat{S}_- \right| \downarrow \right\rangle \\ \left\langle \downarrow \left| \hat{S}_+ + \hat{S}_- \right| \uparrow \right\rangle & \left\langle \downarrow \left| \hat{S}_+ + \hat{S}_- \right| \downarrow \right\rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ορίζουμε πλέον τον τελεστή $\vec{\hat{S}}$:

$$\vec{\hat{S}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\hat{\sigma}}, \quad (\text{B.3})$$

όπου $\vec{\hat{\sigma}}$ οι πίνακες Pauli:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Ιδιότητες πινάκων Pauli:

Αντιμεθατική σχέση:

$$\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta_{ij}I. \quad (\text{B.4})$$

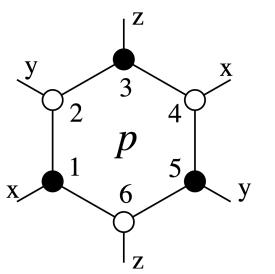
Μεταθετική σχέση:

$$[\sigma^i, \sigma^j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma^k. \quad (\text{B.5})$$

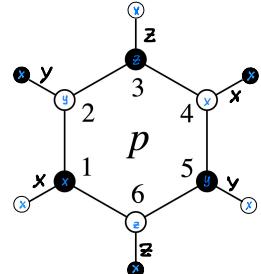
Appendix B

Transformation of the flux operator

$$\hat{w}_{p_n}$$



(a) Πριν τον φορμαλισμό K_{ij}



(b) Μετά τον φορμαλισμό K_{ij}

Fig. B.1 Σύγκριση πλακέτας πριν και μετά την εφαρμογή του φορμαλισμού K_{ij} .

Η αρχική αναπαράσταση της πλακέτας αριστερά υπακούει στον τελεστή ροής:

$$\hat{w}_{p_n} = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z.$$

Εισάγοντας τον νέο φορμαλισμό που δίνεται από τη σχέση (1.3), μέσω του τελεστή K_{ij} , η πλακέτα μετασχηματίζεται στη μορφή που απεικονίζεται στα δεξιά του Σχήματος. Για να κατανοήσουμε πώς μετασχηματίζεται ο τελεστής ροής \hat{w}_{p_n} , εξετάζουμε αρχικά τους εξωτερικούς δεσμούς. Για παράδειγμα, το σωματίδιο με αριθμό 1 συμμετέχει σε x -δεσμό, ενώ το σωματίδιο 2 σε y -δεσμό. Η ίδια διαδικασία ακολουθείται για τα υπόλοιπα.

Ορίζουμε ως i τα σωματίδια με μαύρες κουκκίδες και ως j τα σωματίδια με λευκές κουκκίδες. Συνδυάζοντας πλέον τα δύο βήματα που είδαμε μόλις τώρα μαζί με τη σχέση (1.3), κάθε κουκκίδα παίρνει τον συμβολισμό που φαίνεται με μπλε χρώμα στο Σχήμα

δεξιά. Είμαστε πλέον έτοιμοι να ορίσουμε τον νέο φορμαλισμό για τον τελεστή ροής \hat{w}_{p_n} , ο οποίος ορίζεται:

$$\begin{aligned}\hat{w}_{p_n} &= (\sigma_1^x \sigma_2^y)(\sigma_2^y \sigma_3^z)(\sigma_3^z \sigma_4^x)(\sigma_4^x \sigma_5^y)(\sigma_5^y \sigma_6^z)(\sigma_6^z \sigma_1^x) \\ &= K_{12}K_{23}K_{34}K_{45}K_{56}K_{61}, \quad \text{ισχυεί } K_{ij} = K_{ji}.\end{aligned}$$

Appendix C

Example of sectors in Hilbert space

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε $n = 6$ (κορυφές), συνεπώς:

$$m = \frac{n}{2} = 3 \text{ πλακέτες}$$

Διάσταση του πλήρους χώρου Hilbert: $2^n = 2^6 = 64$

Διάσταση του τομέα: $2^{\frac{n}{2}} = 2^3 = 8$ (βαθμοί ελευθερίας)

Αριθμός των τομέων: $64/8 = 8$ (αναμενόμενο)

Ο πλήρης χώρος Hilbert \mathcal{L} αποτελείται από 8 τομείς, και κάθε τομέας θα αποτελείται από έναν διαφορετικό κάθε φορά συνδυασμό των ιδιοτιμών w_1, w_2, w_3 . Όλοι οι δυνατοί συνδυασμοί είναι 8, όσο και ο αριθμός των τομέων (αναμενόμενο).

Appendix D

Proof of relationship $\tan 2\theta_q = -\frac{Im(S_q)}{Re(S_q)}$

H BdG Χαμιλτονιανή είναι:

$$\mathcal{H}_{BdG} = \begin{pmatrix} h_q & -\Delta_q \\ -\Delta_q^* & -h_q \end{pmatrix}.$$

H εξ. (4.9) είναι:

$$\mathcal{H}_{BdG}\Psi_q = E_q\Psi_q.$$

Σε μορφή πίνακα η εξ. (4.9) λαμβάνει τη μορφή:

$$\begin{pmatrix} h_q & -\Delta_q \\ -\Delta_q^* & -h_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_q \\ Y_q \end{pmatrix} = E_q \begin{pmatrix} X_q \\ Y_q \end{pmatrix}. \quad (\text{D.1})$$

Από την εξ. (D.1) παίρνουμε της εξής εξισώσεις:

$$h_q X_q - \Delta_q Y_q = E_q X_q, \quad (\text{D.2})$$

$$-\Delta_q^* X_q - h_q Y_q = E_q Y_q. \quad (\text{D.3})$$

Από την εξ. (D.2) βρίσουμε των λόγο:

$$\frac{Y_q}{X_q} = \frac{E_q - h_q}{-\Delta_q}. \quad (\text{D.4})$$

Έχουμε δείξει στο Κεφ. 4:

$$\begin{aligned} E_q &= \pm \sqrt{Re(S_q)^2 + Im(S_q)^2}, \\ h_q &= Re(S_q), \\ \Delta_q &= -iIm(S_q). \end{aligned}$$

Η αντικατάσταση των παραπάνω σχέσεων στην εξ. (D.4) οδηγεί:

$$\begin{aligned} \frac{Y_q}{X_q} &= \frac{\sqrt{Re(S_q)^2 + Im(S_q)^2} - Re(S_q)}{iIm(S_q)} \\ &= -i \frac{\sqrt{Re(S_q)^2 + Im(S_q)^2} - Re(S_q)}{Im(S_q)}. \end{aligned}$$

Ορίζουμε την εφαπτομένη $\tan \theta_q$ μέσω της σχέσης:

$$\tan \theta_q = \frac{\sqrt{Re(S_q)^2 + Im(S_q)^2} - Re(S_q)}{Im(S_q)}. \quad (\text{D.5})$$

Συνεπώς

$$\frac{Y_q}{X_q} = -i \tan \theta_q. \quad (\text{D.6})$$

Από την εξ. (D.6) αποδεικνύουμε ότι τα ιδιοδιανύσματα της εξ. (4.9) παρουσιάζουν την εξής μορφή:

$$\Psi = \begin{pmatrix} X_q \\ Y_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_q \\ -i \sin \theta_q \end{pmatrix}.$$

Στη συνέχεια χρησιμοποιούμε την ταυτότητα του διπλού τόξου:

$$\tan 2\theta_q = \frac{2 \tan \theta_q}{1 - \tan^2 \theta_q}. \quad (\text{D.7})$$

Τψώνοντας στο τετράγωνο και τις δύο πλευρές της εξ. (D.5), προκύπτει:

$$\tan^2 \theta_q = \frac{(\sqrt{Re(S_q)^2 + Im(S_q)^2} - Re(S_q))^2}{Im(S_q)^2}. \quad (\text{D.8})$$

Αναπτύσσουμε τον αριθμητή:

$$\begin{aligned} (\sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2} - \text{Re}(S_q))^2 &= \text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2 - 2\text{Re}(S_q)\sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2} + \text{Re}(S_q)^2 \\ &= 2\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2 - 2\text{Re}(S_q)\sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2}. \end{aligned}$$

Η αντικατάσταση της εξ. (D.8) στο ανάπτυγμα του αριθμητή οδηγεί:

$$\tan^2 \theta_q = \frac{2\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2 - 2\text{Re}(S_q)\sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2}}{\text{Im}(S_q)^2},$$

$$\begin{aligned} 1 - \tan^2 \theta_q &= \frac{\text{Im}(S_q)^2 - (2\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2 - 2\text{Re}(S_q)\sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2})}{\text{Im}(S_q)^2} \\ &= \frac{2\text{Re}(S_q)(\sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2} - \text{Re}(S_q))}{\text{Im}(S_q)^2}. \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Η αντικατάσταση της εξ. (D.9) και (D.5) στην εξ. (D.7) οδηγεί στην τελική μορφή:

$$\begin{aligned} \tan 2\theta_q &= \frac{\frac{2(\sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2} - \text{Re}(S_q))}{\text{Im}(S_q)}}{\frac{2\text{Re}(S_q)(\sqrt{\text{Re}(S_q)^2 + \text{Im}(S_q)^2} - \text{Re}(S_q))}{\text{Im}(S_q)^2}} \\ &= \frac{1}{\frac{\text{Re}(S_q)}{\text{Im}(S_q)}} \\ &= -\frac{\text{Im}(S_q)}{\text{Re}(S_q)}, \quad \text{QED.} \end{aligned}$$

Αποδείζαμε λοιπόν ότι:

$$\tan 2\theta_q = -\frac{\text{Im}(S_q)}{\text{Re}(S_q)}. \quad (\text{D.10})$$

Appendix E

Relationship between phase transitions and S_q

Ξεκινούμε αρχικά από την εξ. (4.21):

$$S_q = \sum_{n_i} J_{\alpha_{n_i}} e^{iqn_i}. \quad (\text{E.1})$$

Αναπτύσσουμε την εξ. (E.1):

$$S_q = J_x e^{iqn_x} + J_y e^{iqn_y} + J_z. \quad (\text{E.2})$$

Τψώνοντας στο τετράγωνο και τις δύο πλευρές της εξ. (E.2):

$$\begin{aligned} S_q^2 &= (J_x e^{-iqn_x} + J_y e^{-iqn_y} + J_z)(J_x e^{iqn_x} + J_y e^{iqn_y} + J_z) \\ &= J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 + J_x J_z (e^{iqn_x} + e^{-iqn_x}) + J_y J_x (e^{iq(n_x - n_y)} + e^{-iq(n_x - n_y)}) + J_y J_z (e^{iqn_y} + e^{-iqn_y}). \end{aligned}$$

Χρησιμοποιούμε την ταυτότητα $e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2\cos(\theta)$:

$$S_q^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 + 2J_x J_z \cos(qn_x) + 2J_y J_x \cos(q(n_x - n_y)) + 2J_y J_z \cos(qn_y). \quad (\text{E.3})$$

Για να βρισκόμαστε στη gapless φάση (φάση B), πρέπει να ισχύει $S_q = 0$ για κάποια τιμή του q . Δεδομένου ότι $-1 \leq \cos(x) \leq 1$, το ελάχιστο της ποσότητας S_q^2 δίνεται από:

$$S_q^2 \geq J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 - 2J_x J_z - 2J_y J_x - 2J_y J_z.$$

Για να έχουμε ως απόλυτο ελάχιστο το $S_q^2 = 0$ πρέπει:

$$J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 - 2J_x J_z - 2J_y J_x - 2J_y J_z \leq 0 \quad (\text{E.4})$$

Η αναδιάταξη των όρων της εξ. (E.4) οδηγεί:

$$(J_x - J_y)^2 + (J_y - J_z)^2 + (J_z - J_x)^2 \leq 0 \quad (\text{E.5})$$

Η εξ. (E.5) ισχύει για δύο περιπτώσεις.

Περίπτωση 1:

Στο ισοτοπικό σημείο:

$$J_x = J_y = J_z. \quad (\text{E.6})$$

Περίπτωση 2:

Όταν ισχύουν και οι τρεις τριγωνικές ανισότητες:

$$\begin{aligned} |J_z| &< |J_x| + |J_y|, \\ |J_y| &< |J_x| + |J_z|, \\ |J_x| &< |J_z| + |J_y|. \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

Όταν δεν ισχύει καμία από της δύο εξ. (E.6) και (E.7) τότε έχουμε $S_q^2 > 0$ για $\forall q$ πλέον το σύστημα βρίσκεται στη gapped φάση (Φάση A).

Appendix F

Correlation function $S_{\langle ij \rangle}^{\alpha\beta}(t)$

Χρησιμοποιούμε αρχικά την εξ. (3.5):

$$\begin{aligned}\sigma_j^{\alpha i} &= \hat{D} \tilde{\sigma}_j^{\alpha i}, \quad D = +1 \\ &= i \gamma_i^{\alpha i} \gamma_j.\end{aligned}$$

Στη συνέχεια εκφράζουμε το $\gamma_i^{\alpha i}$ στη βάση των cbf (βλ. εξ. (3.14)) ($\alpha \equiv \alpha_i$)

$$\sigma_j^{\alpha i} = i \gamma_j (\chi_{\langle ij \rangle_\alpha} + \chi_{\langle ij \rangle_\alpha}^\dagger) \rightarrow i \gamma_j \hat{\pi}_{1_{\langle ij \rangle_\alpha}} \hat{\pi}_{2_{\langle ij \rangle_\alpha}}. \quad (\text{F.1})$$

Ορίζουμε τους τελεστές $\hat{\pi}_{1_{\langle ij \rangle_\alpha}}$ και $\hat{\pi}_{2_{\langle ij \rangle_\alpha}}$ όπου η δράση τους προσθέτει π ροή στην πλακέτα 1 και 2 η οποία βρίσκεται ανάμεσα στον δεσμό $\langle ij \rangle_\alpha$ (βλ Σχ F.1).

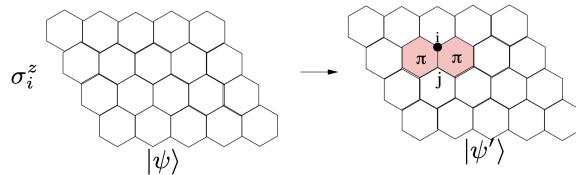


Fig. F.1 Παρουσιάζεται πώς ένα spin διασπάται σε δύο στατικές π-ροές και ένα δυναμικό cmf. Η κατάσταση $|\psi\rangle$ είναι μια κατάσταση μηδενικής ροής. Έστω ότι η κατάσταση $|\psi\rangle$ βρίσκεται στον τομέα μηδενικής ροής. Εφαρμόζοντας τον τελεστή σ_i^z επί της κατάστασης $|\psi\rangle$, όπου η θέση i συνδέεται με τη θέση j μέσω του δεσμού $\langle ij \rangle$, προκύπτει η νέα κατάσταση $|\psi'\rangle$. Η κατάσταση $|\psi'\rangle$ περιέχει δύο στατικές π-ροές στις πλακέτες που βρίσκονται ανάμεσα στο δεσμό $\langle ij \rangle$, καθώς και ένα δυναμικό cmf, το οποίο αναπαριστάται ως μαύρος κύκλος.

Με βάση την εξ. (F.1) και το $\Sigma\chi$. (F.1) η δράση του τελεστή σπιν σ_j^α επί της κατάστασης $|\psi\rangle = |\mathcal{G}\rangle |\mathcal{M}_\mathcal{G}\rangle$ ορίζεται:

$$\sigma_j^\alpha |\mathcal{G}\rangle |\mathcal{M}_\mathcal{G}\rangle = \gamma_j |\mathcal{G}^{i\alpha}\rangle |\mathcal{M}_\mathcal{G}\rangle. \quad (F.2)$$

- $|\mathcal{G}\rangle$: Κατάσταση \mathbb{Z}_2 πεδίου.
- $|\mathcal{M}_\mathcal{G}\rangle$: Κατάσταση του cmf στο συγκεκριμένο τομέα \mathcal{G} .
- $|\mathcal{G}^{i\alpha}\rangle$: Νέα κατάσταση \mathbb{Z}_2 πεδίου όπου έχουμε αλλάζει την τοπική διαμόρφωση του gauge πεδίου στο σημείο i .

Η Μαγνήτιση του συστήματος ορίζεται ως $\mathcal{M}_\alpha = \frac{1}{N} \langle \sigma_i^\alpha \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^\alpha \rangle &= \langle \mathcal{M}_\mathcal{G} | \langle \mathcal{G} | \sigma_i^\alpha | \mathcal{G} \rangle | \mathcal{M}_\mathcal{G} \rangle \\ &= \langle \mathcal{M}_\mathcal{G} | \langle \mathcal{G} | \gamma_i |\mathcal{G}^{i\alpha}\rangle | \mathcal{M}_\mathcal{G} \rangle \\ &= \gamma_i \langle \mathcal{M}_\mathcal{G} | \mathcal{M}_\mathcal{G} \rangle \langle \mathcal{G} | \mathcal{G}^{i\alpha} \rangle, \quad \langle \mathcal{G} | \mathcal{G}' \rangle = \delta_{n_\mathcal{G}, n_{\mathcal{G}'}} \\ &= 0, \end{aligned}$$

όπου $n_\mathcal{G}$ αντιστοιχεί στη κατανομή των cbf στο συγκεκριμένο τομέα ροής.

Αποδείξαμε, επομένως, ότι η μαγνήτιση στο σύστημά μας είναι μηδενική, δηλαδή $\mathcal{M}_\alpha = 0$. Η δυναμική συνάρτηση συσχέτισης (dynamic correlation function, dcf) του συστήματος ορίζεται:

$$\mathcal{S}_{ij}^{\alpha\beta}(t),$$

όπου ο δείκτης α αναφέρεται σε κατευθύνσεις που αντιστοιχούν σε δεσμούς πρώτου γείτονα ($n=1$), ενώ ο δείκτης β αφορά γείτονες μεγαλύτερης τάξης $n > 1$.

$$\mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\beta}(t) = \langle \sigma_i^\alpha(t) \sigma_j^\beta(0) \rangle = \langle \mathcal{M}_\mathcal{G} | \langle \mathcal{G} | \sigma_i^\alpha(t) \sigma_j^\beta(0) | \mathcal{G} \rangle | \mathcal{M}_\mathcal{G} \rangle. \quad (F.3)$$

Χρησιμοποιούμε την αναπαράσταση Heisenberg: $A(t) = e^{iHt} \hat{A} e^{-iHt}$.

¹Πολλές φορές προκαλείται σύγχυση σχετικά με το ότι, μετά τη δράση του τελεστή σπίν στην εξ. (F.2), η κατάσταση $|\mathcal{M}_\mathcal{G}\rangle$ φαίνεται να μην αλλάζει, καθώς ο συμβολισμός παραμένει ίδιος. Αυτό όμως γίνεται αποκλειστικά για λόγους συμβολικής απλοποίησης και δεν σημαίνει ότι η κατάσταση παραμένει αμετάβλητη.

Η εξ. (F.3) περιγράφει τη πιθανότητα να βρεθεί ένα σπίν στη θέση j (για $t=0$) με συντεταγμένες β και ένα άλλο σπίν στη θέση i (μετά από t) με συντεταγμένες α .

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\beta}(t) &= \langle \mathcal{M}_G | \langle \mathcal{G} | \sigma_i^\alpha(t) \sigma_j^\beta(0) | \mathcal{G} \rangle | \mathcal{M}_G \rangle \\ &= \langle \mathcal{M}_G | \langle \mathcal{G} | \sigma_i^\alpha(t) \gamma_j(0) | \mathcal{G}^{i\beta} \rangle | \mathcal{M}_G \rangle \\ &= \gamma_j(0) \langle \mathcal{M}_G | \langle \mathcal{G} | \sigma_i^\alpha(t) | \mathcal{G}^{i\beta} \rangle | \mathcal{M}_G \rangle \\ &= \gamma_j(0) \gamma_i(0) e^{i(H-E)t} \langle \mathcal{M}_G | \mathcal{M}_G \rangle \langle \mathcal{G} | \mathcal{G}^{i\alpha} \rangle \\ &= \gamma_j(0) \gamma_i(0) e^{i(H-E)t} \delta_{n_G, n_{Gi\alpha}} \\ \mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\beta}(t) &= \begin{cases} g_{\langle ij \rangle \alpha}(t) \delta_{\alpha, \beta}, & \text{αν } i \text{ και } j \text{ πρώτη γείτονες,} \\ 0, & \text{οτιδήποτε άλλο.} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

Με βάση την εξ. (F.4) δείξαμε ότι η dcf μηδενίζεται πάνω από πρώτους γείτονες.

Για απλοποίηση των πράξεων συνεχίζουμε την ανάλυση μας για $t = 0$. Υπολογίζουμε το $\mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\alpha}(0)$ με βάση την εξ. (F.4):

$$g_{\langle ij \rangle \alpha}(0) = \mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\alpha}(0) = \langle \mathcal{M}_G | \langle \mathcal{G} | \gamma_j(0) \gamma_i(0) | \mathcal{G} \rangle | \mathcal{M}_G \rangle. \quad (\text{F.5})$$

Με την εφαρμογή FT στα cmf, η εξ. (F.5) εντός της 1^{ης} BZ μετασχηματίζεται σε ολοκληρωτική μορφή:

$$\gamma_j(0) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}_1} \gamma_{\mathbf{q}_1}(0) e^{i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{n}_x}, \quad \gamma_i(0) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}_2} \gamma_{\mathbf{q}_2}^\dagger(0) e^{-i\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{n}_y}.$$

$$\mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\alpha}(0) = \frac{\sqrt{3}}{16\pi^2} \int_{BZ} \langle \gamma_{q_1} | \gamma_{q_2}^\dagger \rangle e^{i\mathbf{q}_1 \cdot (\mathbf{n}_x - \mathbf{n}_y)} dq_1 dq_2. \quad (\text{F.6})$$

Από τη συνάρτηση πληρότητας γνωρίζουμε ότι $\langle \gamma_{q_1} | \gamma_{q_2}^\dagger \rangle = \frac{h_q}{E_q}$. Επιπλέον, θεωρούμε ότι $e^{ik(n_1 - n_2)} \approx 1$, καθώς περιορίζόμαστε σε πρώτους γείτονες (πολύ κοντινή απόσταση).

Η ενέργεια των qs δίνεται από τη σχέση:

$$E_q = \sqrt{h_q^2 + \Delta_q^2} \quad (\text{βλ. Κεφ. 4}).$$

Ορίζουμε τις γωνιακές συναρτήσεις $\theta(q_1, q_2)$ ως:

$$\cos \theta(q_1, q_2) = \frac{h_q}{E_q}, \quad \sin \theta(q_1, q_2) = \frac{\Delta_q}{E_q},$$

όπου:

$$q_1 = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_x, \quad q_2 = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}_y.$$

Η τελική μορφή της dcf $\mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\alpha}(0)$ (βλ. εξ. (F.6)) γράφεται πλέον:

$$\mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\alpha}(0) = \frac{\sqrt{3}}{16\pi^2} \int_{BZ} \cos\theta(q_1, q_2) dq_1 dq_2. \quad (\text{F.7})$$

Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo, εκτιμούμε αριθμητικά την εξ. (F.7) για $\alpha = z$ και υπολογίζουμε τη dcf για σταθερές σύζευξης $J_x = J_y = 0.5$, μεταβάλλοντας την τιμή του J_z στο διάστημα $[0, 1]$. Το αντίστοιχο διάγραμμα της dcf εχει παρθεί αυτούσιο από το [23],

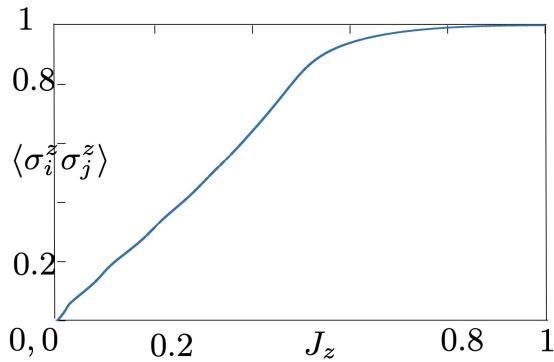


Fig. F.2 Στο παραπάνω γράφημα απεικονίζεται η συσχέτιση $\langle \sigma_{1z}\sigma_{2z} \rangle$ σε έναν δεδομένο z-διεσμό. Έχουμε θέσει $J_x = J_y = 0.5$ και μεταβάλλουμε το J_z από 0 έως 1. Όπως αναμενόταν, για $J_z = 0$ η συσχέτιση είναι μηδενική, ενώ για μεγάλες τιμές του J_z συγκλίνει στο 1.

Η συνάρτηση συσχέτισης $\mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\beta}(0)$ είναι μηδενική για αποστάσεις πέραν των πρώτων γειτόνων, δηλαδή:

$$\mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\beta}(0) = 0, \quad \text{για } \langle ij \rangle_n \text{ γείτονες όπου } n > 1.$$

Ενώ για πρώτους γείτονες, η συσχέτιση δεν είναι απλά σταθερή, αλλά ακολουθεί μία χαρακτηριστική συμπεριφορά τύπου νόμου δύναμης (power-law):

$$\mathcal{S}_{\langle ij \rangle}^{\alpha\alpha}(0) \sim \frac{1}{|i-j|^n}.$$

Αυτή η συμπεριφορά αποτελεί σαφή ένδειξη ότι το σύστημα βρίσκεται σε φάση Quantum Spin Liquid (QSL), συγκεκριμένα μιας μικρής εμβέλειας υγρής φάσης χωρίς μακροσκοπική τάξη.

Appendix G

MATLAB Implementation for Computing the Energy Spectrum $E(q_x, q_y)$

Ο παραχάτω κώδικας υπολογίζει το ενεργειακό φάσμα $E(q_x, q_y)$ του μοντέλου Kitaev σε κυψελοειδές πλέγμα. Το συγκεκριμένο παράδειγμα αντιστοιχεί στο σύνολο παραμέτρων ($J_x = 1, J_y = 1, J_z = 2.5$), το οποίο περιγράφει την Abelian φάση A_z . Με κατάλληλη τροποποίηση των σταθερών σύζευξης, μπορούν να παραχθούν όλα τα ενεργειακά φάσματα που αντιστοιχούν στις διάφορες φάσεις του συστήματος.

```
% Couplings
Jx = 1;
Jy = 1;
Jz = 2.5;
N = 300;

% Brillouin zone sampling
qx_range = linspace(-4*pi/(3*sqrt(3)), 4*pi/(3*sqrt(3)), N);
qy_range = linspace(-2*pi/3, 2*pi/3, N);
[qx, qy] = meshgrid(qx_range, qy_range);

% Dispersion for anisotropic couplings
term1 = cos(sqrt(3)*qx);
term2 = cos((3*qy)/2 - (sqrt(3)*qx)/2 );
term3 = cos((3*qy)/2 + (sqrt(3)*qx)/2 );

Sq = 0.5 * sqrt( ...
    Jx^2 + Jy^2 + Jz^2 + ...
    2*Jx*Jy*term1 + ...
    2*Jy*Jz*term2 + ...
    2*Jz*Jx*term3 );
```

```
% Hexagonal mask
mask = abs(qx * sqrt(3)/2) + abs(qy * 3/2) <= 2*pi;
Sq(~mask) = NaN;

% Plot
figure;

surf(qx, qy, Sq, ...
'FaceColor', 'interp', ...
'EdgeColor', 'k', ...
'LineStyle', '-',
'LineWidth', 0.3); hold on;

surf(qx, qy, -Sq, ...
'FaceColor', 'interp', ...
'EdgeColor', 'k', ...
'LineStyle', '-',
'LineWidth', 0.3);

% Style
colormap turbo;
shading interp;
material dull;
lighting gouraud;
camlight headlight;

xlabel('$q_x$', 'Interpreter', 'latex', 'FontSize', 14);
ylabel('$q_y$', 'Interpreter', 'latex', 'FontSize', 14);
zlabel('$E(q_x, q_y)$', 'Interpreter', 'latex', 'FontSize', 14);
title('');

view(45, 25);
axis tight;
box on;
grid on;

% Grid style
ax = gca;
ax.LineWidth = 1;
ax.GridAlpha = 0.2;
ax.XColor = [0.2 0.2 0.2];
ax.YColor = [0.2 0.2 0.2];
ax.ZColor = [0.2 0.2 0.2];
```