



**UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL NORTE**

**FACULTAD DE CIENCIAS**

Departamento de Física

**ENTRELAZAMIENTO EN CADENAS SSH CON  
ANILLO CUÁNTICO DE AHARONOV-BOHM  
INTEGRADO**

Tesis para optar al grado de Magíster en Ciencias con  
mención en Física.

**Lic. Alejandro Patricio Garrido Hidalgo**

Profesor Guía: Dr. Victor Marcelo Apel

Antofagasta, Chile

2019

# Resumen

La teoría de bandas describe correctamente un gran número de materiales, mostrando una descripción extremadamente simplificada en algunos casos. Debido a este éxito, se pensaba que entendíamos bien todos los aspectos de la teoría de bandas electrónicas. Sin embargo, con la irrupción del concepto de *topología* en sistemas de materia condensada, se han descubierto nuevos materiales con propiedades que no se intuían, como materiales aislantes en su volumen interno pero que se comportan como metales en la superficie. El estudio de estos materiales se realiza a través de las *transiciones de fase topológicas*, las cuáles son cualitativamente distintas de las que hallamos en termodinámica y física estadística.

Inspirados en las fases que exhibe el aislante topológico SSH y el uso de medidas de entrelazamiento para caracterizar sus transiciones entre fases, se propone estudiar un nuevo modelo, el cuál está compuesto por cadenas SSH con un anillo cuántico de Aharonov-Bohm integrado. El objetivo es lograr caracterizar las fases topológicas de este nuevo sistema, en particular las transiciones de fase que ocurren debido a la variación de parámetros, tales como la influencia del flujo magnético que incide en el anillo. Esto se desarrollará estudiando la estructura de los niveles de energía del sistema y usando medidas de entrelazamiento.

Se comprueba que este nuevo sistema mantiene las fases topológicas (trivial y no-trivial topológica) y los estados de borde característicos de la cadena SSH. Sin embargo, la inserción del anillo junto a la incidencia del flujo magnético, genera nuevos estados topológicos en cada fase y corrientes persistentes en el anillo.

Además, eligiendo subsistemas (o sitios) adecuados para el uso de medidas de entrelazamiento, se logran caracterizar las transiciones de fase del sistema con el espectro de entrelazamiento.

Palabras claves: topología, aislante topológico, fases topológicas, efecto Aharonov-Bohm, entrelazamiento.

# Abstract

The bands theory correctly describes a large number of materials, showing an extremely simplified description in some cases. Due to this success, it was thought that we had well understood all aspects of electronic bands theory. However, with the irruption of the concept of *topology* in condensed matter systems, new materials have been discovered with properties that had not been intuited, such as insulating materials in their internal volume but that they behave like metals on surface. The study of these materials is done through the *topological phase transitions*, which are qualitatively different from those found in thermodynamics and statistical physics.

Inspired by the phases exhibited by the topological insulator SSH and the use of entanglement measures to characterize its transitions between phases, it is proposed to study a new model, which is composed of SSH chains with an integrated Aharonov-Bohm quantum ring. The objective is to characterize the topological phases of this new system, and in particular the phase transitions that occur due to the variation of parameters, such as the influence of the magnetic flux that affects in the ring. This will be developed by studying the energy levels of the system and using entanglement measurements.

It is verified that this new system maintains the topological phases (trivial and non-trivial topological) and the characteristic edge states of the SSH chain. However, the insertion of the ring together with the incidence of the magnetic flux generates new topological states in each phase and persistent currents in the ring.

In addition, by choosing suitable subsystems (or sites) for the use of entanglement measures, the phase transitions of the system with the entanglement spectrum are characterized.

Keywords: topology, topological insulator, topological phases, Aharonov-Bohm effect, entanglement.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>6</b>
<b>2. Formalismo teórico</b>	<b>10</b>
2.1. Modelo SSH . . . . .	10
2.1.1. Hamiltoniano del bulk . . . . .	12
2.1.2. Cadena abierta . . . . .	15
2.1.3. Límite de dimerización . . . . .	16
2.2. Efecto Aharonov-Bohm en anillos cuánticos . . . . .	17
2.3. Entrelazamiento como medida de transición de fase topológica . . . . .	20
<b>3. Formulación del problema</b>	<b>22</b>
3.1. Hamiltoniano del sistema SSH-Anillo . . . . .	23
3.2. Fases topológicas del sistema SSH-Anillo . . . . .	24
3.3. Medidas de entrelazamiento . . . . .	29
3.3.1. Cadena SSH . . . . .	33
3.3.2. Sistema SSH-Anillo . . . . .	36
<b>4. Conclusión</b>	<b>43</b>
4.1. Conclusiones . . . . .	43
4.2. Trabajo futuro . . . . .	45

<b>A. Hamiltoniano de Enlace Fuerte</b>	<b>46</b>
A.1. Preliminar: Operadores fermiónicos de segunda cuantización . . . . .	46
A.2. Descripción general de Hamiltoniano de Enlace Fuerte . . . . .	47
<b>B. Cálculo de corrientes persistentes</b>	<b>50</b>
<b>C. Cálculo de correlaciones <math>\langle c_I^\dagger c_J \rangle</math></b>	<b>52</b>

# Índice de figuras

1.1. Teoría de bandas electrónicas. . . . .	7
1.2. Topología en cuerpos geométricos. . . . .	8
2.1. Molécula de poliacetileno (arriba), cadena SSH con enlaces alternados $v$ y $w$ (abajo). . . . .	11
2.2. Relación de dispersión de la energía del bulk de una cadena cerrada, para distintos valores del parámetro de deformación $\lambda$ . . . . .	14
2.3. Espectro de energía del modelo SSH en función del parámetro de deformación $\lambda$ , para cadena abierta de 100 sitios (50 celdas) con amplitud de transferencia $t=1$ (izquierda) y estados de borde topológicos (derecha). . . . .	15
2.4. Dimerización de la cadena en el límite trivial $\lambda = -1$ (a) y en el límite topológico $\lambda = 1$ (b). . . . .	17
2.5. a) Flujo magnético externo confinado en una trayectoria cerrada por la cual circulan electrones, b) anillo cuántico de cantidad de sitios $N$ y amplitud de transferencia $t_R$ entre sitios vecinos. . . . .	19
3.1. Unión de cadenas SSH con anillo cuántico de Aharonov-Bohm, los sitios extremos de las cadenas siempre se conectan con el sitio vecino a través de un enlace tipo $v$ y la conexión entre las cadenas y el anillo central puede ser de tipo $v$ o $w$ . . . . .	23

3.2. Espectro de energía en función de $\lambda$ para flujos $\Phi/\Phi_0 = 0, 0.25, 0.5$ en los paneles a) b) y c) (conexión cadena-anillo tipo $v$ ) y en los paneles d), e) y f) (conexión cadena-anillo tipo $w$ ) respectivamente. La transición de fase ocurre en $\lambda \approx 0$ , donde se cierra (y posteriormente se abre) una brecha de energía. . . . .	25
3.3. Energía en función del flujo magnético para los 5 niveles mas próximos a $E = 0$ . En el panel (a y c) se grafican los niveles en el caso $\lambda = -0.5$ (fase trivial) y en el panel (b y d) se muestra la dependencia de los niveles de energía para $\lambda = 0.5$ (fase topológica). La conexión del anillo con las cadenas SSH son del tipo $v$ (panel a y b) o son del tipo $w$ (panel c y d). . . . .	27
3.4. Densidad de probabilidad del estado de energía $E = 0$ correspondiente al panel a) de la figura (3.3). El estado se localiza en las cercanías del anillo, el cuál se encuentra entre el sitio 48 al sitio 52, presentando localización no nula en el sitio superior (sitio 49), lo cuál indica una fragmentación efectiva del anillo. La gráfica interna representa un acercamiento a los sitios del anillo y sus vecinos. . . . .	29
3.5. Matriz Función de Green generada por los elementos de correlación $G_{IJ}$ (izquierda), matriz $G$ que representa un bloque particular del sistema (derecha). . . . .	32
3.6. Concurrencia en cadena SSH: $C_1 = C_{A_n B_n}$ corresponde al entrelazamiento entre los dos sitios internos de cada celda unitaria (conectados con enlace tipo $v$ ) y $C_2 = C_{B_n A_{n+1}}$ corresponde al entrelazamiento entre sitios vecinos $B_n$ y $A_{n+1}$ conectados con enlaces tipo $w$ . . . . .	34
3.7. Entropía de entrelazamiento $S$ cuyo subsistema de dos sitios está conformado por los extremos de la cadena SSH (izquierda). Concurrencia $C_{A_1 B_N}$ entre los sitios extremos del sistema (derecha). . . . .	35

3.8.	Concurrencia para sitios intraceldas (a y c) e interceldas (b y d), donde la conexión de las cadenas y el anillo es del tipo $v$ (a y b) o del tipo $w$ (c y d). Para cada medida se aplicaron tres flujos magnéticos $\Phi/\Phi_0=0, 0.25, 0.5$ (verde, azul, rojo). . . . .	37
3.9.	Medida de concurrencia entre sitios extremos del sistema, donde la conexión de las cadenas y el anillo es del tipo $v$ (panel a) o del tipo $w$ (panel b). Para cada medida de concurrencia se aplicaron tres flujos magnéticos $\Phi/\Phi_0=0, 0.25, 0.5$ (verde, azul, rojo) y en la gráfica interna de cada panel se estudia la concurrencia en función del flujo magnético para determinado valor de $\lambda$ . . . . .	38
3.10.	Entropía de entrelazamiento $S$ entre sitios extremos de las cadenas (subsistema de dos sitios) y el resto, donde la conexión es de tipo $v$ (panel a) y tipo $w$ (panel b). Para cada medida de $S$ se aplicaron tres flujos magnéticos $\Phi/\Phi_0=0, 0.25, 0.5$ (verde, azul, rojo), en la gráfica interna de cada panel se estudia la entropía de entrelazamiento en función del flujo magnético para determinado valor de $\lambda$ . . . . .	40
3.11.	Entropía de entrelazamiento $S$ en función del flujo magnético para distintos valores del parametro $\lambda=0.1, 0.3, 0.5, 0.8$ (verde, magenta, rojo, azul). La conexión cadenas-anillo es de tipo $v$ . . . . .	41

# Capítulo 1

## Introducción

Los grandes avances en el mundo de la electrónica y de las telecomunicaciones habrían sido imposibles sin el profundo conocimiento que hemos adquirido en las últimas décadas sobre las propiedades electrónicas de distintos materiales de interés tecnológico; conocimiento en gran parte ligado a una de las primeras aplicaciones exitosas de la física cuántica: la teoría de bandas.

En 1928, Felix Bloch defendía su tesis doctoral, en la que concluyó que un electrón en un sólido puede ser descrito como una onda cuántica que está modulada por el potencial periódico de la red cristalina y que, por lo tanto, puede ser difractado por esta red. Esta difracción genera bandas electrónicas que pueden contener regiones energéticamente prohibidas, denominadas *gap* en inglés, en las que el electrón no se puede propagar [1, 2]. Estas brechas energéticas determinan si un material con cierta densidad electrónica es un aislante, un semiconductor, o un metal (figura 1.1).

La teoría de bandas es capaz de describir correctamente un gran número de materiales. Entre sus éxitos se cuentan materiales y dispositivos fundamentales, tales como, los ordenadores o las telecomunicaciones inalámbricas (tecnologías derivadas de la física de semiconductores y de los transistores).

Debido en gran parte a esos logros, se pensaba que se entendían bien todos los

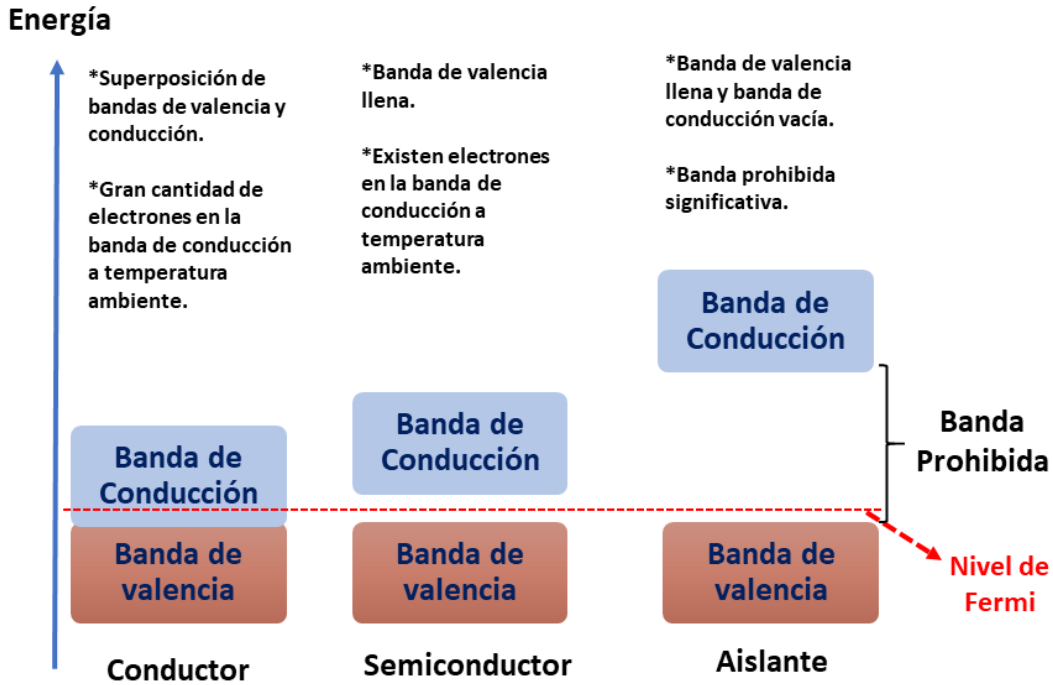


Figura 1.1: Teoría de bandas electrónicas.

aspectos de la teoría de bandas. Pero, en los últimos años, se han estudiado desde un punto de vista radicalmente nuevo, el de sus propiedades topológicas. Este original punto de vista rompe con varios paradigmas que creíamos bien establecidos [3] y nos ha permitido descubrir nuevos materiales con propiedades que ni tan siquiera intuíamos; entre ellas, la de ser aislantes en todo el volumen pero metálicos en la superficie [4, 5]. Estas superficies de carácter metálico son muy robustas debido a una protección topológica que permite a la corriente eléctrica fluir sin pérdidas. Esta protección aparece como resultado de un nuevo tipo de transición de fase, muy distinta de las que hallamos en termodinámica y física estadística.

La topología es la rama de las matemáticas que estudia qué propiedades de los cuerpos geométricos permanecen invariantes cuando los deformamos continuamente de manera suave. Desde el punto de vista de la topología, objetos de igual clase topológica son equivalentes, pues hemos realizado esas deformaciones sin cor-

tar y sin pegar (figura 1.2). Al contrario, no podemos transformar una esfera en una rosquilla, ya que no podemos crear un agujero sin romperla (deformación discontinua). Matemáticamente, la geometría y la topología se relacionan mediante un invariante topológico que mide el número de agujeros (*genus*), éste se calcula mediante una integral de superficie de la curvatura geométrica.

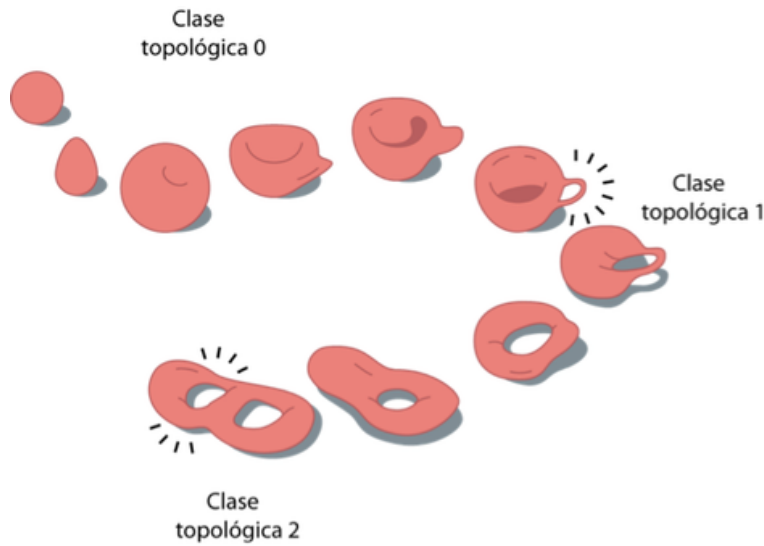


Figura 1.2: Topología en cuerpos geométricos.

De manera similar, podemos calcular integrales sobre la superficie de cierta estructura de bandas y obtener un invariante topológico denominado número de Chern. Igual que no podemos convertir una rosquilla en una esfera sin cerrar un agujero, no podemos convertir una banda normal (número de Chern cero) en una banda topológica (número de Chern no nulo) sin cerrar una brecha de energía (gap). El proceso donde el número de Chern, o cualquier otro invariante topológico, cambia al *cerrar una brecha de energía* se denomina *transición de fase topológica*. La consecuencia más inmediata es que un aislante topológico siempre tiene una frontera metálica (sin brecha) cuando está en contacto con un aislante trivial o con el vacío.

La idea de aislante topológico fue reforzada con el descubrimiento del efecto

Hall cuántico [6]. Klaus von Klitzing descubrió que un sistema bidimensional de electrones sometido a un alto campo magnético se comportaba como aislante en su parte interna, mientras que en los bordes fluía una corriente sin disipación. Este sistema exhibía una resistencia Hall que estaba cuantizada en múltiplos enteros del cociente  $h/e^2$ , que solo depende de constantes fundamentales, la constante de Planck  $h$  y la carga del electrón  $e$ . Este cociente presentaba una robustez inusual (precisión de  $10^{-9}$ ) en casi cualquier tipo de muestra, independiente del grado de desorden, impurezas o de otros detalles microscópicos. Dos años después, un trabajo teórico demostró que la cuantización de la resistencia Hall guarda relación con el número de Chern y que, por tanto, es resultado de una fase topológica [7].

Aparte de sus posibles aplicaciones en la fotónica o en la computación cuántica, los materiales topológicos permiten estudiar todo tipo de fenómenos cuánticos relativistas y conceptos de física de altas energías en sistemas de materia condensada. Es sin duda uno de los campos con mayor proyección de la física de los próximos años y que dará lugar a grandes avances técnicos y conceptuales.

Nuestro problema de investigación es estudiar un nuevo sistema topológico conformado por cadenas SSH con un anillo cuántico de Aharonov-Bohm, caracterizar las fases topológicas presentes a través de los cierres que se producen en las bandas de energía y usar medidas de entrelazamiento que logren describir las transiciones de fases debido a la variación de parámetros del hamiltoniano.

En el capítulo 2 de este trabajo se describe la teoría preliminar: El modelo SSH (aislante topológico), el efecto Aharonov-Bohm en anillos cuánticos y el uso de medidas de entrelazamiento para estudiar sistemas topológicos.

En el capítulo 3 se formula el problema, se estudia un sistema formado por cadenas SSH con un anillo cuántico de Aharonov-Bohm integrado, se caracterizan las fases topológicas del sistemas a través de las bandas de energía y se estudian las transiciones de fase usando medidas de entrelazamiento.

En el capítulo 4 se describen las conclusiones y los trabajos por realizar.

# Capítulo 2

## Formalismo teórico

En este capítulo se describe el modelo SSH y sus fases topológicas características (trivial y no-trivial topológica), las cuáles, son estudiadas a través de las bandas de energía, la transición entre fases está caracterizada por un cierre (y posterior reapertura) en la brecha de energía. En la segunda sección de este capítulo, se presentan los anillos cuánticos y los efectos producidos por la incidencia de un flujo magnético. En la tercera sección, se discute el uso de medidas de entrelazamiento en el estudio de materiales topológicos.

### 2.1. Modelo SSH

Un modelo que presenta fases topológicas es el de Su-Schrieffer- Heeger (SSH) [4, 5, 8–10], este es utilizado para describir al polímero aislante poliacetileno (figura 2.1, arriba). Este polímero es descrito mediante una cadena orgánica de unidades C - H (carbono e hidrógeno) acopladas en un arreglo cuasi-unidimensional. Los átomos de carbono comparten cuatro electrones de valencia, tres de los cuales participan en enlaces con los átomos de carbono vecinos, mientras que el electrón restante se enlaza en un orbital- $\pi$  perpendicular a la cadena con el átomo de hidrógeno, este sistema puede ser tratado al nivel de un modelo de enlace fuerte

(apéndice A). Se podría intuir que el acoplamiento entre todos los orbitales- $\pi$ , provenientes de cada celda unitaria de la cadena, forme una banda, implicando así que la molécula de poliacetileno sea un conductor. Sin embargo, debido a la inestabilidad de Peierls [11], en el límite de medio llenado, la configuración que minimiza la energía y por ende, la mas estable, es aquella en la que el poliacetileno está dimerizado. Es decir, la configuración mas estable es una secuencia lineal y periódica, cuya celda unitaria esta formada por una molécula (CH), lo que produce una alternancia periódica en la intensidad de la ligadura entre las moléculas CH vecinas. Como consecuencia de esta dimerización, se produce una brecha en la banda de energía en el nivel de Fermi, convirtiendo al Poliacetileno en un material aislante.

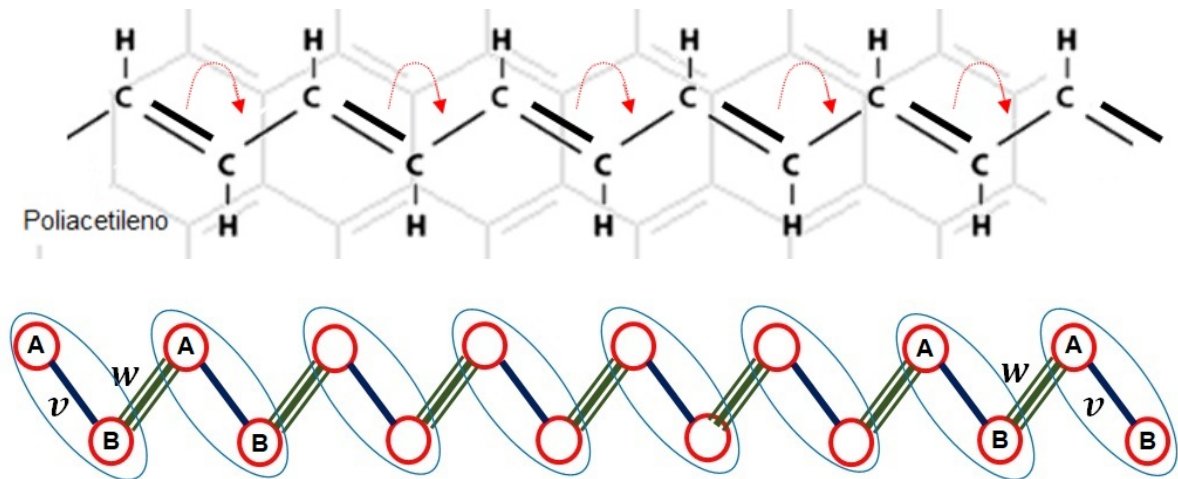


Figura 2.1: Molécula de poliacetileno (arriba), cadena SSH con enlaces alternados  $v$  y  $w$  (abajo).

Por lo tanto, la cadena SSH puede modelarse como una red cristalina unidimensional de sitios, donde los electrones son libres de transferirse entre sitios vecinos (situación que se estudia de manera sencilla bajo el formalismo de segunda cuantización). La inestabilidad de Peierls implica que la amplitud de transferencia electrónica se alterna entre enlaces fuertes y débiles. Por lo tanto, cada celda uni-

taria contiene dos sitios A y B, y puesto que se está en el límite de medio llenado, sólo se permite la existencia de un electrón por celda unitaria. La interacción entre electrones es omitida y el grado de libertad de espín está ausente, así el modelo SSH describe electrones con espín polarizado. El Hamiltoniano puede escribirse de la forma

$$\mathcal{H}_{SSH} = \sum_{j=1}^N \left( v c_{B_j}^\dagger c_{A_j} + \text{h.c.} \right) + \sum_{j=1}^{N-1} \left( w c_{A_{j+1}}^\dagger c_{B_j} + \text{h.c.} \right), \quad (2.1)$$

donde  $N$  corresponde a la cantidad de celdas, el operador  $c_{S_j}^\dagger$  crea un electrón en el subsitio  $S = A$  ó  $B$ . La amplitud de transferencia electrónica intracelda es  $v = t(1 - \lambda)$ , la intercelda es  $w = t(1 + \lambda)$ ,  $t$  es considerada como un número real positivo, el parámetro adimensional  $\lambda$ , conocido como parámetro de asimetría, regula la energía de los enlaces dentro y entre las celdas y está sujeto a la condición  $|\lambda| \leq 1$ .

### 2.1.1. Hamiltoniano del bulk

El bulk es la parte más central del cristal en el límite termodinámico (cuando  $N$  tiende a infinito). Por encontrarse lejos de los bordes, las propiedades del bulk son insensibles a las características de los mismos, y por este motivo pueden ser calculadas de manera más sencilla si se identifican los contornos opuestos de la cadena (condiciones de borde de Born-von Karman). Por lo tanto, para estudiar estas propiedades debemos imponer condiciones de contorno periódicas del tipo

$$c_j = c_{j+N}, \quad (2.2)$$

lo que corresponde a cerrar la cadena formando un anillo. Bajo esta condición el sistema es invariante ante traslaciones discretas de una unidad de celda. Esta

simetría traslacional implica la conservación del momento cristalino, y por lo tanto, los autoestados del momento cristalino diagonalizan el Hamiltoniano SSH (ver apéndice A). Por ello resulta conveniente representar a los fermiones en la base de autoestados del momento cristalino, lo que no es otra cosa que una transformada de Fourier con valores del vector de onda  $k = 2\pi p/Na$ , con  $p = 0, 1, 2, \dots, N - 1$  y  $a$  el parámetro de la red. Se dice que la representación de los operadores en la base de los autoestados del momento cristalino, es la representación en la red recíproca. Los nuevos operadores fermiónicos satisfacen la relación

$$c_{S_j} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} c_{S_k}. \quad (2.3)$$

Los valores de  $k$  que difieren en una cantidad  $2\pi$  son equivalentes. Para el límite  $N \gg 1$ ,  $k$  puede ser aproximada como una variable continua y periódica en el intervalo  $[-\pi, \pi]$ . Insertando el operador (2.3) en la expresión para el Hamiltoniano y haciendo uso de la identidad

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{i(k-k')j} = \delta_{k,k'} \quad (2.4)$$

obtenemos

$$\mathcal{H}_{SSH} = \sum_k (v + we^{-ik}) c_{A_k}^\dagger c_{B_k} + \sum_k (v + we^{ik}) c_{B_k}^\dagger c_{A_k}, \quad (2.5)$$

Introduciendo los operadores  $\Psi^\dagger = (c_{A_k}^\dagger, c_{B_k}^\dagger)$  y  $\Psi = (c_{A_k}, c_{B_k})^T$ , el hamiltoniano se puede expresar como

$$\mathcal{H}_{SSH} = \sum_k \Psi_k^\dagger H_{bulk} \Psi_k \quad (2.6)$$

con

$$H_{bulk}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Diagonalizando el hamiltoniano en (2.7) podemos obtener la relación de dispersión de la energía del bulk.

$$E(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k}, \quad (2.8)$$

reemplazando  $v = t(1 - \lambda)$  y  $w = t(1 + \lambda)$ , las bandas de energías toman la forma,

$$E(k) = \pm t \sqrt{2 + 2\lambda^2 + 2(1 - \lambda^2) \cos k}. \quad (2.9)$$

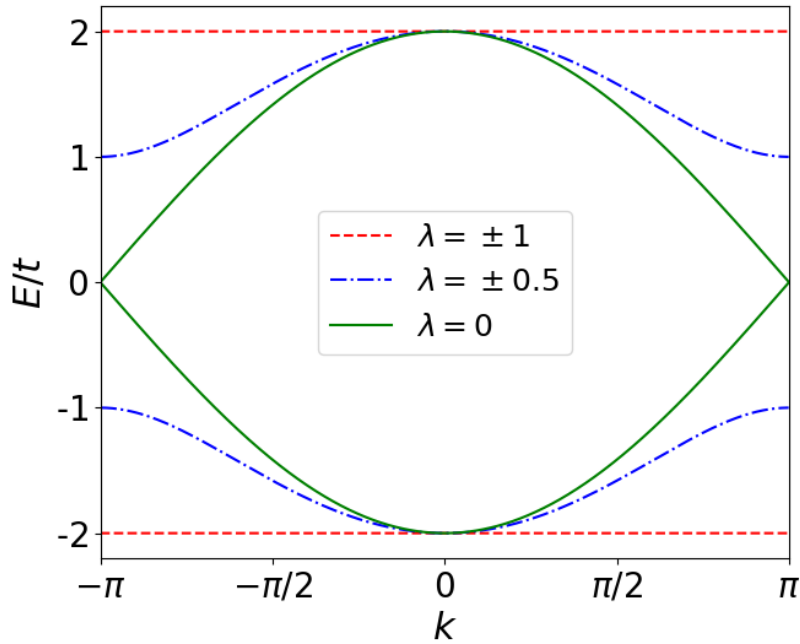


Figura 2.2: Relación de dispersión de la energía del bulk de una cadena cerrada, para distintos valores del parámetro de deformación  $\lambda$ .

Podemos deducir directamente que el sistema tiene un cierre en la brecha de energía para  $k = \pm\pi$  y  $\lambda = 0$ , implicando un cambio en la topología del sistema según el criterio de *transición de fase topológica* [4, 5], el cuál se puede verificar en la figura (2.2).

### 2.1.2. Cadena abierta

Para estudiar el sistema con bordes, podemos implementar numéricamente el hamiltoniano en (2.1), definiendo un arreglo matricial  $\mathbf{H}_{SSH}$  de  $2N \times 2N$  dimensiones, donde los autovalores de la matriz corresponden a las autoenergías  $E_n$  del sistema, permitiendo estudiar el espectro de niveles de energía.

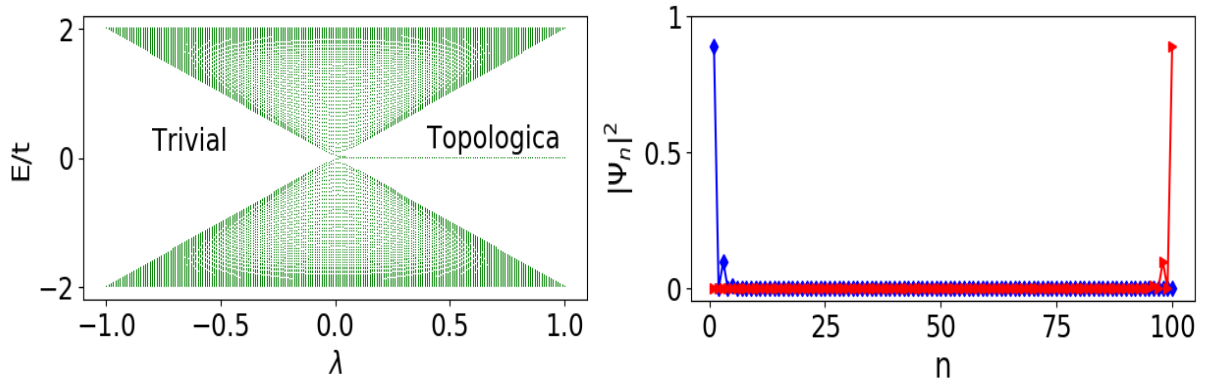


Figura 2.3: Espectro de energía del modelo SSH en función del parámetro de deformación  $\lambda$ , para cadena abierta de 100 sitios (50 celdas) con amplitud de transferencia  $t=1$  (izquierda) y estados de borde topológicos (derecha).

El cierre en la brecha de energía para  $\lambda = 0$  implica una transición de fase topológica (figura 2.3, izquierda), que es exactamente el mismo valor de  $\lambda$  que induce un cierre en la brecha de energía del bulk (figura 2.2). Por lo tanto, el sistema posee dos fases características:

- Fase trivial ( $\lambda < 0$ ): La energía de enlace intracelda  $v$  es mayor que la energía de enlace intercelda  $w$ , implicando que el sistema se comporte como un material aislante, caracterizado por poseer una gran brecha de energía.
- Fase no-trivial topológica ( $\lambda > 0$ ): La energía de enlace intracelda  $v$  es menor que la energía de enlace intercelda  $w$ , implicando que el sistema se comporte como un material aislante, caracterizado por poseer una gran brecha de energía. Sin embargo, existe una doble degeneración en el nivel de energía  $E = 0$ , la cual se mantiene robusta (invariante) en toda la fase topológica.

Estudiando la probabilidad de encontrar al electrón en algún sitio de la cadena para estos dos estados de energía nula, determinamos que se encuentran localizados en cada borde del sistema (figura 2.3, derecha) y se mantienen invariantes a medida que deformamos el parámetro  $\lambda$ . Solo se deslocalizan cuando nos acercamos a la transición de fase ( $\lambda \approx 0$ ).

### 2.1.3. Límite de dimerización

El modelo SSH se vuelve particularmente sencillo en los dos casos límites de dimerización: si el enlace intracelda  $v$  desaparece o el enlace intercelda  $w$  desaparece, la cadena se convierte en una secuencia de dímeros desconectados:

En el límite trivial ( $\lambda = -1$ ), el hamiltoniano queda como

$$\mathcal{H}_{SSH} = 2t \sum_{j=1}^N \left( c_{B_j}^\dagger c_{A_j} + h.c. \right) \quad (2.10)$$

donde la amplitud de transferencia intercelda  $w$  desaparece, evidenciando una dimerización producida por enlaces  $v$  dentro de cada celda unitaria.

En el límite topológico ( $\lambda = 1$ ), el hamiltoniano queda como

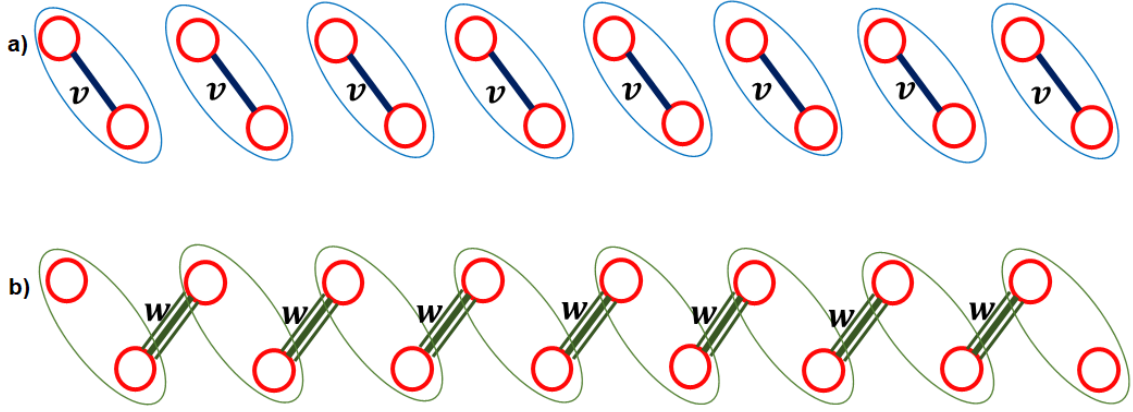


Figura 2.4: Dimerización de la cadena en el límite trivial  $\lambda = -1$  (a) y en el límite topológico  $\lambda = 1$  (b).

$$\mathcal{H}_{SSH} = 2t \sum_{j=1}^{N-1} \left( c_{A_{j+1}}^\dagger c_{B_j} + h.c. \right) \quad (2.11)$$

donde la amplitud de transferencia intracelda  $v$  desaparece, evidenciando una dimerización producida por enlaces  $w$  entre celdas vecinas, dejando un sitio desapareado a cada extremo de la cadena. Esto se puede evidenciar en el hamiltoniano, ya que en la expresión (2.11) no aparecen los operadores  $c_{A_1}^\dagger$  ni  $c_{B_N}^\dagger$ , los cuales conmutan con el hamiltoniano, y por lo tanto, son responsables de la existencia de la degeneración del espectro de energía en el nivel  $E=0$ .

## 2.2. Efecto Aharonov-Bohm en anillos cuánticos

En mecánica clásica, el movimiento de una partícula está determinado por las condiciones iniciales y las fuerzas que actúan sobre ella. En el caso de una carga eléctrica, es la fuerza de Lorentz la que describe como interactúan los campos eléctrico  $\vec{E}$  y magnético  $\vec{B}$  con las cargas. Esta interacción es local, por lo tanto, en el caso que en una determinada región del espacio el campo electromagnético

fuera nulo, la fuerza aplicada sobre la carga también lo sería.

En los cursos de electromagnetismo, nos enseñan que los campos  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  se pueden expresar en función de un potencial escalar  $\Phi$  y un potencial vector  $\vec{A}$  ( $\vec{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$  y  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ ). En electrodinámica clásica, son los campos eléctricos y magnéticos los que interactúan con las cargas, mientras que el cuadripotencial  $(\Phi, \vec{A})$  ocupa un lugar secundario al menos en lo que se refiere a las ecuaciones de movimiento de las cargas. Mas aún, el cuadripotencial no es unívoco, a partir de distintos cuadripotenciales, los cuales se relacionan entre sí mediante transformaciones de calibre, se pueden obtener los mismos campos electromagnéticos. Esto, al menos desde la perspectiva clásica, induce a considerar que  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  son campos reales mientras que el cuadripotencial queda relegado a un segundo plano. En electrodinámica clásica el potencial escalar posee un claro significado físico, la de la energía potencial de una unidad de carga según su posición espacial, por el contrario, con el potencial vector no ocurre lo mismo, este solo funciona como un accesorio matemático.

Para visualizar este punto, consideremos un solenoide infinito. El campo magnético producido por la densidad de corriente es nulo en el exterior del solenoide, mientras que el potencial vector  $\vec{A}$  es no nulo en esa misma región del espacio. Clásicamente, la trayectoria de una carga en la región externa al solenoide no sufre fuerza alguna, es decir, que ni la presencia del solenoide ni el hecho de que  $\vec{A} \neq 0$  influyen sobre la trayectoria de las cargas en la región externa al solenoide. Cuando pasamos al dominio de la mecánica cuántica, el escenario se modifica radicalmente. En este dominio, en general los sistemas se describen por cantidades como su energía, momento lineal, o el momento angular, mientras que cantidades como la fuerza y el torque, pasan a un segundo plano. En efecto, es el Hamiltoniano, el cual está relacionado con el concepto de energía, el que nos permite construir la ecuación de Schrödinger y el que determina la dinámica del sistema considerado. En el caso particular de que se trate de una carga en un campo electromagnético,

aparecen explícitamente el potencial vector y el potencial escalar en la ecuación de Schrödinger.

El efecto Aharonov-Bohm es un efecto mecánico cuántico que resulta de la invariancia de *calibre* [12]. Este establece que si tenemos electrones viajando a lo largo de dos caminos y si entremedio de esos caminos atraviesa un flujo magnético (figura 2.5.a) el cuál desaparece en la trayectoria de los electrones (es decir, no hay fuerza fuerza magnética actuando sobre los electrones), este mismo flujo magnético producirá un cambio de fase en la función de onda de los electrones. Asumiendo que los caminos son iguales, el efecto Aharonov-Bohm genera un cambio de fase dado por,

$$\varphi = \frac{e}{\hbar} \oint_C \vec{A} d\vec{l}, \quad (2.12)$$

donde  $\vec{A}$  es el potencial vector magnético,  $\hbar$  la constante de planck y  $e$  es la carga del electrón que circula por el camino  $C$ .

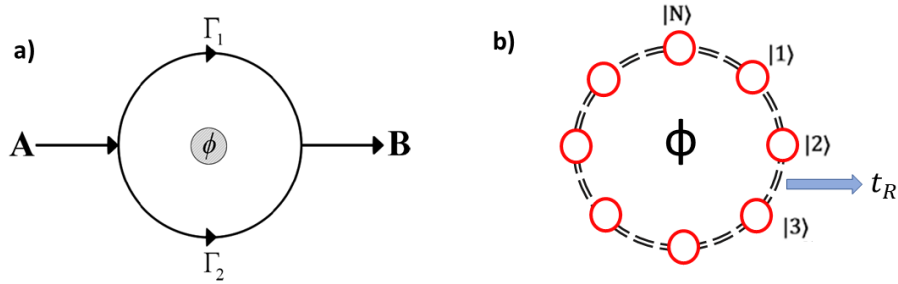


Figura 2.5: a) Flujo magnético externo confinado en una trayectoria cerrada por la cual circulan electrones, b) anillo cuántico de cantidad de sitios  $N$  y amplitud de transferencia  $t_R$  entre sitios vecinos.

Con el objetivo de estudiar un anillo cuántico de cantidad de sitios finito por el cual incide un flujo magnético externo (figura 2.5.b), una fase de Aharonov-Bohm debe ser introducida en el Hamiltoniano del sistema. Es decir, la función de onda del electrón cambia una fase dada por  $(2\pi\Phi/\Phi_0)$  al completar una vuelta completa

alrededor del anillo. Esto puede ser descrito definiendo el siguiente Hamiltoniano invariante traslacional

$$\mathcal{H}_R = \sum_{j=1}^{N_R} t_R e^{i\varphi} c_{R_j}^\dagger c_{R_{j+1}} + \text{h.c.}, \quad (2.13)$$

donde  $N_R$  es la cantidad de sitios,  $t_R$  representa el enlace entre sitios del anillo,  $\varphi = 2\pi\Phi/(N_R\Phi_0)$  es la fase de Aharonov-Bohm debida al flujo magnético incidente,  $\Phi$  es el flujo magnético y  $\Phi_0 = h/e$  el cuanto de flujo magnético.

Una de las consecuencias debido a la incidencia de un flujo es la presencia de corrientes persistentes. Estas son corrientes capaces de sostenerse independientemente de la aplicación de una diferencia de voltaje. Son conocidas y estudiadas desde hace mucho tiempo en los superconductores [13–16], mientras que en anillos cuánticos, podemos determinar la presencia de corrientes persistentes (ver apéndice B) mediante

$$I_n = -\frac{\partial E_n}{\partial \Phi} \quad (2.14)$$

donde  $I_n$  corresponde a la corriente eléctrica para el nivel energético  $E_n$ .

### 2.3. Entrelazamiento como medida de transición de fase topológica

La transición de fase cuántica es uno de los fundamentos pilares de la física de materia condensada. El entendimiento convencional afirma que las diferentes fases cuánticas generalmente se discriminan en términos de las simetrías acarreadas por el estado fundamental (Simetría de Inversión Temporal, Partícula-Agujero y Quiral) o por características que tienen una interpretación topológica subyacente.

El primero es descrito por parámetros de orden local asociados a las simetrías, mientras que el segundo por ordenes topológicos (ordenes robustos frente a las perturbaciones locales que puedan romper todas las simetrías) [17].

El moderno entendimiento de transiciones de fases topológicas ha sido enriquecido en los últimos años debido a la incorporación del concepto de *entrelazamiento* [18–20]. Estas fases topológicas son determinadas, después de todo, por como diferentes partículas o diferentes partes en un sistema están mutuamente relacionadas a través de sus propiedades globales, tales como, los ordenes topológicos. En este sentido, es natural pensar que el entrelazamiento sea la herramienta esencial en la detección de las transiciones entre fases topológicas.

Esta perspectiva es especialmente poderosa en el estudio de ordenes topológicos, los cuales son puramente efectos cuánticos. Por ejemplo, estados con un orden topológico intrínseco tienen entrelazamiento de largo alcance y una entropía de entrelazamiento topológica no nula [21–23]. Otro ejemplo son los ordenes topológicos con *protección de simetría*, los cuales son descritos por un espectro de entrelazamiento degenerado [24–27].

Con esta idea, se intenta complementar el entendimiento de las transiciones de fase que ocurren en el modelo SSH, el cual ya ha sido estudiado a través del entrelazamiento de dos sitios (*conurrencia*)[28]. Se propone estudiar las transiciones de fase para el nuevo modelo compuesto por cadenas SSH y un anillo de Aharonov-Bohm usando medidas de entrelazamiento de los modos fermiónicos del sistema [29].

El uso de estas medidas se hará en función del parámetro de deformación  $\lambda$ , el cuál caracteriza las transiciones de fase en el espectro de energía del sistema cuando se cierra una brecha. Además, se estudiará la influencia del flujo magnético en el espectro de entrelazamiento.

# Capítulo 3

## Formulación del problema

En este capítulo se estudia un nuevo sistema topológico conformado por cadenas SSH y un anillo cuántico por el cuál incide un flujo magnético (figura 3.1). En la segunda sección del capítulo se comprueba que el sistema mantiene las fases características de la cadena SSH (trivial y no-trivial topológica) y los estados de borde se mantienen invariantes en la fase topológica. Sin embargo, la incidencia del flujo magnético genera corrientes persistentes en el anillo y nuevos estados topológicos robustos aparecen para determinadas configuraciones del sistema. La tercera sección introduce el formalismo matemático necesario para calcular, en primera instancia, la matriz de densidad reducida para un sistema de fermiones no interactuantes, la cuál, será el punto de partida para el cálculo de diferentes medidas de entrelazamiento entre modos fermiónicos de un sistema bipartito (entropía de entrelazamiento) y medidas de entrelazamiento entre los modos fermiónicos de dos sitios (conurrencia). Estas medidas logran caracterizar las fases presentes (trivial y no-trivial topológica) y permiten describir, dependiendo de la elección de subsistemas y sitios, las transiciones entre fases debido a la variación de parámetros del hamiltoniano.

### 3.1. Hamiltoniano del sistema SSH-Anillo

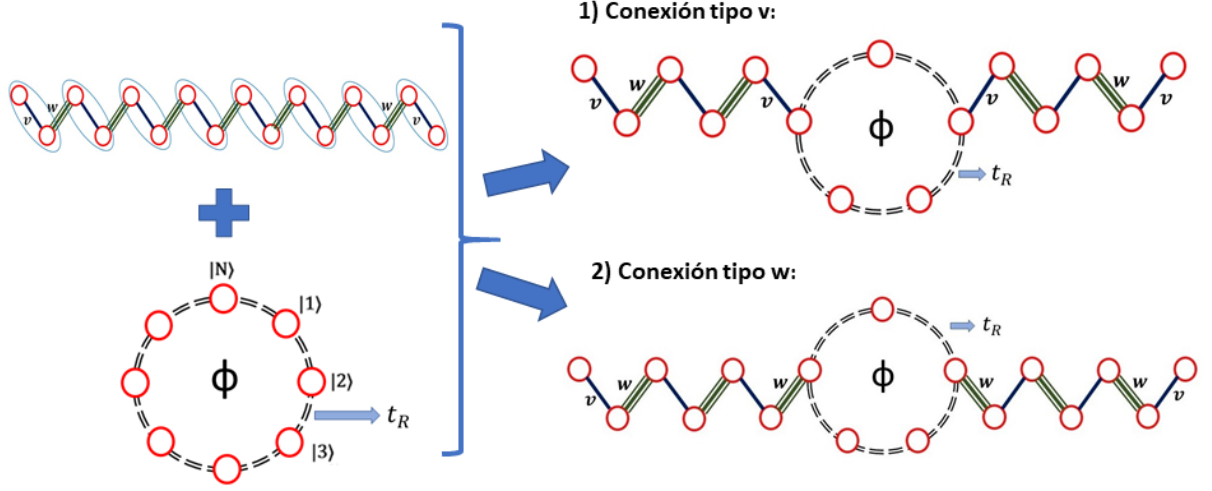


Figura 3.1: Unión de cadenas SSH con anillo cuántico de Aharonov-Bohm, los sitios extremos de las cadenas siempre se conectan con el sitio vecino a través de un enlace tipo  $v$  y la conexión entre las cadenas y el anillo central puede ser de tipo  $v$  o  $w$ .

El Hamiltoniano del sistema es descrito por tres contribuciones,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{SSH} + \mathcal{H}_R + \mathcal{H}_{R-SSH}, \quad (3.1)$$

donde  $\mathcal{H}_{SSH}$  corresponde al modelo SSH estudiado en el capítulo anterior,

$$\mathcal{H}_{SSH} = \sum_{\eta=L,R} \left\{ \sum_{j=1 \in \eta}^N \left( v c_{B_j}^\dagger c_{A_j} + \text{h.c.} \right) + \sum_{j=1 \in \eta}^{N'} \left( w c_{A_{j+1}}^\dagger c_{B_j} + \text{h.c.} \right) \right\}, \quad (3.2)$$

con  $N' = N$  (o  $N - 1$ ) cuando las cadenas se conecten con el anillo según enlace tipo  $v$  (o  $w$ ),  $v = t(1 - \lambda)$ ,  $w = t(1 + \lambda)$ ,  $|\lambda| \leq 1$  y  $\eta = L, R$  describen la cadena izquierda y derecha respectivamente.

$\mathcal{H}_R$  corresponde a la descripción del anillo cuántico,

$$\mathcal{H}_R = \sum_{j=1}^{N_R} t_R e^{i\varphi} c_{R_j}^\dagger c_{R_{j+1}} + \text{h.c.}, \quad (3.3)$$

donde  $N_R$  es la cantidad de sitios,  $t_R$  representa el enlace entre sitios dentro del anillo,  $\varphi = 2\pi\Phi/(N_R\Phi_0)$  es la fase de Aharonov-Bohm debida al flujo magnético incidente,  $\Phi$  es el flujo magnético y  $\Phi_0 = h/e$  el cuanto de flujo magnético.

La última contribución describe la conexión entre las cadenas SSH y el anillo central,

$$\mathcal{H}_{R-SSH} = t' \left( c_{R_1}^\dagger c_{N_L} + c_{1_R}^\dagger c_{R_c} \right) + \text{h.c.}, \quad (3.4)$$

donde  $t' = (v \ o \ w)$ , el primer y segundo término detallan la conexión izquierda y derecha respectivamente, entre las cadenas SSH y el anillo.

Utilizando el mismo proceso que en la sección (2.1.2), podemos implementar numéricamente el hamiltoniano en (3.1), definiendo un arreglo matricial  $\mathbf{H}$  de  $N_{total} \times N_{total}$  dimensiones ( $N_{total} = 2N' + N_R$ ), donde los autovalores de la matriz corresponden a las autoenergías  $E_n$  del sistema, permitiendo estudiar la estructura de los niveles de energía.

## 3.2. Fases topológicas del sistema SSH-Anillo

Hemos encontrado que las propiedades cualitativas del sistema depende esencialmente del tipo de conexión entre cadenas-anillo, que puede ser a través de una conexión tipo  $v$  o una conexión tipo  $w$ . No hay efectos cualitativos introducidos por el tamaño del anillo pero si influye la paridad de él, es decir, anillos con cantidad par de sitios se comportan cualitativamente igual entre si, de la misma manera para anillos con cantidad de sitios impar.

En vista de lo anterior, estudiaremos anillos con cinco sitios ( $N_R = 5$ ), las amplitudes de transferencia entre las cadenas y el anillo serán de tipo  $v$  o  $w$ , la

amplitud de transferencia  $t$  será fijada en la unidad ( $t=1$ ), la amplitud de transferencia entre sitios del anillo será  $t_R = 2$  y el parámetro de deformación  $\lambda$  estará sujeto a la condición  $|\lambda| \leq 1$ .

Mediante diagonalización directa del hamiltoniano descrito anteriormente (3.1), obtenemos los niveles de energía del sistema.

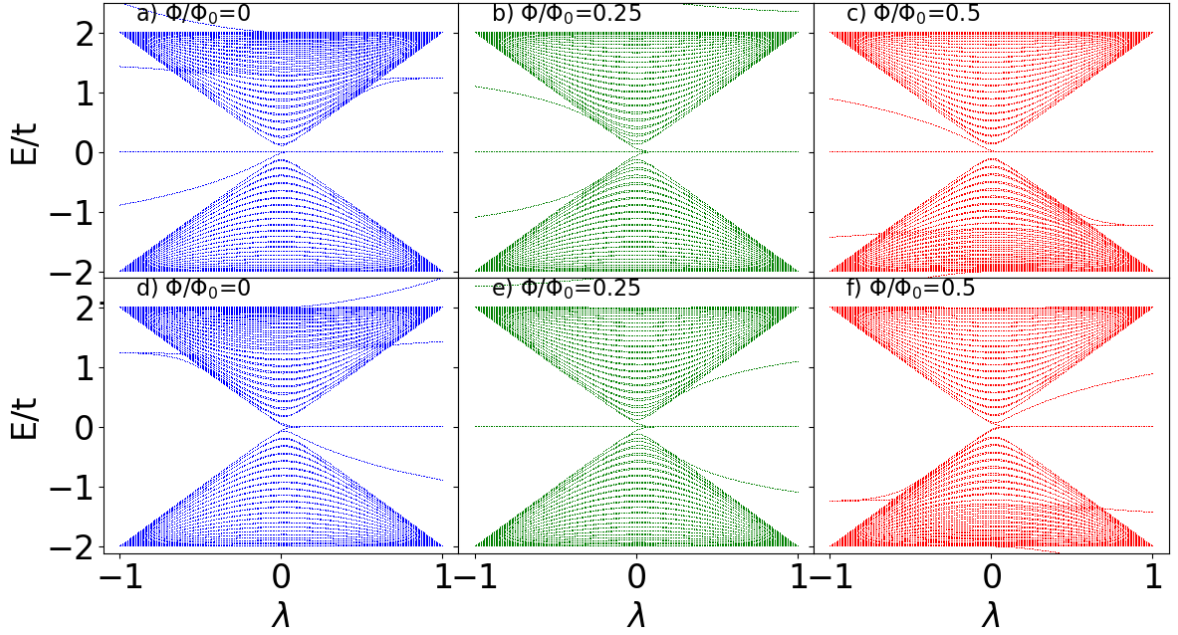


Figura 3.2: Espectro de energía en función de  $\lambda$  para flujos  $\Phi/\Phi_0 = 0, 0.25, 0.5$  en los paneles a) b) y c) (conexión cadena-anillo tipo  $v$ ) y en los paneles d), e) y f) (conexión cadena-anillo tipo  $w$ ) respectivamente. La transición de fase ocurre en  $\lambda \approx 0$ , donde se cierra (y posteriormente se abre) una brecha de energía.

En este ejemplo representativo, cada cadena SSH conectada al anillo está formada por 47(48) sitios para una conexión tipo  $v$  ( $w$ ), obteniendo un tamaño total de  $N_{total} = 99$  (101) sitios.

Se comprueba que el sistema preserva las fases presentes en la cadena SSH (sección 2.1.2), donde la fase trivial tiene lugar para  $\lambda < 0$ , la fase topológica cuando  $\lambda > 0$  y el punto de transición de fase ocurre en  $\lambda \approx 0$ , donde se cierra una

brecha de energía.

- Conexión tipo  $v$  (figura 3.2, panel a, b y c): En la fase trivial del sistema, aparece un estado de energía cero que se mantiene invariante para los distintos valores del flujo magnético incidente en el anillo, mientras que en la fase topológica, aparecen dos estados de energía nula correspondientes a los estados de borde topológicos característicos de la cadena SSH (figura 2.3, derecha). Adicionalmente, en la fase topológica, aparece un tercer estado de energía nula para valores del flujo  $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{2l-1}{4}, l \in \mathbb{Z}$ , correspondiente al panel b) de la figura 3.2.
- Conexión tipo  $w$  (figura 3.2, panel d, e y f): En la fase trivial del sistema aparece un estado de energía cero para valores del flujo  $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{2l-1}{4}, l \in \mathbb{Z}$ , correspondiente al panel e) de la figura 3.2, mientras que en la fase topológica del sistema, aparece una triple degeneración de energía nula, la cual se mantiene robusta para los distintos valores del flujo magnético incidente. De esta triple degeneración de energía cero, dos estados corresponden a los estados de bordes topológicos de la cadena SSH, mientras que el tercero, corresponde a un estado que se localiza en sectores desconectados del anillo y sus vecinos, como veremos más adelante.

Es interesante notar que la inserción del anillo y la incidencia de un flujo magnético en él, no influyen sobre los estados de borde de la fase topológica del sistema, la localización en los extremos se mantiene invariante en casi toda la fase y solo se deslocalizan cuando nos acercamos al punto de transición ( $\lambda \approx 0$ ), que es donde ocurre el cierre en la brecha de energía. Sin embargo, la aparición de nuevas excitaciones fermiónicas de energía cero, implican nuevos estados topológicos en las dos fases del sistema, los cuáles se estudiarán más en detalle.

El estudio del espectro de energía en función del flujo magnético en la figura (3.3) clarifica los resultados anteriores. Se analizan los 5 niveles energía más próxi-

mos a cero, para una conexión cadenas-anillo tipo  $v$  (panel a y b) y una conexión cadenas-anillo tipo  $w$  (panel c y d).

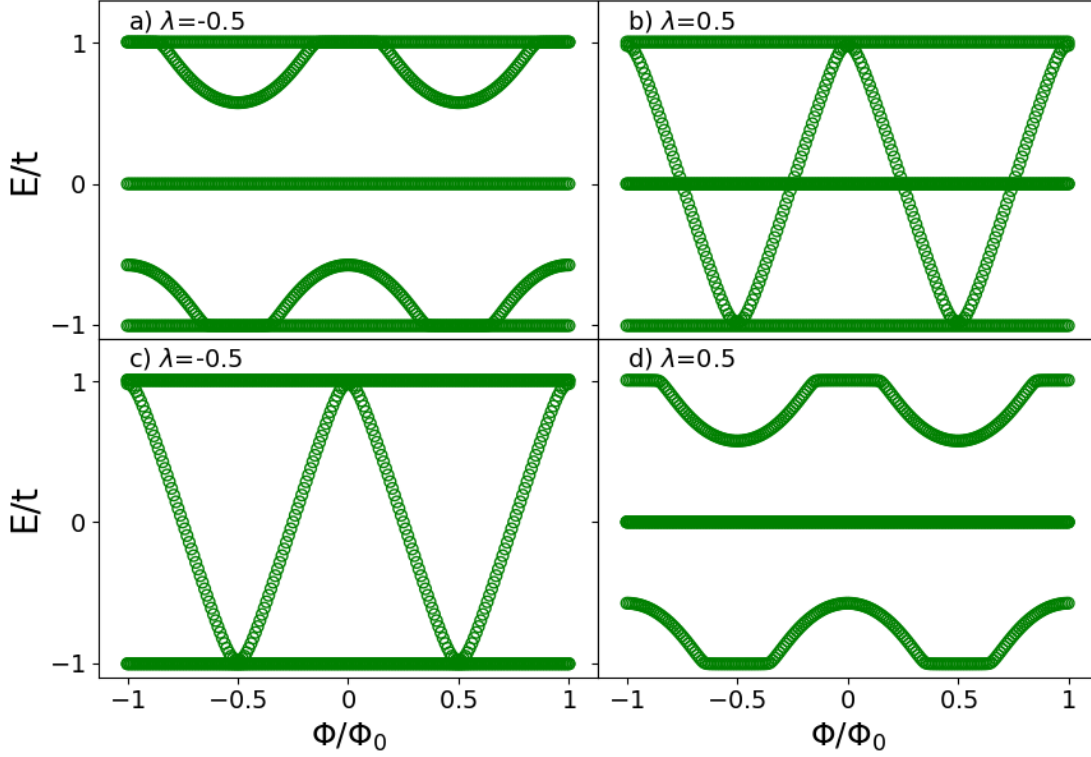


Figura 3.3: Energía en función del flujo magnético para los 5 niveles más próximos a  $E = 0$ . En el panel (a y c) se grafican los niveles en el caso  $\lambda = -0.5$  (fase trivial) y en el panel (b y d) se muestra la dependencia de los niveles de energía para  $\lambda = 0.5$  (fase topológica). La conexión del anillo con las cadenas SSH son del tipo  $v$  (panel a y b) o son del tipo  $w$  (panel c y d).

El estudio de la energía versus la proporción de cuanto de flujo  $\Phi/\Phi_0 \in [-1, 1]$ , se hace para valores del parámetro de deformación  $\lambda$  característicos de la fase trivial ( $\lambda = -0.5$ , panel a y c) y de la fase topológica ( $\lambda = 0.5$ , panel b y d).

- Conexión tipo  $v$  (figura 3.3, panel a y b): En la fase trivial del sistema podemos apreciar el nivel de energía nula reportado anteriormente (figura

3.2, panel a, b y c), este nivel es insensible a la variación del flujo magnético y corresponde a un estado confinado en zonas desconectadas del anillo. En la fase topológica se aprecian los dos estados de energía nula, característicos de la cadena SSH, mientras que un tercer nivel de energía fluctúa en torno a cero conforme varía el flujo magnético, dando lugar a la triple degeneración de energía nula solo para los valores que cumplan con  $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{2l-1}{4}, l \in \mathbb{Z}$ . Esta variación de la energía en función del flujo magnético implica la presencia de una corriente persistente según la ecuación (2.2).

- Conexión tipo  $w$  (figura 3.3, panel c y d): En la fase trivial del sistema podemos apreciar un nivel de energía que fluctúa en torno a cero conforme varía el flujo magnético, indicando la presencia de una corriente persistente. Mientras que en la fase topológica, se aprecia la triple degeneración de energía cero, la cuál es insensible al flujo magnético incidente en el anillo. Dos estados de energía nula corresponden a los estados de borde de la cadena SSH, mientras que el tercero, corresponde a un estado confinado en zonas desconectadas del anillo.

La incidencia del flujo magnético genera corrientes persistentes en el anillo y la aparición de éstas están sujetas al tipo de conexión en estudio: teniendo lugar en la fase trivial para una conexión tipo  $w$  y teniendo lugar en la fase topológica para una conexión tipo  $v$ .

El estado de energía nula en la fase trivial para una conexión cadenas-anillo tipo  $v$  está representado en la figura (3.4), donde se estudia la probabilidad de encontrar al electrón en algún sitio del sistema. En la figura podemos notar que los sitios que componen el anillo (sitio 48 al sitio 52) presentan probabilidad nula de encontrar un electrón, excepto en el sitio 49, el cuál corresponde al sitio superior del anillo, es decir, ocurre una fragmentación efectiva de él, impidiendo el flujo de electrones. Este estado es invariante ante la incidencia del flujo y la deformación

del parámetro  $\lambda$ , por lo tanto, corresponde a un nuevo estado topológico.

Este comportamiento cualitativo es reportado de igual manera para el tercer estado de energía nula de la fase topológica (distinto a los estados de borde) y conexión entre cadenas-anillo tipo  $w$ .

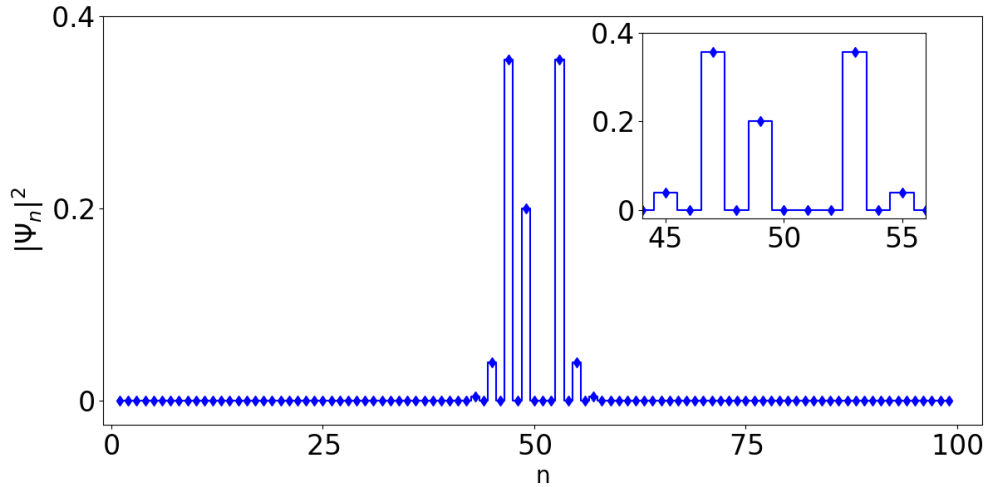


Figura 3.4: Densidad de probabilidad del estado de energía  $E = 0$  correspondiente al panel a) de la figura (3.3). El estado se localiza en las cercanías del anillo, el cuál se encuentra entre el sitio 48 al sitio 52, presentando localización no nula en el sitio superior (sitio 49), lo cuál indica una fragmentación efectiva del anillo. La gráfica interna representa un acercamiento a los sitios del anillo y sus vecinos.

### 3.3. Medidas de entrelazamiento

En mecánica cuántica uno puede distinguir entre estados *puros* y estados *mezclas*, los cuales ocurren por ejemplo, a temperatura  $T=0$  cuando el sistema está totalmente desacoplado del resto del universo y a temperatura  $T>0$  cuando el sistema está en equilibrio termodinámico con el resto del universo, respectivamente. Un estado puro puede ser descrito por una función de onda  $|\Psi\rangle$  en la formulación

usual de la mecánica cuántica, mientras que un estado mezcla no. Ambos tipos de estados son tratados con iguales condiciones en la formulación de matriz densidad de mecánica cuántica, en la cual, el estado de un sistema es descrito por una matriz densidad  $\rho_0$ . En esta formulación, el valor de expectación de un operador A en un estado descrito por  $\rho_0$  está dado por

$$\langle A \rangle = Tr(\rho_0 A). \quad (3.5)$$

Si el estado descrito es puro, es decir, dado en la formulación usual por la función de onda  $|\Psi\rangle$ , entonces  $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ , entonces es claro que  $\rho_0 = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ .

Estamos interesados en un subsistema finito de B sitios (*bloque*) integrado en un sistema más grande de N sitios. El sistema menos el *bloque* es llamado el ambiente. Si el sistema general se sabe que está en un estado puro  $|\Psi\rangle$ , entonces en general, el estado mecánico-cuántico del *bloque* no puede ser descrito por una función de onda en estado puro. En lugar de eso, el estado mezcla del *bloque* debe ser descrito por una matriz densidad bloque  $\rho_B$ , entonces definimos que

$$\langle A \rangle = Tr(\rho_B A), \quad (3.6)$$

si el operador A actúa enteramente con el *bloque*.

Una forma para relacionar la matriz densidad bloque  $\rho_B$  con la matriz densidad  $\rho_0$  del sistema entero es usando la ecuación (3.5) y (3.6) y los subíndices B y E para trazar sobre los grados de libertad asociados con el bloque y su ambiente respectivamente, más explícitamente, podemos reescribir la ecuación (3.5) como

$$\langle A \rangle = Tr(\rho_0 A) = Tr_{B,E}(\rho_0 A). \quad (3.7)$$

Ya que A no actúa sobre el ambiente, podemos trivialmente trazar sobre los grados de libertad del ambiente para obtener

$$\langle A \rangle = Tr_B[\{Tr_E(\rho_0)\}A]. \quad (3.8)$$

Comparando con la ecuación (3.6), encontramos un valor de expectación consistente para A si se toma sobre todo el sistema o solo sobre el bloque, si la matriz de densidad de bloques se define como

$$\rho_B = Tr_E(\rho_0). \quad (3.9)$$

**Construcción matriz  $\rho_B$ :** Usamos la técnica propuesta por Cheong y Henley[30], la cuál describe la construcción de la matriz de densidad reducida de un bloque particular dentro de un sistema más grande de fermiones no-interactuantes.

- Primero debemos diagonalizar el hamiltoniano que describe el sistema, el cuál está descrito por las ecuaciones (3.2-3.4).
- Se construye el estado fundamental asumiendo que es cercano al mar de Fermi (medio llenado), el que es descrito por,

$$|\psi_F\rangle = \prod_{\ell=1}^{\lfloor N_{Total}/2 \rfloor} f_{\ell}^{\dagger} |0\rangle, \quad (3.10)$$

donde  $\lfloor N_{Total}/2 \rfloor$  corresponde a la función parte entera inferior,  $f_{\ell}^{\dagger}$  es el operador de creación de un electrón en el autoestado  $\ell$  del Hamiltoniano del sistema y  $|0\rangle$  el vacío.

- Se calculan los elementos de correlación  $G_{IJ} = \langle c_I^{\dagger} c_J \rangle$  (ver apéndice C):

$G_{IJ} = \langle c_I^{\dagger} c_J \rangle = \langle \psi_F | c_I^{\dagger} c_J | \psi_F \rangle$ , con  $I = \alpha i$ ,  $J = \beta j$ , donde  $\alpha$  y  $\beta$  denotan tipo de enlace entre sitios ( $v, w$  o  $t_R$ ) y las letras ( $i$  y  $j$ ) la posición de un sitio particular del sistema.

$$\mathcal{G} = \begin{bmatrix} G_{\bar{1}1} & \cdots & G_{\bar{1}B} & G_{\bar{1}B+1} & \cdots & G_{\bar{1}N} \\ G_{\bar{2}1} & \cdots & G_{\bar{2}B} & G_{\bar{2}B+1} & \cdots & G_{\bar{2}N} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{\bar{B}1} & \cdots & G_{\bar{B}B} & G_{\bar{B}B+1} & \cdots & G_{\bar{B}N} \\ G_{\bar{B+1}1} & \cdots & G_{\bar{B+1}B} & G_{\bar{B+1}B+1} & \cdots & G_{\bar{B+1}N} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{\bar{N}1} & \cdots & G_{\bar{N}B} & G_{\bar{N}B+1} & \cdots & G_{\bar{N}N} \end{bmatrix} \Rightarrow G = \begin{bmatrix} G_{\bar{1}1} & G_{\bar{1}2} & \cdots & G_{\bar{1}B} \\ G_{\bar{2}1} & G_{\bar{2}2} & \cdots & G_{\bar{2}B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{\bar{B}1} & G_{\bar{B}2} & \cdots & G_{\bar{B}B} \end{bmatrix}$$

Figura 3.5: Matriz Función de Green generada por los elementos de correlación  $G_{IJ}$  (izquierda), matriz  $G$  que representa un bloque particular del sistema (derecha).

- Se construye la matriz Función de Green  $\mathcal{G}$  a partir de los elementos de correlación  $G_{IJ}$  y se elige un bloque  $G$ .
- Finalmente podemos calcular la matriz de densidad reducida de un subsistema  $B$  de  $m$  sitios (Bloque  $G$ ), la cual se obtiene mediante

$$\rho_B = \det(\mathbb{I} - G) \exp \left\{ \sum_{IJ} [\log G(\mathbb{I} - G)^{-1}]_{IJ} c_I^\dagger c_J \right\}. \quad (3.11)$$

La que puede ser escrita en la base que diagonaliza a la matriz  $G$  como

$$\rho_B = \det(\mathbb{I} - G) \prod_l^m \left[ \mathbb{I} + (e^{-\varepsilon_l} - 1) f_l^\dagger f_l \right], \quad (3.12)$$

donde  $f_l^\dagger$  crea un electrón en el  $l$ -ésimo autoestado de la matriz  $G$  y  $\varepsilon_l$  corresponden a las *pseudoenergías* obtenidas de la diagonalización de  $G$ .

El entrelazamiento de un sistema bipartito en un estado puro está dado por la entropía de von Neumann de uno de los subsistemas. Así, el entrelazamiento entre un subsistema  $B$  de  $m$  sitios y el resto del sistema está dado por,

$$S = -\text{Tr} \rho_B \log_2 \rho_B = - \sum_j \eta_j \log_2 \eta_j, \quad (3.13)$$

donde  $0 \leq \eta_j \leq 1$  ( $j = 1, 2, \dots, m$ ) son los autovalores de  $\rho_B$  y la entropía de entrelazamiento  $S$  toma valores en el intervalo  $[0, 2]$ .

Por otro lado, si queremos evaluar el entrelazamiento entre solo dos sitios del sistema, dejando fuera el resto, la manera de cuantificarlo es a través de la concurrencia [18–20]. En este caso tendremos dos qubits, donde la base de cada uno de ellos es formada por los autoestados de los números de ocupación,  $|0_i\rangle$  y  $|1_i\rangle$ ,  $i = 1, 2$ .

Se construye la matriz de densidad reducida de dos sitios  $\rho_B$  y se evalúa el operador  $\tilde{\rho}_B$  definido como

$$\tilde{\rho}_B = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho_B^* (\sigma_y \otimes \sigma_y). \quad (3.14)$$

donde  $*$  denota el complejo conjugado y  $\sigma_y$  es la matriz de Pauli.

La concurrencia  $C$  está dada por,

$$C = \text{máx} \{0, \sqrt{\eta_1} - \sqrt{\eta_2} - \sqrt{\eta_3} - \sqrt{\eta_4}\}, \quad (3.15)$$

donde  $\eta_1, \eta_2, \eta_3$  y  $\eta_4$  son los autovalores en orden decreciente de la matriz  $R = \rho_B \tilde{\rho}_B$  y  $C$  toma valores en el intervalo  $0 \leq C \leq 1$ .

### 3.3.1. Cadena SSH

J. Cho y K.W. Kim determinaron de manera analítica el espectro de entrelazamiento de dos sitios (concurrencia) para el modelo SSH [28]. El estudio lo hicieron estableciendo condiciones de borde periódicas (cadena cerrada) y calculando el entrelazamiento entre cualquier par de sitios del sistema en función del parámetro de deformación  $\lambda$ . Algunos de los resultados importantes reportados en ese estudio son:

- La concurrencia entre sitios no vecinos son nulas para todo valor de  $\lambda$ , es

decir

$$C_{A_n A_m} = C_{B_n B_m} = 0 \quad (3.16)$$

- La concurrencia entre sitios vecinos de la cadena SSH se dividen en dos grupos:  $C_1 = C_{A_n B_n}$ , la cuál determina el entrelazamiento entre los dos sitios internos de cada celda  $n$ -ésima (compuesta por un átomo tipo A y otro tipo B) y  $C_2 = C_{B_n A_{n+1}}$  determina el entrelazamiento entre el átomo tipo  $B_n$  de cada celda y el átomo  $A_{n+1}$  de la celda vecina siguiente.
- La figura (3.6) indica el comportamiento de  $C_1$  y  $C_2$  en función de  $\lambda$ :  $C_1 > C_2$  en la fase trivial del sistema ( $\lambda < 0$ ),  $C_1 < C_2$  en la fase topológica ( $\lambda > 0$ ) y  $C_1 = C_2$  para  $\lambda = 0$ , que es el punto de transición de fase donde coincide con el cierre en la brecha del espectro de energía (figura 2.3). Además, se cumple que  $C_1(\lambda) = C_2(-\lambda)$ .

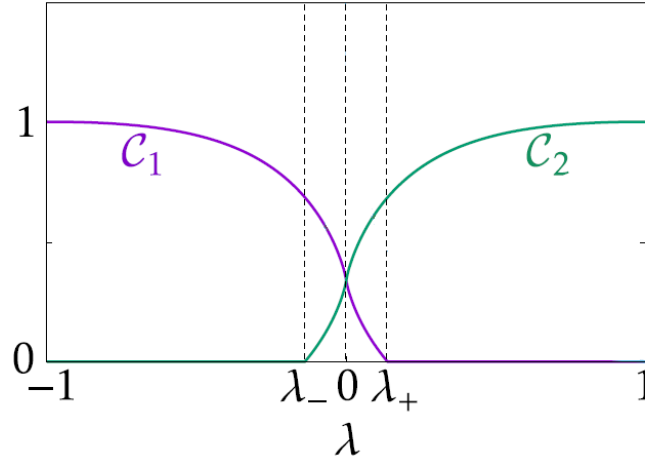


Figura 3.6: Concurrencia en cadena SSH:  $C_1 = C_{A_n B_n}$  corresponde al entrelazamiento entre los dos sitios internos de cada celda unitaria (conectados con enlace tipo  $v$ ) y  $C_2 = C_{B_n A_{n+1}}$  corresponde al entrelazamiento entre sitios vecinos  $B_n$  y  $A_{n+1}$  conectados con enlaces tipo  $w$ .

Estos resultados logran caracterizar las fases del sistema usando el espectro de entrelazamiento de  $C_1$  y  $C_2$  simultaneamente.

El estudio del modelo SSH sin condiciones de borde periódicas (cadena abierta) y usando medidas de entrelazamiento, se ve restringido debido al tiempo computacional requerido para llevar a cabo estos cálculos, por lo tanto, se estudian cadenas SSH de 20 sitios (10 celdas). Los espectros de entrelazamiento  $C_1 = C_{A_n B_n}$  y  $C_2 = C_{B_n A_{n+1}}$  concuerdan con los resultados reportados por J. Cho y K.W. Kim. Sin embargo, al estudiar el entrelazamiento entre los dos sitios extremos de la cadena  $C_{A_1 B_N}$ , se reporta un espectro de concurrencia no nulo en la fase topológica (figura 3.7, derecha), esto se debería a la aparición de los estados de borde topológicos que se localizan en los extremos de la cadena.

Otra medida que resalta este comportamiento es la entropía de entrelazamiento entre este subsistema formado por los dos sitios extremos y el resto de la cadena (figura 3.7, izquierda). Este subsistema está máximamente entrelazado con el resto en la fase trivial y, cercano al punto de transición de fase ( $\lambda \approx 0$ ) empieza a disminuir hasta anularse en el límite  $\lambda=1$ .

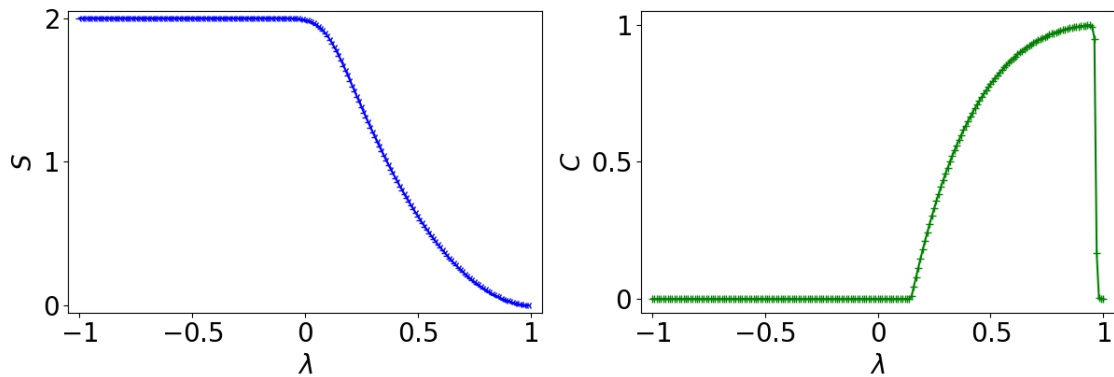


Figura 3.7: Entropía de entrelazamiento  $S$  cuyo subsistema de dos sitios está conformado por los extremos de la cadena SSH (izquierda). Concurrencia  $C_{A_1 B_N}$  entre los sitios extremos del sistema (derecha).

### 3.3.2. Sistema SSH-Anillo

El estudio del sistema SSH-Anillo, usando medidas de entrelazamiento, se ve restringido debido al tiempo computacional requerido para llevar a cabo estos cálculos, por lo tanto, se estudian modelos con tamaños  $N_{total}=19$  (17) sitios para el caso de conexión cadenas-anillo tipo  $v$  ( $w$ ).

De manera análoga al modelo SSH, se toman como referencias las siguientes medidas de entrelazamiento:

- (i) Concurrencia entre sitios intraceldas  $C_1 = C_{A_n B_n}$  y sitios interceldas  $C_2 = C_{B_n A_{n+1}}$ .
- (ii) Concurrencia entre los sitios extremos del sistema  $C_{A_1 B_{N_{total}}}$ .
- (iii) Entropía de Entrelazamiento  $S$  entre subsistema conformado por los sitios extremos del sistema y el resto.

(i) El espectro de entrelazamiento de  $C_1$  y  $C_2$  (figura 3.8 panel a y b) para el caso de conexión cadenas-anillo tipo  $v$  es cualitativamente igual que el resultado reportado para el modelo SSH, mostrando una leve dependencia del flujo magnético. Para el caso de conexión cadenas-anillo tipo  $w$  (figura 3.8 panel c y d) se reportan resultados aproximadamente similares.

Estos resultados logran caracterizar, de manera aproximada, las fases del sistema (trivial y no-trivial topológica) usando el espectro de entrelazamiento de  $C_1$  y  $C_2$  simultáneamente, independiente del tipo de conexión cadenas-anillo ( $v$  o  $w$ ).

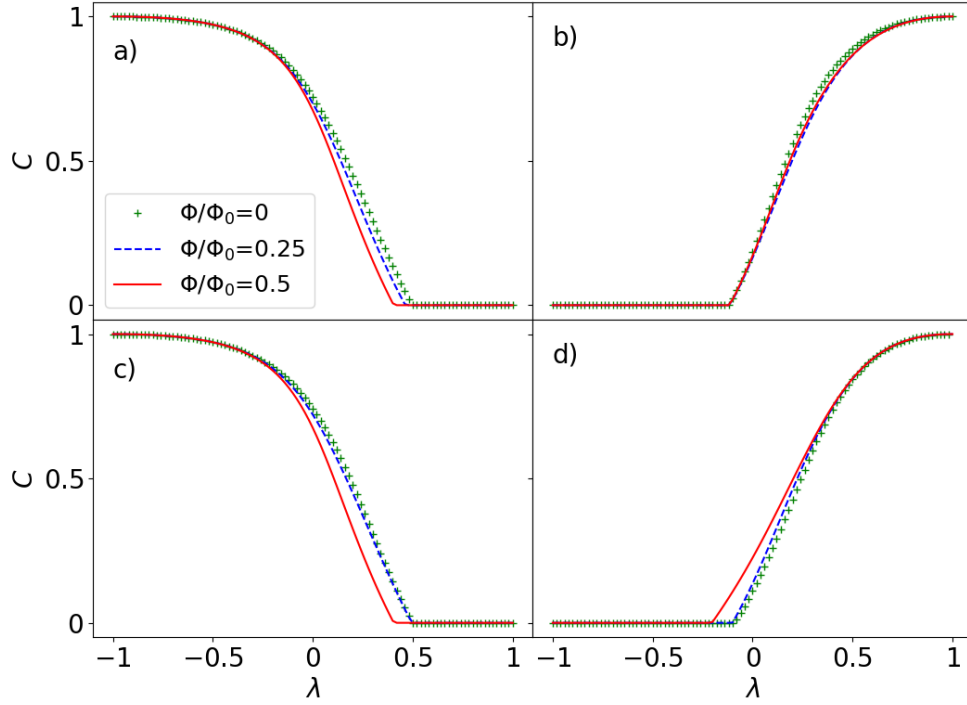


Figura 3.8: Concurrencia para sitios intraceldas (a y c) e interceldas (b y d), donde la conexión de las cadenas y el anillo es del tipo  $v$  (a y b) o del tipo  $w$  (c y d). Para cada medida se aplicaron tres flujos magnéticos  $\Phi/\Phi_0=0, 0.25, 0.5$  (verde, azul, rojo).

(ii) La Concurrencia entre los sitios extremos del sistema  $C_{A_1 B_{N_{total}}}$ , se ve afectada por el tipo de conexión cadenas-anillo ( $v$  o  $w$ ) y por el flujo magnético incidente (figura 3.9).

Conexión tipo  $v$ : En el panel a) de la figura 3.9 podemos estudiar la concurrencia en función de  $\lambda$  entre sitios extremos  $C_{A_1 B_{N_{total}}}$  para tres valores del flujo magnético incidente  $\Phi/\Phi_0=0, 0.25, 0.5$  (verde, azul, rojo). Podemos notar que el entrelazamiento es no nulo solo en la fase topológica para  $\Phi/\Phi_0=0$ , disminuye a  $C \approx 0.5$  para  $\Phi/\Phi_0=0.25$  y se anula para  $\Phi/\Phi_0=0.5$ , lo que indica que el flujo

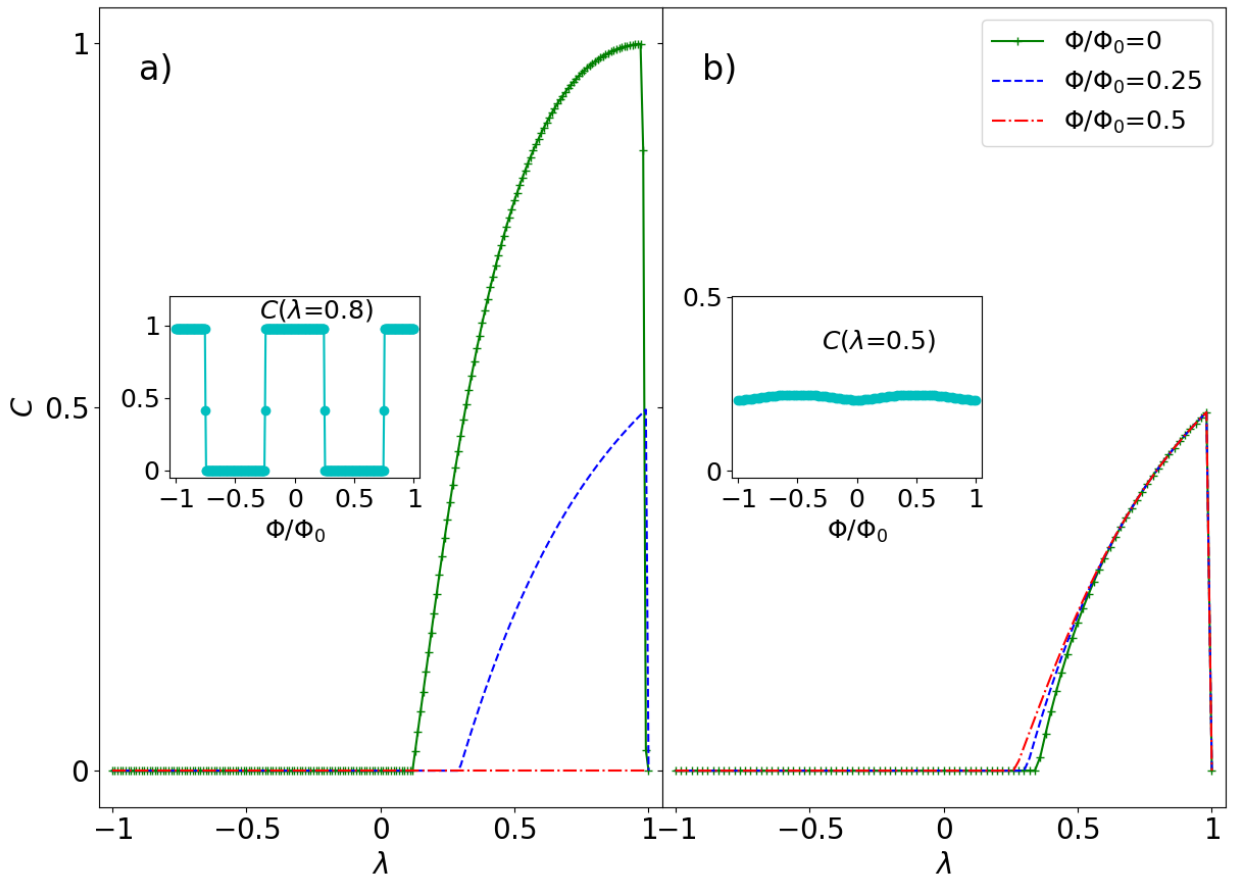


Figura 3.9: Medida de concurrencia entre sitios extremos del sistema, donde la conexión de las cadenas y el anillo es del tipo  $v$  (panel a) o del tipo  $w$  (panel b). Para cada medida de concurrencia se aplicaron tres flujos magnéticos  $\Phi/\Phi_0=0$ , 0.25, 0.5 (verde, azul, rojo) y en la gráfica interna de cada panel se estudia la concurrencia en función del flujo magnético para determinado valor de  $\lambda$ .

magnético afecta el grado de entrelazamiento entre los sitios extremos. En la gráfica interna del panel a) de la figura 3.9, se estudia la concurrencia en función del flujo en la fase topológica del sistema ( $\lambda = 0.8$ ), el espectro de concurrencia indica que es no nula para valores del flujo en el intervalo  $\Phi/\Phi_0 \in [-1,-0.75) \cup (-0.25,0.25) \cup (0.75,1]$ .

Conexión tipo  $w$ : En el panel b) de la figura 3.9 podemos estudiar la concurrencia de los sitios extremos  $C_{A_1 B_{N_{total}}}$  para tres valores del flujo magnético incidente  $\Phi/\Phi_0 = 0, 0.25, 0.5$  (verde, azul, rojo), podemos notar que el entrelazamiento es no nulo solo en la fase topológica, donde alcanza un máximo en  $C \approx 0.5$ . La gráfica interna del panel b) de la figura 3.9 estudia la concurrencia en función del flujo en la fase topológica del sistema ( $\lambda = 0.5$ ), mostrando una leve dependencia del flujo magnético incidente en el anillo.

Al comparar estos resultados con las medidas utilizadas en el modelo SSH (figura 3.7, derecha), se puede determinar que el entrelazamiento entre los sitios extremos del sistema se ve afectado tanto por la inserción del anillo como por el flujo magnético, ya que disminuye aproximadamente a la mitad para el caso de conexión tipo  $w$  y disminuyendo o anulándose para el caso de conexión tipo  $v$ .

(iii) La Entropía de entrelazamiento  $S$  entre el subsistema conformado por los dos sitios extremos del sistema y el resto se estudia en la figura 3.10, donde el panel a) indica el caso de conexión cadenas-anillo tipo  $v$  y el panel b) indica el caso de conexión tipo  $w$ . Para cada caso se usaron tres valores del flujo magnético  $\Phi/\Phi_0=0, 0.25, 0.5$  (verde, azul, rojo).

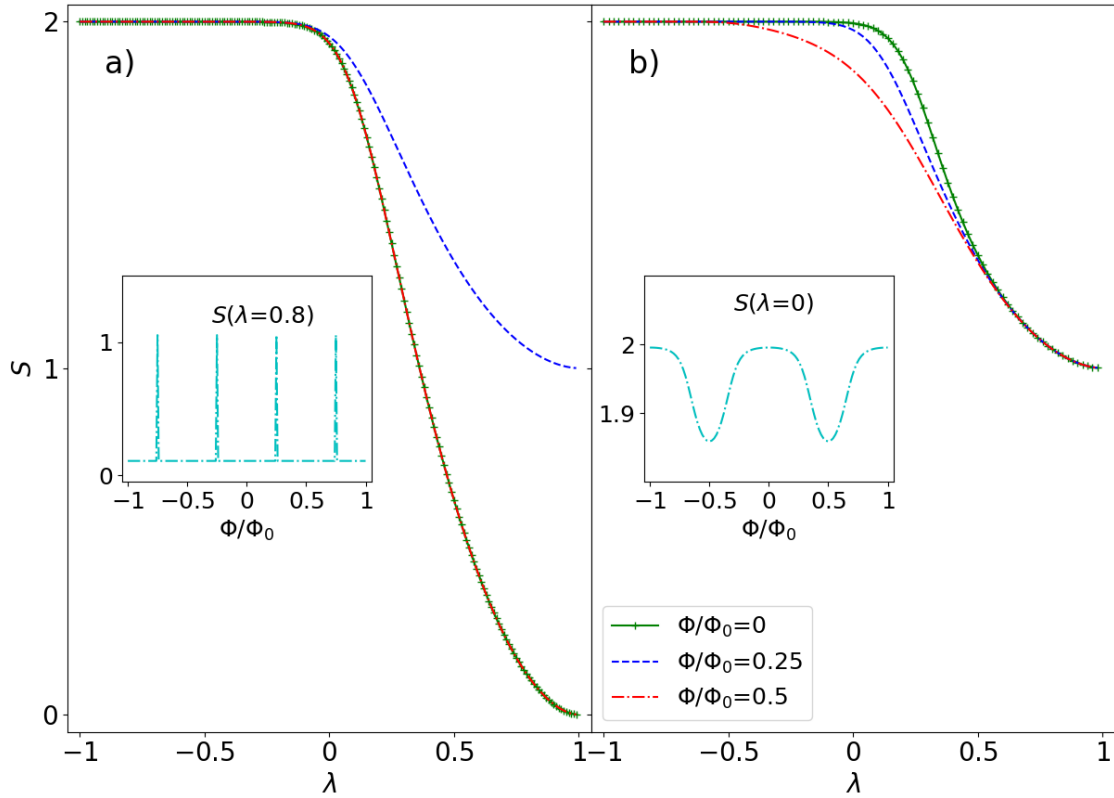


Figura 3.10: Entropía de entrelazamiento  $S$  entre sitios extremos de las cadenas (subsistema de dos sitios) y el resto, donde la conexión es de tipo  $v$  (panel a) y tipo  $w$  (panel b). Para cada medida de  $S$  se aplicaron tres flujos magnéticos  $\Phi/\Phi_0=0, 0.25, 0.5$  (verde, azul, rojo), en la gráfica interna de cada panel se estudia la entropía de entrelazamiento en función del flujo magnético para determinado valor de  $\lambda$ .

Conexión tipo  $v$ : El subsistema (sitios extremos del sistema) está máximamente entrelazados con el resto en la fase trivial ( $\lambda < 0$ ) independiente del flujo y, cercano

al punto de transición de fase ( $\lambda \approx 0$ ), empieza a disminuir hasta anularse en el límite  $\lambda=1$ , excepto para valores del flujo que cumplan con  $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{2l-1}{4}, l \in \mathbb{Z}$ , donde el entrelazamiento es no nulo. La gráfica interna del panel a) estudia la Entropía de entrelazamiento en función del flujo en la fase topológica ( $\lambda=0.8$ ), donde se reportan unos "picos" de entrelazamiento para los valores específicos del flujo descritos anteriormente.

Conexión tipo  $w$ : El subsistema (sitios extremos del sistema) presenta un mayor entrelazamiento con el resto en la fase trivial ( $\lambda < 0$ ) y disminuye hasta  $S \approx 1$  en el límite  $\lambda=1$  de la fase topológica. El flujo magnético disminuye el grado de entrelazamiento para este caso, tomando su mínimo valor para  $\Phi/\Phi_0 = \pm 0.5$  como se puede apreciar en la gráfica interna del panel b) de la figura 3.10, donde se estudia la Entropía de entrelazamiento  $S$  en función del flujo magnético en la fase topológica ( $\lambda=0.5$ ).

Estos "picos" de entrelazamiento (panel (a), figura 3.10) se hacen más agudos

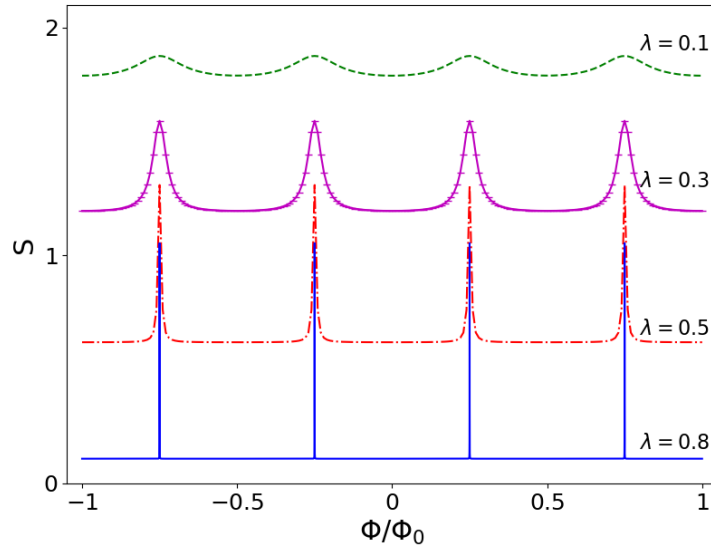


Figura 3.11: Entropía de entrelazamiento  $S$  en función del flujo magnético para distintos valores del parámetro  $\lambda=0.1, 0.3, 0.5, 0.8$  (verde, magenta, rojo, azul). La conexión cadenas-anillo es de tipo  $v$ .

a medida que nos acercamos al límite topológico ( $\lambda=1$ ), por el contrario, si nos acercamos al punto de transición de fase ( $\lambda=0$ ), la Entropía de entrelazamiento aumenta y estos "picos "desaparecen, tal como lo muestra la figura 3.11.

# Capítulo 4

## Conclusión

### 4.1. Conclusiones

- 1.1) El modelo SSH presenta dos fases, la trivial ( $\lambda < 0$ ) y la topológica ( $\lambda > 0$ ), la transición entre fases está caracterizada por un cierre en la brecha de energía en  $\lambda=0$ . En la fase topológica aparecen dos estados de borde, los cuales son robustos ante la deformación del parametro  $\lambda$ . La concurrencia entre sitios logra caracterizar la transición entre fases, mostrando que para la fase trivial  $C_1 > C_2$ , mientras que en la fase topológica  $C_1 < C_2$ , donde  $C_1$  y  $C_2$  corresponden al entrelazamiento entre sitios intracelda ( $C_{A_n B_n}$ ) e intercelda ( $C_{B_n A_{n+1}}$ ) respectivamente.

1.2) La concurrencia entre los sitios extremos de la cadena es nula en la fase trivial mientras que en la fase topológica es distinta de cero, indicando que en la fase topológica estos dos sitios extremos se encuentran máximamente entrelazados ( $C_{A_1 B_N} \approx 1$ ), anulandose en el límite de dimerización  $\lambda=1$  ( $C_{A_1 B_N} \approx 0$ ), donde estos dos sitios se desconectan completamente de la cadena al quedar desapareados en cada extremo de ella.

1.3) Otra medida que resalta este comportamiento es la entropía de entrelazamiento de este subsistema (formado por los dos sitios extremos) y el resto. Los bordes de las cadenas están máximamente entrelazados con el resto del sistema en la fase trivial y cercano al punto de transición de fase ( $\lambda \approx 0$ ), empieza a disminuir  $S$  hasta anularse en el límite de dimerización ( $\lambda=1$ ). Esta medida caracteriza la transición de fase del sistema.

Estos resultados indican que los dos estados de bordes topológicos están altamente entrelazados entre ellos en la fase topológica del sistema, mientras que están altamente entrelazados con el resto de la cadena en la fase trivial.

- 2.1) La inserción del anillo preserva las fases del sistema (trivial y topológica), además los estados de borde permanecen invariantes en la fase topológica a medida que deformamos el parámetro  $\lambda$  o variamos el flujo magnético incidente en el anillo.

2.2) El anillo soporta corrientes persistentes no nulas y la aparición de ésta en la fase trivial o topológica depende del tipo de conexión entre las cadenas y el anillo. Además, se reporta un nuevo estado topológico de energía nula, este se localiza en las cercanías del anillo y en el sitio superior de él.

- 3.1) La medida de entrelazamiento entre dos sitios (conurrencia) para sitios intraceldas e interceldas logra caracterizar la transición de fase del sistema ( $C_1 > C_2$  fase trivial,  $C_2 > C_1$  fase topológica) y tienen una leve dependencia del flujo magnético incidente en el anillo.

3.2) La concurrencia entre los sitios extremos del sistema se ve afectada por la presencia del anillo y del flujo magnético. Este resultado sugiere que los estados de borde se ven afectados y disminuyen su grado de entrelazamiento según el flujo magnético y según el tipo de conexión cadenas-anillo ( $v$  o  $w$ ).

3.3) Otra medida que resalta este comportamiento es la entropía de entrelazamiento de este subsistema (formado por los dos sitios extremos de las

cadenas) y el resto. Conexión tipo  $v$ : Este subsistema está máximamente entrelazado con el resto en la fase trivial y cercano al punto de transición de fase ( $\lambda \approx 0$ ) empieza a disminuir hasta anularse en el límite de dimerización ( $\lambda=1$ ), excepto para valores del flujo  $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \frac{2l-1}{4}, l \in Z$ , donde aparece un "pico" de entrelazamiento en  $S \approx 1$ , el cual se vuelve más agudo a medida que nos adentramos en la zona topológica. Conexión tipo  $w$ : Este subsistema está máximamente entrelazado con el resto en la fase trivial y cercano al punto de transición de fase ( $\lambda \approx 0$ ) empieza a disminuir hasta llegar a  $S \approx 1$ , la incidencia del flujo magnético disminuye el grado de entrelazamiento para valores del flujo  $\frac{\Phi}{\Phi_0} = \pm 0.5$ .

## 4.2. Trabajo futuro

La presente investigación deja algunos problemas abiertos a considerar, tales como:

- Calcular la entropía de entrelazamiento tomando otros subsistemas no estudiados en esta tesis, como por ejemplo, el anillo central del sistema. La aparición de corrientes persistentes podría ser caracterizada con el espectro de entrelazamiento.
- Estudiar sistemas para anillos con cantidad variable de sitios, usando medidas de entrelazamiento: Los espectros de energía para sistemas de anillos con cantidad PAR de sitios reportan nuevas excitaciones fermiónicas de energía cero distintas a las descritas en esta tesis, por lo tanto, estudiar estos resultados con las medidas de entrelazamiento utilizadas en este trabajo sería un problema interesante a considerar.

# Apéndice A

## Hamiltoniano de Enlace Fuerte

### A.1. Preliminar: Operadores fermiónicos de segunda cuantización

La segunda cuantización se basa en el uso de operadores fermiónicos de creación y de destrucción. El operador de creación  $c_{i\alpha}^\dagger$  crea un fermión en el sitio  $i$  con espín  $\alpha$  y su adjunto, el operador de aniquilación  $c_{i\alpha}$ , destruye un fermión en el sitio  $i$  con espín  $\alpha$ . Si tomamos en cuenta un sistema con fermiones sin espín, entonces podemos omitir el índice  $\alpha$  y estos operadores fermiónicos cumplen con las siguientes reglas de anticonmutación:

$$\{c_i^\dagger, c_j\} = c_i^\dagger c_j + c_j c_i^\dagger = \delta_{ij} \quad (\text{A.1})$$

$$\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger = 0 \quad (\text{A.2})$$

$$\{c_i, c_j\} = c_i c_j + c_j c_i = 0 \quad (\text{A.3})$$

donde  $\delta_{ij}$  corresponde a la delta de *kroncker*.

Esta representación ayuda a pensar de una manera más intuitiva y menos matemática. Por ejemplo, si aplicamos operador de creación y aniquilación en un

cadena con  $n$  sitios. Debido al principio de exclusión de Pauli, no podemos crear un fermión en el sitio 1 si ya hay uno ahí, por lo tanto, si aplicamos un operador de creación el resultado será el vector nulo  $c_1^\dagger|1\rangle = 0$ . Si aplicamos un operador de aniquilación sobre el vacío ( $|0\rangle$ ) el resultado será también el vector nulo  $c_i|0\rangle = 0$ , debido a que no hay un fermión que destruir en el vacío.

## A.2. Descripción general de Hamiltoniano de Enlace Fuerte

Permite modelar la estructura de bandas de sistemas de fermiones no interactuantes, ya que permite capturar la estructura de red de sistemas cristalinos, admite restricciones de simetrías, grados de libertad internos, campos externos, etc. La descripción general de un Hamiltoniano de enlace fuerte tiene la forma

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger H_{ij}^{\alpha\beta} c_{j\beta}, \quad (\text{A.4})$$

donde  $i, j$  corresponde a los sitios de la red cristalina,  $\alpha$  y  $\beta$  representan los grados de libertad interno correspondiente a los distintos sitios de la red (espín, orbitales, etc), el operador de segunda cuantización  $c_{i\alpha}^\dagger$  ( $c_{i\alpha}$ ) crea (destruye) partículas en el sitio  $i$  con grados de libertad internos  $\alpha$  y los coeficientes  $H_{ij}^{\alpha\beta}$  capturan las propiedades físicas del sistema.

Los materiales en estado sólido, tales como un arreglo de átomos en una cadena, en una superficie bidimensional o en un cuerpo tridimensional, tienen un contorno o borde y un contenido, este último se denomina comúnmente como *bulk*. Por encontrarse muy lejos de los bordes, al ser la parte más central del cristal en el límite termodinámico, las propiedades del bulk son insensibles a las características de los mismos, y por este motivo pueden ser calculadas de manera más sencilla si se identifican los contornos opuestos del sólido (condiciones de borde de Born-

von Karman). El Hamiltoniano del sistema pasa a ser invariante ante traslaciones entre puntos de la red cristalina bajo este tipo de condiciones de contorno, lo que conlleva a la conservación del momento cristalino  $k$ . Por lo tanto, es posible calcular de manera más sencilla los autoestados  $\psi_{n,k}$  y los niveles de energía  $E_n(k)$  del bulk, donde con  $k$  se especifica la dependencia de la energía de la banda  $n$  respecto del momento cristalino [1]. Tras determinar la relación de dispersión del modelo, es posible saber si el sistema se comporta como aislante, semiconductor o metal.

Al requerir que el sistema sea invariante ante traslaciones se admite una transformada de Fourier sobre los operadores, después de la cual el Hamiltoniano puede escribirse como

$$\mathcal{H} = \sum_{k\alpha\beta} c_{k\alpha}^\dagger H_{Bloch}^{\alpha\beta}(k) c_{k\beta}, \quad (\text{A.5})$$

donde  $H_{Bloch}^{\alpha\beta}(k)$  es un elemento del Hamiltoniano de Bloch. La cantidad  $k$  se conoce como momentum del cristal y toma valores en la primera zona de Brillouin (ZB). Para sistemas unidimensionales, y suponiendo que la separación entre sitios vecinos de la red cristalina es  $a = 1$ , la ZB se reduce al intervalo  $[-\pi, \pi]$ . La noción de Hamiltoniano del *bulk* del sistema se utiliza frecuentemente, en el sentido de que esta descripción captura la física del sistema sin considerar los bordes.

Otra de las ventajas de la descripción de enlace fuerte, es que puede ser implementada numéricamente de manera directa. Suponiendo que en el espacio de Hilbert bajo consideración existe un conjunto de estados,  $|i\rangle$ , que cumpla con la condición de ortonormalidad  $\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{I}$  y con producto interno  $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ . Cualquier operador  $\hat{O}$  en el espacio de Hilbert en consideración puede escribirse como

$$\hat{O} = \sum_i |i\rangle\langle i| \hat{O} \sum_j |j\rangle\langle j| = \sum_{ij} O_{ij} |i\rangle\langle j|, \quad (\text{A.6})$$

donde  $O_{ij} = \langle i|\hat{O}|j\rangle \in \mathbb{C}$  es un elemento de la matriz  $O$ , la cual es una repre-

sentación del operador abstracto  $\hat{O}$  en la base considerada. Este proceso también puede llevarse a cabo sobre los vectores estado,

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle, \quad (\text{A.7})$$

donde  $\psi_i = \langle i|\psi\rangle \in \mathbb{C}$  corresponden a los coeficientes del vector  $\vec{\psi}$  que representa al estado  $|\psi\rangle$  en la base dada. Con lo anterior, las entidades  $\hat{O}$  y  $|\psi\rangle$  son reemplazadas por la matriz  $O$  y el vector  $\vec{\psi}$ , los cuales son arreglos de números complejos que pueden ser implementados numericamente. Considerando, como ejemplo, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ . Con las representaciones en (A.6) y (A.7) esta ecuación toma la forma

$$\left[ \sum_{ij} H_{ij} |i\rangle\langle j| \right] \left[ \sum_k \psi_k |k\rangle \right] = E \sum_i \psi_i |i\rangle, \quad (\text{A.8})$$

$$\sum_{ij} H_{ij} \psi_j |i\rangle = E \sum_i \psi_i |i\rangle, \quad (\text{A.9})$$

multiplicando por  $\langle k|$  por la izquierda y utilizando la condición de ortonormalidad de la base  $\sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{I}$ , se obtiene

$$\sum_j H_{kj} \psi_j = E \psi_k, \quad (\text{A.10})$$

que es equivalente a escribir finalmente

$$H \vec{\psi} = E \vec{\psi}, \quad (\text{A.11})$$

lo cual corresponde a resolver una ecuación de autovalores para la matriz  $H$ . Al resolver esta ecuación se obtienen las autoenergías  $E_n$  y, asociado a cada una de estas energías, se tiene un autovector  $\vec{\psi}_n$  cuyas componentes son idénticas a los coeficientes  $\psi_i$  en la expansión (A.7).

# Apéndice B

## Cálculo de corrientes persistentes

Por definición,

$$\dot{n}_l = -\frac{i}{\hbar} [n_l, \mathcal{H}_R]. \quad (\text{B.1})$$

Usando el Hamiltoniano definido en (3.3),

$$\mathcal{H}_R = \sum_{l=1}^{N_R} t_R e^{i\varphi} c_l^\dagger c_{l+1} + \text{h.c.}, \quad (\text{B.2})$$

reemplazando (B.2) en (B.1) obtenemos,

$$\dot{n}_l = -\frac{it_R}{\hbar} \left( e^{i\varphi} c_l^\dagger c_{l+1} - e^{-i\varphi} c_{l+1}^\dagger c_l - e^{i\varphi} c_{l-1}^\dagger c_l + e^{-i\varphi} c_l^\dagger c_{l-1} \right). \quad (\text{B.3})$$

La ecuación de continuidad está dada por

$$\dot{n}_l = j_{l-1} - j_l, \quad (\text{B.4})$$

donde  $j$  es el operador de corriente de partícula por sitio. Esta ecuación es satisfecha si

$$j_l = -\frac{it_R}{\hbar} \left( e^{i\varphi} c_l^\dagger c_{l+1} - e^{-i\varphi} c_{l+1}^\dagger c_l \right) \quad (\text{B.5})$$

Luego tenemos para la corriente total de partículas,

$$J = \frac{1}{N_R} \sum_{l=1}^{N_R} j_l = -\frac{it_R}{\hbar N_R} \left( e^{i\varphi} c_l^\dagger c_{l+1} - e^{-i\varphi} c_{l+1}^\dagger c_l \right) \quad (\text{B.6})$$

Para la corriente eléctrica tenemos que  $J_e = -eJ$ , lo que implica

$$J_e = -\frac{\partial \mathcal{H}_R}{\partial \Phi}. \quad (\text{B.7})$$

En el caso estacionario podemos escribir

$$I = -\frac{\partial E}{\partial \Phi}. \quad (\text{B.8})$$

# Apéndice C

## Cálculo de correlaciones $\langle c_I^\dagger c_J \rangle$

Consideremos un sistema de 4 sitios cuyos estados se pueden representar con los operadores fermiónicos de creación  $c_i^\dagger$  actuando sobre el vacío  $|\rangle$

$$\begin{aligned} |1100\rangle &= c_2^\dagger c_1^\dagger |\rangle \\ |1001\rangle &= c_4^\dagger c_1^\dagger |\rangle \\ |0110\rangle &= c_3^\dagger c_2^\dagger |\rangle \end{aligned} \tag{C.1}$$

Supongamos que el operador densidad es:

$$\begin{aligned} \rho_0 &= A|1100\rangle\langle 1100| + B|0110\rangle\langle 1100| + B^*|1100\rangle\langle 0110| \\ &+ D|0011\rangle\langle 0011| + E|0011\rangle\langle 1001| + E^*|1001\rangle\langle 0011|. \end{aligned} \tag{C.2}$$

■ 1° Forma:  $\langle c_1^\dagger c_3 \rangle = Tr(c_1^\dagger c_3 \rho_0)$

$$\begin{aligned} c_1^\dagger c_3 \rho_0 &= c_1^\dagger c_3 \{ A|1100\rangle\langle 1100| + B|0110\rangle\langle 1100| + B^*|1100\rangle\langle 0110| \\ &+ D|0011\rangle\langle 0011| + E|0011\rangle\langle 1001| + E^*|1001\rangle\langle 0011| \} \\ c_1^\dagger c_3 \rho_0 &= Bc_1^\dagger c_2^\dagger |\rangle \langle c_1 c_2 - Dc_1^\dagger c_4^\dagger |\rangle \langle c_3 c_4 - Ec_1^\dagger c_4^\dagger |\rangle \langle c_1 c_4 \\ c_1^\dagger c_3 \rho_0 &= -Bc_2^\dagger c_1^\dagger |\rangle \langle c_1 c_2 + Dc_4^\dagger c_1^\dagger |\rangle \langle c_3 c_4 + Ec_4^\dagger c_1^\dagger |\rangle \langle c_1 c_4 \\ c_1^\dagger c_3 \rho_0 &= -B|1100\rangle\langle 1100| + D|1001\rangle\langle 0011| + E|1001\rangle\langle 1001| \\ \therefore \langle c_1^\dagger c_3 \rangle &= Tr(c_1^\dagger c_3 \rho_0) = E - B. \end{aligned} \tag{C.3}$$

- 2° Forma: Usando la matriz de densidad reducida a partir de (C.2).

Nos interesa eliminar los grados de libertad del baño, en este caso, los sitios 2 y 4, y obtener la matriz reducida  $\rho_{1,3}$  asociada al bloque formado por los sitios 1 y 3.

La matriz reducida de manera estandar se define como

$$Tr_{baño}(\rho_0) = \rho_{bloque} \quad (C.4)$$

En general, la operación

$$[Tr_{baño}(\rho_0)]_{i,j \in bloque} = \sum_{l \in baño} \rho_{il,jl} \quad (C.5)$$

En el caso de que P sea un operador que actua sobre el bloque, es necesario que se cumpla la identidad,

$$Tr(P\rho_0) = Tr_{bloque}(P\rho_{bloque}) \quad (C.6)$$

Para que se cumpla (C.6), en el caso de los fermiones, es necesario mantener consistencia usando la convención que asocia los estados de ocupación y los operadores de creación y destrucción.

En resumen, para calcular la matriz de densidad reducida, seguiremos los siguientes pasos:

- 1) Reescribimos la matriz  $\rho_0$  en términos de los operadores de creación y destrucción  $c_i^\dagger$  y  $c_i$ . Por ejemplo, el término

$$|0110\rangle\langle 1100| = c_3^\dagger c_2^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_2 \quad (C.7)$$

- 2) Los operadores que operan sobre el baño son reordenados via transposición. Si son de creación, se los reagrupan en el extremo izquierdo de la secuencia, si son de destrucción se los reagrupa en el extremo derecho y se

multiplica el término respectivo por  $(-1)^p$ , donde  $p$  es el número de permutaciones totales de los operadores de creación y destrucción del baño. Por ejemplo, el término

$$|0110\rangle\langle 1100| = c_3^\dagger c_2^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_2 = -c_2^\dagger c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_2 \quad (\text{C.8})$$

Además, cada operador  $c_i^\dagger$  del baño y del respectivo operador de destrucción  $c_i$  deben estar en las mismas posiciones relativas (la posición de los operadores de creación es en orden creciente de derecha a izquierda y la posición de los operadores de destrucción de izquierda a derecha).

$$c_n^\dagger \dots c_{i_2}^\dagger c_{i_1}^\dagger | \rangle \langle | c_{j_1} c_{j_2} \dots c_{j_n} \quad (\text{C.9})$$

3.1) Se simplifican los operadores del baño que aparecen en  $\rho_0$ , el de creación con el de destrucción asociado.

$$\text{Ejemplo : } -c_2^\dagger c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_2 = -c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 \quad (\text{C.10})$$

3.2) Los términos donde aparezcan los operadores de creación(destrucción) pero no aparezcan su respectivo operador de destrucción(creación) son descartados, es decir

$$c_4^\dagger c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3 c_2 = 0 \quad (\text{C.11})$$

donde los índices 4 y 2 forman el baño del sistema.

Aplicando estos pasos a nuestro operador densidad  $\rho_0$

$$\begin{aligned} \rho_0 = & A|1100\rangle\langle 1100| + B|0110\rangle\langle 1100| + B^*|1100\rangle\langle 0110| + \\ & D|0011\rangle\langle 0011| + E|0011\rangle\langle 1001| + E^*|1001\rangle\langle 0011|. \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

■ Paso 1):

$$\begin{aligned}\rho_0 = & Ac_2^\dagger c_1^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_2 + Bc_3^\dagger c_2^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_2 + B^* c_2^\dagger c_1^\dagger | \rangle \langle | c_2 c_3 + \\ & Dc_4^\dagger c_3^\dagger | \rangle \langle | c_3 c_4 + Ec_4^\dagger c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_4 + E^* c_4^\dagger c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3 c_4\end{aligned}\quad (C.13)$$

■ Paso 2):

$$\begin{aligned}\rho_0 = & Ac_2^\dagger c_1^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_2 - Bc_2^\dagger c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_2 - B^* c_2^\dagger c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3 c_2 + \\ & Dc_4^\dagger c_3^\dagger | \rangle \langle | c_3 c_4 + Ec_4^\dagger c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 c_4 + E^* c_4^\dagger c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3 c_4\end{aligned}\quad (C.14)$$

■ Paso 3):

$$\begin{aligned}\rho_0 = & Ac_1^\dagger | \rangle \langle | c_1 - Bc_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 - B^* c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3 + \\ & Dc_3^\dagger | \rangle \langle | c_3 + Ec_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 + E^* c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3\end{aligned}\quad (C.15)$$

$$\begin{aligned}\therefore \rho_{1,3} = Tr_{2,4}(\rho_0) = & Ac_1^\dagger | \rangle \langle | c_1 - Bc_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 - B^* c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3 + \\ & Dc_3^\dagger | \rangle \langle | c_3 + Ec_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 + E^* c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3\end{aligned}\quad (C.16)$$

$$\begin{aligned}\therefore \rho_{1,3} = & A|10\rangle\langle 10| - B|01\rangle\langle 10| - B^*|10\rangle\langle 01| + \\ & D|01\rangle\langle 01| + E|01\rangle\langle 10| + E^*|10\rangle\langle 01|\end{aligned}\quad (C.17)$$

$$\therefore \rho_{1,3} = A|10\rangle\langle 10| + (E - B)|01\rangle\langle 10| + (E^* - B^*)|10\rangle\langle 01| + D|01\rangle\langle 01| \quad (C.18)$$

Usando la matriz  $\rho_{1,3}$  para calcular la correlación  $\langle c_1^\dagger c_3 \rangle$  obtenemos,

$$\langle c_1^\dagger c_3 \rangle = Tr_{1,3}(c_1^\dagger c_3 \rho_{1,3}) \quad (C.19)$$

Entonces,

$$c_1^\dagger c_3 \rho_{1,3} = c_1^\dagger c_3 \{ A c_1^\dagger | \rangle \langle | c_1 - B c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 - B^* c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3 + D c_3^\dagger | \rangle \langle | c_3 + E c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 + E^* c_1^\dagger | \rangle \langle | c_3 \rangle \}$$

$$c_1^\dagger c_3 \rho_{1,3} = (E - B) c_3^\dagger | \rangle \langle | c_1 + D c_3^\dagger | \rangle \langle | c_3 \rangle \tag{C.20}$$

$$c_1^\dagger c_3 \rho_{1,3} = (E - B) |10\rangle \langle 10| + D |10\rangle \langle 01| \tag{C.21}$$

calculando la traza obtenemos,

$$Tr_{1,3}(c_1^\dagger c_3 \rho_{1,3}) = E - B \tag{C.22}$$

donde se comprueba la identidad (C.6),

$$Tr_{1,3}(c_1^\dagger c_3 \rho_{1,3}) = Tr(c_1^\dagger c_3 \rho_0) = E - B. \tag{C.23}$$

# Bibliografía

- [1] C. Kittel, *Introductions to Solid State Physics* (octava edición).
- [2] Ashcroft y Mermin, *Solid State Physics*(Cornell University, 1976).
- [3] L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Statistical Physics, vol. 5* (Butterworth-Heineman, 1980).
- [4] János K. Asbóth, László Oroszlány y András Pályi, *A Short Course on Topological Insulators* (Lecture Notes in Physics 919, 2015).
- [5] B. Andrei Bernevig y Taylor L. Hughes, *Topological Insulators and Topological superconductors*(Princeton University Press, 2013).
- [6] K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45** 494, 1980.
- [7] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale y M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* **49** 405, 1982.
- [8] W. Su, J. Schrieffer y A. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* **42** 1698, 1979.
- [9] L. Li, Z. Xu, y S. Chen, *Phys. Rev. B* **89** 085111, 2014.
- [10] L. Jin, P. Wang y Z. Song, *Scientific Reports* **7** 5903, 2017.
- [11] T. Kennedy y E. H. Lieb. *Proof of the Peierls instability in one dimension*. En *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models* (pp. 85-88). Springer, Berlin, Heidelberg (2004).

- [12] Y. Aharonov y D. Bohm, *Phys. Rev.* **115** 485, 1959.
- [13] Hailin Peng, Keji Lai, Desheng Kong, Stefan Meister, Yulin Chen, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, Zhi-Xun Shen y Yi Cui *Nature Materials volume 9* páginas 225 a 229 (2010).
- [14] J. H. Bardarson, P. W. Brouwer, and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **105** 156803, 2010.
- [15] B. Hamdou, J. Gooth, A. Dorn, E. Pippel y Kornelius Nielsch, *Appl. Phys. Lett.* **102** 223110, 2013.
- [16] Jens H Bardarson and Joel E Moore, *Rep. Prog. Phys.* **76** 056501, 2013.
- [17] L. Fidkowski, *Phys. Rev. Lett* **104** 130502, 2010.
- [18] S. Hill y W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **78** 5022, 1997.
- [19] W. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **80** 10, 1998.
- [20] W. Wootters, *Entanglement of formation and Concurrence*, Quantum Information and Computation (2001).
- [21] Y Wang, T Gulden, A Kamenev, 1609.03998, 2016 - arxiv.org.
- [22] A. Kitaev y J. Preskill, *Phys. Rev. Lett.* **96** 110404, 2006.
- [23] M. Levin y X.-G. Wen, *Phys. Rev. Lett.* **96** 110405, 2006.
- [24] H. Yao y X.-L. Qi, *Phys. Rev. Lett.* **105** 080501, 2010.
- [25] X. Chen, Z.-C. Gu, y X.-G. Wen, *Phys. Rev. B* **82** 155138, 2010.
- [26] I. D. Rodríguez y G. Sierra, *Phys. Rev. B* **80** 153303, 2009.
- [27] B. Ye, L. Mu, y H. Fan, *Phys. Rev. B* **94** 165167, 2016.

- [28] J. Cho y K.W. Kim, *Scientific Reports* **7** 2745, 2017.
- [29] N. Friis, A. R. Lee y D. E. Bruschi, *Phys. Rev. A* **87** 022338, 2013.
- [30] S. Cheong y C. Henley, *Phys. Rev. B* **69** 075111, 2004.