

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE GENERAL SAN MARTIN
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
Prof. Jorge A. Sábato**

**Modelos y mecanismos de fases topológicas
superconductoras^(*)**

por Lic. Leonel José Gruñeiro

Directora

Prof. Dra. Liliana Arrachea

**^(*) Tesis para optar al título de *Doctor en Ciencia y Tecnología* mención
*Física***

República Argentina

2023

A Yami,
a Jatu
y a Ate.

Resumen

La búsqueda y detección de estados topológicos de la materia es un campo sumamente activo tanto en la física teórica, como en la experimental. La rama que se encarga de estudiar los superconductores topológicos presenta, de un tiempo a la fecha, un interés particular. La motivación principal se halla en el hecho de que esta fase se encuentra caracterizada por estados localizados en los bordes (estados de Majorana) y que los mismos poseen una estadística no-abeliana la cual resulta muy importante en la carrera por la computación cuántica. El objetivo principal de la presente tesis es el estudio teórico de los ingredientes y mecanismos, en sistemas de baja dimensionalidad, que son relevantes para la generación de fases topológicas superconductoras. En particular, se estudian y proponen métodos de detección de los estados de borde correspondientes a partir de experimentos de transporte.

En una primera parte se estudia la corriente Josephson y los espectros de Andreev para todas las posibles configuraciones en donde se tienen superconductores topológicos con simetría de inversión temporal (TRITOPS). Se incluye un Quantum Dot interactuante en la juntura y se discuten los efectos de la orientación relativa entre los vectores de acoplamiento spin-órbita, así como el impacto de las interacciones de muchos cuerpos.

En una segunda parte, se analizan configuraciones de dos terminales con un superconductor topológico bajo la acción de un campo magnético y acoplamiento spin-órbita, y un Quantum Dot embebido. Se examinan las excitaciones y las propiedades de transporte para sistemas en condiciones similares a las experimentales. Finalmente, se discuten y señalan las principales características a tener en cuenta en la observación de picos de conductancia a voltaje cero, haciendo uso de la información complementaria arrojada por los espectros de energía.

En ambos casos, se hace uso del formalismo de funciones de Green de Schwinger-Keldysh para el cálculo de las propiedades de transporte, así como de métodos efectivos para el cómputo de los espectros de energía. En este último caso, se analiza la factibilidad de los sistemas efectivos así como sus límites.

Abstract

Models and mechanisms of topological superconducting phases

The search and detection of topological states of matter is a highly active field in both theoretical and experimental physics. In particular, studying topological superconductors has been of particular interest for some time. This is mainly motivated by the fact that this phase is characterized by the existence of states localized at the edges (Majorana states) which have a non-Abelian statistic that is very important in the race for quantum computation. It is the main objective of this thesis the theoretical study of the ingredients and mechanisms, in low-dimensional systems, that are relevant for the generation of superconducting topological phases. In particular, we study and propose different methods for detecting those edge states from transport experiments.

First of all, we study the Josephson current and the Andreev spectra for all possible configurations of time-reversal invariant topological superconductors (TRITOPS). We include an interacting Quantum Dot at the junction and discuss the effects of the relative orientation between spin-orbit coupling vectors, as well as the impact of many-body interactions.

Secondly, we analyse configurations with two terminals with a topological superconductor with magnetic field and spin-orbit coupling, and an embedded Quantum Dot. We study excitations and transport properties for systems under similar conditions to the experimental ones. Finally, we discuss the main characteristics to be taken into account in the observation of zero bias conductance peaks, making use of the complementary information provided by the energy spectra.

Along the thesis, we make use of Schwinger-Keldysh Green's functions formalism to calculate the transport properties. We also use effective methods for computing the energy spectra and analyse their feasibility and limits.

Keywords: *Topological phases, Superconductors, Transport properties, Quantum transport.*

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Principios de la Física de la Materia Condensada	1
1.2. De la Simetría a la Topología	3
2. Estados Topológicos de la Materia	7
2.1. Sistemas Topológicos	7
2.2. El Modelo de Tight-Binding y los Hamiltonianos del Bulk	9
2.3. Simetrías	11
2.4. Clasificación de las Simetrías en Hamiltonianos Fermiónicos no Interac- tuantes	13
2.5. La Correspondencia Bulk-Edge	15
3. Superconductividad Topológica	17
3.1. Superconductividad	17
3.2. Teoría BCS de Campo Medio	20
3.3. Introducción a Modos de Majorana a Energía Cero	22
3.4. La Cadena de Kitaev	24
3.5. Superconductividad Topológica en Sistemas Reales Unidimensionales . .	26
3.6. Superconductor Topológico en la Red	28
3.7. Superconductores Topológicos con Simetría de Inversión Temporal (TRI- TOPS)	29
3.7.1. Modelo Mínimo de Baja Energía	31
4. Fenómenos de Transporte en Heteroestructuras Unidimensionales	33
4.1. Origen Microscópico de la Corriente y la Conductancia	33
4.2. Quantum Dots	35
4.2.1. Efecto Kondo en QDs: Modelo de Anderson	36

4.3. Efecto Josephson	38
5. Metodología	43
5.1. Formalismo de las Funciones de Green	43
5.1.1. Representaciones en Mecánica Cuántica	44
5.2. Funciones de Green para Sistemas en Equilibrio a $T = 0$	46
5.3. Funciones de Green para Sistemas Fuera del Equilibrio	47
5.4. Representación Matricial de la Función de Green en el Contorno	49
5.5. Teorema de Langreth	51
5.6. Corrientes de carga	52
5.7. Formalismo de Green en la Representación de Nambu	53
5.8. Relaciones de fluctuación-disipación en sistemas en equilibrio	55
5.9. Corriente Josephson DC en Juntura S-S	55
5.10. Corriente Eléctrica en Junturas Normal-Superconductor	57
5.11. Funciones de Green para Sistemas Finitos	58
5.11.1. Método Recursivo para Funciones de Green	58
6. Estudio del Efecto Josephson en Junturas con TRITOPS	61
6.1. Cable TRITOPS en la Red	62
6.2. Resultados para el caso de la Juntura Directa	65
6.2.1. TRITOPS-TRITOPS	65
6.2.2. TRITOPS-Superconductor	69
6.3. Resultados para el caso de la Juntura con QD embebido	71
6.3.1. Superconductor-QD-Superconductor	71
6.3.2. Juntura TRITOPS-QD-TRITOPS	73
6.3.3. Juntura TRITOPS-QD-Superconductor	74
7. Estudio de la Conductancia y el Ruido en una Juntura Normal-Cable Topológico con un Quantum Dot Embebido	77
7.1. Superconductor con Campo Magnético y Acomplamiento Spin-Órbita	78
7.2. Juntura N-S con Quantum Dots embebidos	80
7.3. Hamiltoniano Efectivo para Cable Hibridizado con un Quantum Dot	83
7.3.1. Espectro para el Hamiltoniano Efectivo de un Cable Hibridizado con un QD	86
7.4. Resultados con Campo Magnético Perpendicular a la dirección del Acomplamiento Spin-Órbita	88
7.5. Resultados con Campo Magnético No Perpendicular a la dirección del Acomplamiento Spin-Órbita	98
8. Conclusiones	103

A. Acoplamiento Spin-Órbita de Rashba	107
B. Cadena de Dos Sitios	109
C. Funciones de Green de tiempo imaginario (Matsubara)	113

Introducción

El avance de la mecánica cuántica a principios del siglo XX fue seguido por un cambio de paradigma en la descripción de la naturaleza, abriendo las puertas a mundos novedosos en espera de ser explorados. Entre estos se encuentra la física de la materia condensada, la cual se encarga de estudiar el comportamiento de sistemas a densidades finitas y bajas temperaturas y resulta altamente transversal, pues abarca no sólo el campo teórico, sino también el campo experimental.

La física de la materia condensada es una de las ramas más exitosas de la física, tanto en términos de modelos teóricos ampliamente aplicables como por el hecho de haber proporcionado a la sociedad moderna una gran cantidad de aplicaciones tecnológicas, como el transistor [1], las imágenes por Resonancia Magnética [2] y los diodos emisores de luz o LEDs [3], entre muchas otras aplicaciones.

1.1. Principios de la Física de la Materia Condensada

El gran éxito de la descripción teórica de la materia condensada se puede atribuir a la formulación de unos pocos pero muy fuertes principios [4].

El primero de esos principios habla de la imposibilidad del entendimiento completo de un sistema a partir del conocimiento de sus constituyentes. Se refiere más precisamente al carácter emergente (*emergence* es el nombre que recibe este concepto en la literatura) que poseen los sistemas físicos y que permite pensar a los mismos como escenarios en los que nuevos comportamientos, y por lo tanto, nueva física, puede emerger. Asimismo, si bien existe un continuo desarrollo de modelos microscópicos (en muchos casos incluso

imposibles de resolver analíticamente), es posible la formulación de teorías efectivas que permiten reducir la complejidad del sistema al limitarse a consideraciones relevantes al tópicico que se estudia.

Por otro lado, si bien muchos sistemas se pueden presentar diferentes desde el punto de vista microscópico, pueden exhibir comportamientos colectivos comunes y por lo tanto, ser descritos a partir del mismo modelo efectivo. Esto es lo que se conoce como *universalidad* y no solo permite agrupar sistemas en apariencia disímiles, sino que permite echar luz sobre los distintos niveles de complejidad presentes. Esto último contribuye en la identificación de ingredientes relevantes, motivando el uso de modelos simples.

Otro principio fundamental en la descripción de la materia condensada es la *simetría*. Este concepto es un pilar en toda la física moderna y se encuentra profundamente arraigada en su lenguaje. Se dice que un sistema físico exhibe una simetría si no cambia bajo ciertas manipulaciones o transformaciones de sus parámetros. Las simetrías suelen estar relacionadas con alguna cantidad conservada lo cual, en ocasiones, simplifica enormemente muchos problemas y permite entender el comportamiento de los sistemas físicos.

En mecánica cuántica en general, otra idea clave es la de *continuidad adiabática*. Dadas algunas simetrías fundamentales, la descripción teórica de un sistema interactuante puede pensarse a partir de la variación lenta (adiabática) de un parámetro con respecto a una escala de energía relevante, partiendo del caso no interactuante, para luego llegar al caso de interés sin haber modificado las simetrías del sistema.

Uno de los resultados más exitosos de la física de la materia condensada es la clasificación e identificación de las formas en que la materia puede organizarse: las *fases de la materia*. Si bien existe una descripción vasta de las fases más conocidas (sólida, líquida y gaseosa), la mecánica cuántica predice una plétora de fases adicionales, entre las cuales se encuentran, por ejemplo, los superconductores.

La clasificación de las fases de la materia ha sido extremadamente exitosa debido al estudio de la ruptura de simetría de Lev Landau [5, 6]. Dentro de este marco, una transición de fase se describe mediante una cantidad llamada parámetro de orden local. El parámetro de orden toma un valor distinto de cero sólo por debajo de cierta temperatura de transición y está asociado con la ruptura de alguna simetría subyacente del sistema. Por ejemplo, un sistema ferromagnético exhibe una magnetización espontánea por debajo de la temperatura de Curie, donde la invariancia rotacional se rompe cuando los dipolos microscópicos se alinean en una sola dirección aleatoria pero fija. En este sentido, la noción de localidad resulta fundamental porque significa que las fases de ruptura de simetría se revelan mediante una medición local, por ejemplo, la magnetización local. Una de las grandes fortalezas de la teoría de Landau es que puede formularse sobre premisas bastante generales, requiriendo solo una expansión de la energía libre en términos del parámetro de orden local.

En la presente tesis se abordan sistemas que están por fuera del alcance de la teoría de Landau. Existen fases de la materia, conocidas como *fases topológicas de la materia*, a las que no se les puede asignar ningún parámetro de orden local y, en cambio, la información sobre la fase está codificada en sus características globales. El campo matemático que trata con tales propiedades es la topología.

Si bien la topología ha sido parte de la mecánica cuántica prácticamente desde su fundación, su integración en la física de la materia condensada ha aumentado rápidamente en los últimos años.

1.2. De la Simetría a la Topología

En 1931, con el tratamiento cuántico del monopolo magnético de parte de Paul Dirac [7], el concepto de topología comenzó su participación en el terreno de la física teórica. Aún así, no fue si no hasta 50 años más tarde que la topología cobró una relevancia trascendental en la física de la materia condensada con los descubrimientos del Efecto Hall Cuántico entero (IQHE, por las siglas en inglés de *Integer Quantum Hall Effect*) [8] y fraccionario [9, 10] (FQHE, por las siglas en inglés de *Fractional Quantum Hall Effect*).

Ambos efectos se observaron en sistemas compuestos por un gas de electrones bidimensional en una heteroestructura semiconductor a baja temperatura y en presencia de un campo magnético fuerte. Al hacer circular una corriente a través de dicho gas de electrones y medir la conductancia Hall conforme el campo magnético varía, se observan comportamientos amesetados (*plateaux*) en múltiplos enteros (IQH) o fraccionarios (FQH) de e^2/h . Este resultado es independiente de cualquier otro detalle microscópico del sistema. Asimismo, dada su alta precisión ($1/10^9$), es posible utilizar una constante que se extrae de esta experiencia, la constante de von Klitzing $R_K = 25812,8074555 \Omega$, como valor de referencia para la resistencia.

El Efecto Hall Cuántico fue el primer ejemplo experimental en el que se observó un estado cuya descripción no era posible en el marco de la ruptura de simetría de Landau. Sobre aquellas fases de la materia que exhiben una conductancia Hall cuantizada no es posible asignar un parámetro de orden local [11–13] puesto que no hay diferencia en las simetrías entre las configuraciones con distintos valores de la conductancia Hall. Este tipo de sistemas son conocidos como topológicamente ordenados [14] y constituyen fases de la materia cuyas teorías de campo efectivas a bajas energías son teorías de campo topológicas. Dichas teorías, como su nombre indica, poseen una fuerte relación con el campo de la matemática conocido como topología y poseen la estructura formal que permite explicar de manera precisa la cuantización de la conductancia Hall.

Otra característica sumamente importante del estado Hall es lo que sucede con el *bulk*¹ del sistema: mientras los estados de borde son conductores, el *bulk* es aislante [15]. Asimismo, esta corriente que circula por los bordes es quirál, lo que implica que la misma viaja en una única dirección para un determinado borde y resulta inmune para muchos tipos de dispersión (*scattering*). Esto hace que dichos estados de borde quirales transfieran carga a lo largo de la muestra a través de canales de conductancia ideales cuyo resultado es una conductancia de Hall perfectamente cuantizada. Parte de la belleza detrás de este fenómeno se encuentra en el hecho de que la topología interna de un sistema Hall cuántico se manifiesta en el comportamiento de los estados de borde.

Dada la necesidad de describir interacciones fuertes así como correlaciones, los modelos teóricos que describen los sistemas topológicamente ordenados suelen ser muy complejos. Afortunadamente, las fases o estados² en sistemas fermiónicos no interactuantes exhiben propiedades sumamente interesantes y fuertemente arraigadas en la topología. Para la clara distinción entre estados ordenados topológicamente y los estados fermiónicos libres, se llamarán a los primeros *Estados Topológicos de la Materia* (TSM, por las

¹A lo largo de la presente tesis se hablará del *bulk* del sistema para hacer alusión a toda parte del mismo que no sea el borde.

²Las nociones de *fases* de la materia o estados de la materia son frecuentemente usados de manera intercambiable a lo largo de la presente tesis.

siglas en inglés de *Topological State of Matter*). El estado IQH resultó ser el primer ejemplo conocido de un TSM. Por otro lado, el estado FQH no puede ser descrito por ningún modelo de fermiones libres al ser un sistema interactuante y altamente correlacionado. El descubrimiento de la estructura topológica de la teoría de bandas en sistemas sólidos (presente desde los orígenes mismos de la cuántica) ha impulsado lo que se conoce como teoría topológica de bandas, fundamental en el estudio y entendimiento de los TSM.

Un paso sumamente importante en el entendimiento de TSM surgió en 1988 cuando Haldane mostró que en sistemas como el grafeno con fermiones no interactuantes y sin spin, es posible una conductancia Hall cuantizada aún en ausencia de un campo magnético [16]. Esto resulta particularmente notable dado que el campo magnético se consideraba un ingrediente crucial en lo que respecta a las propiedades topológicas en estados IQH. En cambio, a partir del trabajo de Haldane se evidencia que es la ruptura de la simetría de inversión temporal, impuesta por la presencia del campo magnético, el ingrediente central en el estado topológico. El mencionado modelo es conocido como Aislante de Chern o Efecto Hall cuántico anómalo y se realizó experimentalmente con trampas de átomos fríos [17].

En el año 2005, Kane and Mele predicen que el grafeno puede exhibir un efecto Spin Hall cuántico [18, 19]. En su modelo, dos copias del modelo de Haldane, una para cada dirección de spin, se acoplan vía interacciones spin-órbita. Por consideraciones de simetría, este sistema posee una conductancia Hall nula, pero en los bordes emergen estados con helicidades diferentes que, debido a la ausencia de campo magnético, son estables. Sobre estos estados de borde, se dice que se encuentran protegidos por simetría de inversión temporal.

Desafortunadamente, el efecto QSH resulta ser difícil de llevar a cabo experimentalmente en grafeno. Pero en 2006 Bernevig, Hughes and Zhang propusieron un modelo alternativo del efecto QSH [20]. El efecto spin-Hall cuántico fue detectado en dicho sistema y se lo considera el primer estado topológico de la materia protegido por una simetría [21].

A partir de ese momento, el efecto QSH fue generalizado a sistemas tridimensionales, con estados superficiales exóticos basados en diferentes materiales [22–24].

En paralelo, en el año 2001 Kitaev presenta un trabajo con una propuesta para un superconductor topológico [25]. Dicho modelo, llamativamente sencillo, presentaba una excitación particular conocida como *Majorana zero mode* (MZM) la cual poseía una estadística no-abeliana, una propiedad de inmenso interés en el campo de la computación cuántica topológica [26]. El trabajo de Kitaev inició una etapa de gran esfuerzo en la realización experimental de los MZMs. Asimismo, el trabajo pionero de Fu y Kane (2008) abrió las puertas a un campo de investigación en el cual estructuras de la nanotecnología ya existentes son manipuladas con el objetivo de construir dispositivos con superconductividad topológica y la presencia de MZMs [27]. Si bien los primeros resultados experimentales para estos dispositivos [28–30] resultaron insatisfactorios, las mejoras tecnológicas surgidas de estos experimentos, junto con las contribuciones desde la teoría, demuestran la vitalidad de esta área de estudio y su futuro prometedor.

Alrededor del 2010, se descubrió que los sistemas que exhiben un comportamiento topológico (efecto IQH, efecto QSH, superconductores topológicos) pueden ser descritos dentro de una estructura conocida como *la tabla periódica de los aislantes y supercon-*

*ductores topológicos*³. Allí se describe la configuración general en donde la estructura de bandas, la simetría, la topología y las dimensiones espaciales generan una clasificación de todos los posibles TSM fermiónicos no interactuantes.

En las últimas décadas, la física de la materia condensada ha sido protagonista de un desarrollo tecnológico vertiginoso dadas las nuevas técnicas innovadoras: trampas de átomos fríos, la capacidad de fabricar nano-dispositivos con precisión atómica, circuitos superconductores y heteroestructuras. Estos avances, junto con nuevos modelos topológicos da lugar a un promisorio camino hacia una nueva generación de dispositivos cuánticos y una exótica ingeniería de materiales.

Estructura de la Tesis

El propósito de esta tesis es el estudio de fenómenos de transporte en distintas configuraciones. En ese sentido, el presente trabajo se organiza de la siguiente manera.

En el Capítulo 2 se realizará una introducción al concepto de simetría, el cual es fundamental en la comprensión de los estados topológicos de la materia. Además, se discutirán las reglas de clasificación y se introducirá la correspondencia *bulk-edge* en la cual se condensa toda la información necesaria para entender la relación entre la topología y la simetría.

En el Capítulo 3 se presentará a los actores principales de la presente tesis: los modos de Majorana. Se comenzará con un repaso general del concepto de superconductividad, dado que las plataformas estudiadas con el objetivo de predecir la existencia de modos de Majorana contienen superconductores. Luego, se explicarán las principales características de los fermiones de Majorana.

En el Capítulo 4 se explicarán los fenómenos de transporte a través de los cuales se busca entender y también predecir la presencia de transiciones de fase topológicas. El objetivo de este capítulo será el entendimiento de los mecanismos involucrados en la física asociada a dichos fenómenos de transporte. Finalmente, se exhibirán los modelos implementados con el objetivo arriba mencionado.

El Capítulo 5 está dedicado al formalismo de Green. A partir de una síntesis que buscará abarcar los contenidos básicos relevantes, se desarrollará el formalismo teórico empleado y se mostrará la metodología utilizada para el cálculo de las magnitudes relevantes.

En los Capítulos 6 y 7 se exhibirán los principales resultados obtenidos en el marco de la presente tesis. Por un lado, en el Capítulo 6, los espectros y corrientes Josephson para distintas configuraciones unidimensionales así como la explicación respecto de las diferencias cualitativas conseguidas, analizando una gama de fenómenos. Por otro lado, en el Capítulo 7, se presentarán los resultados para otras propiedades de transporte analizadas (conductancia y ruido), examinando el impacto de diversos elementos en sus comportamientos.

En el Capítulo 8 finaliza la tesis con las conclusiones y perspectivas futuras del campo de estudio.

³También se la conoce como *The ten-fold way* o *The Cartan-Altland-Zirnbauer classification table* [31–34]

Estados Topológicos de la Materia

En la presente tesis se discutirán fenómenos de transporte en configuraciones tanto fuera como dentro de la fase topológica. Antes de profundizar en los modelos y resultados, es importante presentar de manera sencilla los pilares sobre los que se montarán los modelos teóricos así como la fundamentación de las derivaciones obtenidas: topología, simetría y lo que se conoce como correspondencia *bulk-edge*. Si bien cada uno de ellos es un tópico en sí, el capítulo se centrará en los contenidos relevantes para el presente trabajo. Se introducirá de manera simple el formalismo de *tight-binding*, el cual será utilizado en repetidas ocasiones para describir modelos que contienen Estados Topológicos de la Materia (TSM por las siglas en inglés de *topological states of matter*). A continuación, se describirán los conceptos esenciales de las simetrías en la mecánica cuántica, los cuales resultan de vital importancia para la clasificación de sistemas con TSM. Finalmente, se introducirá la correspondencia *bulk-edge* que vinculará la presencia (o ausencia) de estados topológicos con el comportamiento del sistema en el bulk, y por supuesto, sus simetrías. Es con esta correspondencia que quedará en claro cómo la simetría y la topología son vitales para el estudio y entendimiento de los TSM.

2.1. Sistemas Topológicos

El campo de la matemática que se conoce como Topología trata con la pregunta acerca de si ciertos objetos matemáticos pueden ser deformados en otros. Estas deformaciones están restringidas a ser continuas; se pueden doblar, extender y torcer dichos objetos, pero no se pueden cortar y pegar, por ejemplo. La pregunta natural que surge es cuáles son las propiedades globales que se preservan durante dichas deformaciones.

El siguiente ejemplo (aunque numerosas veces mencionado) resulta ilustrador: la esfera puede ser deformada de manera continua en un cubo pero no en un toroide. La esfera y el cubo se dice que son topológicamente equivalentes, u *homeomorfas*, mientras que la esfera y el toroide son sistemas topológicamente distintos. La forma más simple de justificar esto es pensar en la cantidad de agujeros que tiene cada sistema: mientras que la esfera no tiene ninguno, el toroide posee uno.

En el campo particular de la física de la materia condensada, la pregunta relevan-

te es si, dados dos sistemas cuánticos, representados cada uno por su Hamiltoniano (o equivalentemente por sus estados fundamentales), pueden ser deformados de manera continua a partir de un conjunto de parámetros $\{\lambda_i\}$ y determinadas restricciones [35, 36]. En estas condiciones, los sistemas se dicen que son topológicamente equivalentes, de lo contrario son sistemas topológicamente distintos. El tipo de restricciones (análogo a la regla de *no cortar* mencionada anteriormente) resulta de vital importancia puesto que pone en consideración las formas a través de las cuales un Hamiltoniano puede ser transformado en otro. En la presente tesis, los Hamiltonianos tendrán como restricción poseer un *gap* a lo largo del proceso de deformación, lo cual significa que el sistema siempre tendrá asociado un gap de energía. Entre aquellos estados de energía ocupados y desocupados, algunos sistemas fermiónicos con gaps en sus Hamiltonianos poseen regiones con energía finita en donde no existen estados. Estos gaps deben existir sin importar el tamaño del sistema, y a partir de estas condiciones, es posible describir sistemas aislantes o superconductores de campo medio.

Existe una cantidad que logra condensar la información en relación a las posibles transiciones de fase de un sistema: el *invariante topológico*. Como su nombre lo indica, esta magnitud no cambia durante una deformación entre dos Hamiltonianos topológicamente equivalentes. Ahora bien, si dicha deformación implica un cierre del gap de energía, dicha magnitud cambiará. Cuando esto último sucede, se dice que el sistema atraviesa una transición de fase topológica.

Más adelante en este Capítulo se profundizará en torno a la clasificación de simetrías, presentando también los diferentes invariantes para cada una. En la Figura 2.1, se presentan los distintos casos, junto con la posibilidad de inexistencia de un invariante.

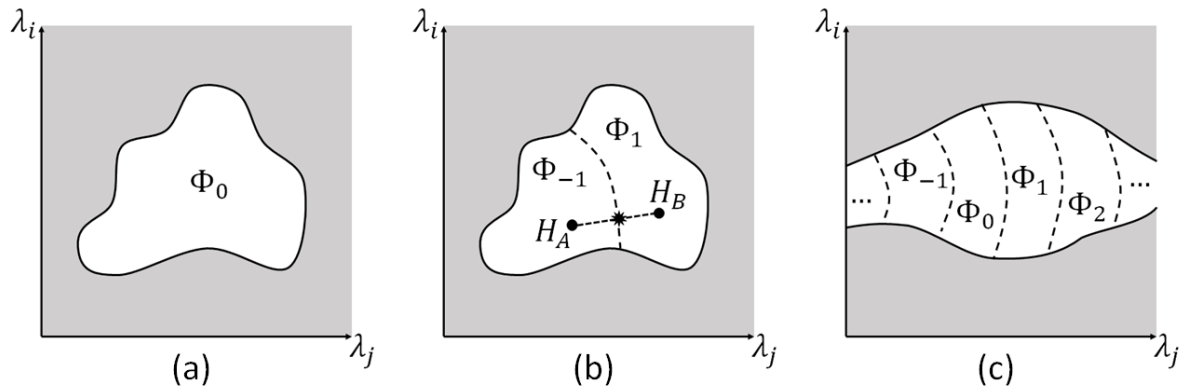


Figura 2.1: Esquema del diagrama de fases topológico en el espacio de parámetros $\{\lambda_i\}$. Las regiones grises corresponden a Hamiltonianos sin gap, mientras que las regiones blancas corresponden a Hamiltonianos gapeados. Dos Hamiltonianos que pertenezcan a la misma región conectada Φ_ν pueden ser deformados entre sí de manera continua sin necesidad de cerrar el gap, mientras que Hamiltonianos de distintas regiones, como por ejemplo H_A y H_B en (b) sólo pueden conectarse atravesando una transición de fase asociada con el cierre del gap. En (a), sólo existe una región gapeada y todos los Hamiltonianos son topológicamente equivalentes y triviales. En (b), hay dos tipos de clases de Hamiltonianos distinguibles por un invariante (\mathbb{Z}_2 , ver Sección 2.4). En (c) existen un conjunto infinito de Hamiltonianos distintos, que se pueden etiquetar con el invariante \mathbb{Z} , separados por regiones sin gap. Figura adaptada de [37].

Asimismo, existe un ingrediente fundamental para los TSM. Mientras una simetría esté presente en un sistema, un estado topológico protegido por dicha simetría no puede ser deformado en un estado trivial a menos que el gap se cierre. En la presente tesis,

cuando se haga referencia a un estado trivial será equivalente a decir superconductor (o aislante).

Habiendo introducido las nociones básicas en torno a los TSM, la siguiente pregunta sería cómo pueden detectarse, al menos teóricamente. En el resto de la tesis se abordará dicha pregunta pero previo a eso es importante introducir algunos conceptos y herramientas esenciales.

2.2. El Modelo de Tight-Binding y los Hamiltonianos del Bulk

En física del estado sólido, el *tight binding model* (ó TB Model) es, como su nombre lo indica, un modelo para calcular la estructura de bandas electrónicas usando como aproximación una base de funciones de onda basado en una combinación lineal de las mismas. Este método captura la estructura de la red y permite una implementación simple de las simetrías del sistema, sus grados de libertad internos, impurezas y demás ingredientes fundamentales no solo en la física de la materia condensada en general, sino en el caso de sistemas topológicos en particular. Más aún, en el contexto de los estados topológicos de la materia contiene un corte (*cut-off*) natural para altas energías crucial a la hora de asignar propiedades topológicas a los sistemas de estudio. Dado su poder y simplicidad, existen numerosos modelos de TSM que se formulan dentro de la descripción de tight-binding.

De manera general, un Hamiltoniano escrito según el modelo de tight-binding tiene la forma

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\alpha,\beta} c_{i,\alpha}^\dagger H_{i,j}^{\alpha,\beta} c_{j,\beta} \quad (2.1)$$

donde i, j corresponden a los sitios de la red (en alguna dimensión espacial d) y α y β representan los grados de libertad internos del sistema (spin, orbitales, partícula-agujero). Los operadores en segunda cuantización $c_{i,\alpha}^\dagger$ ($c_{i,\alpha}$) crean (destruyen) una partícula con grados de libertad α en el sitio i , y cumplen las siguientes relaciones de anticonmutación fermiónicas

$$\begin{aligned} \{c_{i,\alpha}, c_{j,\beta}^\dagger\} &= \delta_{i,j} \delta_{\alpha,\beta}, \\ \{c_{i,\alpha}, c_{j,\beta}\} &= 0 \\ \{c_{i,\alpha}^\dagger, c_{j,\beta}^\dagger\} &= 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Como se verá en la próxima sección, los coeficientes de $H_{i,j}^{\alpha,\beta}$ contienen información sobre la simetría del sistema. Al imponer invariancia traslacional (típicamente en sistemas con condiciones de contorno periódicas), sobre el Hamiltoniano de la Ecuación (2.1) se puede realizar una transformación de Fourier

$$\mathcal{H} = \sum_{k,\alpha,\beta} c_{k,\alpha}^\dagger h^{\alpha,\beta}(k) c_{k,\beta} \quad (2.3)$$

donde $h^{\alpha,\beta}(k)$ es un elemento del Hamiltoniano de Bloch, o en este caso, del Hamiltoniano superconductor, conocido como Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes (BdG). Este no

es otra cosa más que una matriz en los grados de libertad internos del sistema cuyos elementos $h^{\alpha,\beta}(k)$ están relacionados con $H_{i,j}^{\alpha,\beta}$ de la siguiente manera

$$h^{\alpha,\beta}(k) = \sum_{\nu} H_{\nu}^{\alpha,\beta} e^{-i\nu \cdot k} \quad (2.4)$$

En este caso, ν representa un vector que conecta sitios de la red y la mayoría de las veces refiere al conjunto de vectores de primeros vecinos.

Una característica que hace a la ventaja del método de tight-binding es la simplicidad a la hora de la implementación numérica. Para ver esto, hay que detenerse en la representación matricial de la mecánica cuántica: sea $\{|i\rangle\}_i$ el conjunto completo de bases ortonormales del espacio de Hilbert que verifica $\sum_i |i\rangle \langle i| = \mathbb{1}$ con el producto interno $\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}$. Dado un operador en el espacio de Hilbert, el mismo puede escribirse

$$\mathcal{A} = \mathbb{1} \cdot \mathcal{A} \cdot \mathbb{1} = \left[\sum_i |i\rangle \langle i| \right] \cdot \mathcal{A} \cdot \left[\sum_j |j\rangle \langle j| \right] = \sum_{i,j} A_{i,j} |i\rangle \langle j|, \quad (2.5)$$

con $A_{i,j} = \langle i|\mathcal{A}|j\rangle \in \mathbb{C}$ un elemento de la matriz A , la cual es una representación del operador \mathcal{A} en la base dada. El mismo procedimiento se puede llevar a cabo en un vector cuya representación sea

$$|\Psi\rangle = \mathbb{1} |\Psi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|\Psi\rangle = \sum_i \Psi_i |i\rangle \quad (2.6)$$

donde $\Psi_i = \langle i|\Psi\rangle \in \mathbb{C}$ son los elementos de la base del vector $\vec{\Psi}$ que representa a $|\Psi\rangle$ en dicha base. Ambos objetos abstractos en el espacio de Hilbert, \mathcal{A} y $|\Psi\rangle$, fueron convertidos en una matriz A y un vector $\vec{\Psi}$ que ahora son conjuntos de números complejos que pueden ser calculados en una computadora.

Si se considera ahora la ecuación de Schrödinger $\mathcal{H}|\Psi\rangle = \varepsilon\Psi$, para determinado estado $|\Psi\rangle$ con autovalor ε y haciendo uso de las representaciones (2.5) y (2.6)

$$\begin{aligned} \left[\sum_{i,j} H_{i,j} |i\rangle \langle j| \right] \left[\sum_k \Psi_k |k\rangle \right] &= \varepsilon \left[\sum_i \Psi_i |i\rangle \right] \\ \Rightarrow \sum_{i,j} H_{i,j} \Psi_j |i\rangle &= \varepsilon \sum_i \Psi_i |i\rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

Multiplicando a izquierda por $\langle k|$ y usando la ortonormalidad de la base,

$$\sum_{k,j} H_{k,j} \Psi_j = \varepsilon \Psi_k \quad \text{ó} \quad H \vec{\Psi} = \varepsilon \vec{\Psi} \quad (2.8)$$

que justamente es la ecuación de autovalores para la matriz H . Al resolverla, se obtienen los autovalores (energía) $\{\varepsilon_i\}$ y el conjunto autovectores $\{\vec{\Psi}_i\}$ cuyos elementos serán los coeficientes de la expansión en la base (2.6).

Para clarificar esto, considérese una cadena unidimensional compuesta por N sitios acoplados entre sí. El Hamiltoniano del sistema será

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[-t(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) - \mu c_i^\dagger c_i \right], \quad (2.9)$$

donde t es la amplitud del acoplamiento de primeros vecinos y μ el potencial químico de cada sitio (*on-site*). Este Hamiltoniano puede implementarse numéricamente de manera simple definiendo una matriz $N \times N$ con elementos no-nulos

$$H_{i,i} = -\mu, \quad H_{i,i+1} = H_{i+1,i} = -t. \quad (2.10)$$

La base se elige de manera tal que $|i\rangle \equiv c_i^\dagger |0\rangle = (0, 0, \dots, 1, \dots, 0)^T$, donde $|0\rangle$ es el estado vacío en el que no hay partículas, el 1 se encuentra en la posición i -ésima y la T denota la transposición del vector de la base. Resolviendo la ecuación de autovectores y autovalores para H se pueden hallar el espectro de energía del modelo y los autoestados que serán la combinación lineal de los estados de la base, estados de Bloch, que aparecen en cualquier cristal con estructura periódica.

Imponiendo condiciones de contorno periódicas (CCP), $c_{N+1} = c_1$ y $c_{N+1}^\dagger = c_1^\dagger$ es posible realizar una transformación de Fourier la cual desembocará en un espectro de energía (en el espacio recíproco) $h(k) = \epsilon(k) = -2t \cos(k) - \mu$ en donde se está asumiendo una constante de la red unitaria. El momento k del sistema tomará los valores $k = \frac{2\pi n}{L}$ donde $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$. Reemplazando estos valores en la relación de dispersión, se obtendrán los autovalores de la matriz H con el agregado de la condición de contorno periódica $H_{1,N} = H_{N,1} = -t$.

Una vez establecido el formalismo de base en el cual se va a trabajar (*tight-binding*), lo que resta es, con el objetivo de entender los estados topológicos de la materia (TSM), investigar la influencia de la simetría en los mismos.

2.3. Simetrías

En mecánica cuántica, las simetrías están representadas por operadores unitarios que conmutan con el Hamiltoniano¹. Más precisamente, se dice que una simetría existe si el Hamiltoniano del sistema de estudio conmuta con el correspondiente operador unitario

$$[\mathcal{H}, U] = 0 \iff U^\dagger \mathcal{H} U = \mathcal{H}. \quad (2.11)$$

Dos ejemplos simples de este tipo de simetrías son el spin y el momento lineal.

Una simetría unitaria permite la re-escritura del Hamiltoniano del sistema en bloques. Por ejemplo, en el caso de un Hamiltoniano que conmuta con σ_z (siendo σ_z la matriz de Pauli en el espacio de spin), el mismo puede ser escrito en bloques separados: un bloque para la parte del sistema con spin \uparrow , y otro bloque para la parte del sistema con spin \downarrow . El hecho de que esta matriz conmute con el Hamiltoniano, junto con su ecuación de movimiento, hace que los spines del sistema se conserven por separado y ambos bloques estén desconectados. Dicho de otra manera, cada bloque no contendrá simetría de spin dado que ese grado de libertad ha sido eliminado.

Cada sub-bloque puede, a su vez, seguir analizándose hasta alcanzar una representación irreducible del grupo de simetría completo del Hamiltoniano. Además, cada sub-bloque puede clasificarse a partir de ciertos operadores anti-unitarios que imponen restricciones espectrales en el Hamiltoniano, lo que es de suma importancia cuando se trata de la estructura de banda (topológica) del sistema de estudio. Otro aspecto importante de las simetrías anti-unitarias es su solidez ante la implementación de aleatoriedad o desorden en un Hamiltoniano.

¹En esta tesis también se considerarán simetrías cuyo origen está en operadores anti-unitarios

Para los TSM existen dos importantes simetrías anti-unitarias [37, 38]. Un Hamiltoniano se dice que tiene simetría de inversión temporal (TRS, por las siglas en inglés *time-reversal symmetry*) o que posee simetría partícula-agujero (PHS, por las siglas en inglés *particle-hole symmetry*)² si se pueden encontrar operadores anti-unitarios que verifiquen y a la vez satisfagan, respectivamente,

$$\mathcal{T}\mathcal{H}\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{H}, \quad \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P}^{-1} = -\mathcal{H} \quad (2.12)$$

La TRS está vinculada con la noción de invariancia del sistema si el movimiento se revierte. La PHS puede resultar un poco más compleja de interpretar físicamente. En sistemas con superconductividad, la PHS surge automáticamente ante la duplicación de los grados de libertad³. Es por esto que si bien puede no ser una simetría física, será tratada al mismo nivel que cualquier otra simetría a lo largo de esta tesis.

De acuerdo con el teorema de Wigner [39], cualquier operador anti-unitario puede ser escrito a partir del producto de un operador unitario y un operador de conjugación de carga \mathcal{K} . Por ejemplo, para sistemas de spin 1/2 la TRS, en la base de las matrices de Pauli ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$) puede escribirse como $\mathcal{T} = i\sigma_y\mathcal{K}$. Por un lado, hay que remarcar que $i\sigma_y$ es unitario, y que esta representación, como cualquier otra que se escriba, depende de la base. Aplicando \mathcal{T} sobre cualquiera de los operadores representados por las matrices de Pauli, se invierte la componente de spin

$$\mathcal{T}\sigma_i\mathcal{T}^{-1} = -\sigma_i, \quad i \in \{x, y, z\} \quad (2.13)$$

Por virtud del teorema de Wigner, es posible establecer una notación conveniente de manera tal de que $\mathcal{T} = T\mathcal{K}$ y $\mathcal{P} = P\mathcal{K}$ donde T y P son operadores unitarios.

Ambas simetrías, TRS y PHS, poseen dos propiedades fundamentales para lo que se discute en esta tesis. Elevando al cuadrado a los operadores correspondientes a dichas simetrías,

$$\mathcal{T}^2 = \pm 1 \quad \text{y} \quad \mathcal{P}^2 = \pm 1. \quad (2.14)$$

Estos resultados son sumamente relevantes y tienen un impacto importante en el espectro de energía. El caso inmediato es el que proviene de $\mathcal{T}^2 = -1$ para sistemas con partículas con spin 1/2, conocido como teorema de Kramers: en presencia de TRS, todos los estados de energía del sistema estarán doblemente degenerados.

Para Hamiltonianos de Bloch o BdG⁴ $h(k)$, TRS y PHS en (2.12) se traducen en las siguientes condiciones sobre el espectro [38]

$$Th^T(k)T^\dagger = h(-k), \quad Ph^T(k)P^\dagger = -h(-k), \quad (2.15)$$

donde se está haciendo uso del carácter hermítico de $h(k)$. Como consecuencia directa de la TRS y la PHS, los autovalores de energía surgen en pares $\{\varepsilon_k, \varepsilon_{-k}\}$ y $\{\varepsilon_k, -\varepsilon_{-k}\}$, respectivamente. Dichas simetrías del sistema, además, implicarán que, si bien el número de partículas en un sistema superconductor no es una cantidad conservada (como se verá en las Secciones 3.1 y 3.2), la paridad del estado fundamental sí se conserve.

²También conocida como simetría de conjugación de carga.

³En la descripción de los superconductores se verá que se tienen en cuenta tanto los electrones (partículas), como los agujeros (anti-partículas).

⁴Recordar que estos Hamiltonianos son típicamente matrices.

La combinación de estas simetrías (TRS y PHS) es lo que se conoce como simetría de quiralidad (CS, por las siglas en inglés *chiral symmetry*) que puede representarse con el operador $\mathcal{C} = TKPK = TP^* \equiv C$. La simetría de quiralidad impone la condición

$$\mathcal{C}\mathcal{H}\mathcal{C}^{-1} = -\mathcal{H}, \quad (2.16)$$

y en el caso del Hamiltoniano de Bloch

$$Ch(k)C^\dagger = -h(k) \quad (2.17)$$

En ocasiones, CS se dice que es una simetría de sub-red (*sublattice symmetry*) dado que la misma puede encontrarse en sistemas que se pueden sub-dividir en 2 sub-sistemas a y b . En estos casos, el Hamiltoniano puede ser escrito en una base en la que el Hamiltoniano de Bloch es no-diagonal

$$h(k) = \begin{pmatrix} 0 & h_{ab} \\ h_{ab}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Haciendo uso de la relación en (2.17), es fácil ver que, para sistemas con CS, las auto-energías vienen en pares $\{\varepsilon_k, -\varepsilon_k\}$.

Como se verá a continuación, el análisis de estas tres simetrías resulta fundamental en la clasificación de los TSM.

2.4. Clasificación de las Simetrías en Hamiltonianos Fermiónicos no Interactuantes

La clasificación topológica de todos los Hamiltonianos fermiónicos gapeados y no interactuantes se reduce esencialmente a la resolución de dos problemas:

- Dada una determinada dimensionalidad d y un conjunto de operadores anti-unitarios, se busca saber cuál es el conjunto de Hamiltonianos topológicamente distintos, cuántas diferentes fases topológicas hay, y quién es el invariante topológico.
- Dado un Hamiltoniano perteneciente a una determinada clase, con ciertos parámetros fijados, se busca saber si el sistema está en la fase topológica, y en ese caso, cuál es el valor del invariante topológico.

El primero de estos problemas se discutirá en un nivel simple a continuación, mientras que el segundo problema dado que depende más del contexto de cada modelo, se abordará en casos específicos más adelante.

Como se ha visto, las simetrías juegan un rol sumamente importante en sistemas topológicos. La tabla periódica de superconductores y aislantes topológicos resuelve de manera sistemática el problema de entender la existencia (o no) de estados topológicos a partir de la presencia (o ausencia) de una determinada simetría, así como qué transiciones de fase pueden ocurrir en función de la dimensionalidad del sistema.

La idea fundamental atrás de la clasificación es que sistemas físicos, en determinada dimensión espacial y con un gap en el bulk pueden, de acuerdo con sus simetrías (TRS, PHS y CS) separarse en distintas clases. La posible presencia de TRS y/o PHS, junto con la propiedad expuesta en la Ecuación (2.14), implica nueve diferentes posibilidades.

Finalmente, la CS suele estar siempre fijada por las otras dos, a excepción de un caso. Cuando TRS y PHS no se encuentran presentes en el sistema, aún así existe la posibilidad de tener CS⁵. De esta manera, el total de posibles clasificaciones es diez.

El resultado de la clasificación de todos los Hamiltonianos fermiónicos no-interactuantes y gapeados se encuentra resumido en la Tabla 2.1⁶, la cual puede encontrarse en la literatura de diferentes formas: *The ten-fold way*, *The Cartan-Altland-Zirnbauer classification table* ó simplemente *Tabla Periódica de Aislantes y Superconductores Topológicos*

Clase	d=0	d=1	d=2	d=3
A	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0
AI	\mathbb{Z}	0	0	0
AII	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2
AIII	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}
BDI	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0
C	0	0	$2\mathbb{Z}$	0
CI	0	0	0	$2\mathbb{Z}$
CII	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2
D	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0
DIII	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}

Tabla 2.1: Tabla periódica con las posibles fases topológicas de Hamiltonianos fermiónicos no-interactuantes. Para cada clase en una dada dimensión espacial d , existe un invariante topológico correspondiente. Las entradas \mathbb{Z}_2 , \mathbb{Z} ó $2\mathbb{Z}$ indican la presencia de Hamiltonianos topológicamente distintos para la correspondiente clase de la columna de la izquierda. Las entradas con 0 indican que todos los Hamiltonianos en esos casos serán triviales

En la primera columna de la Tabla 2.1 se encuentran listadas las diez diferentes clases de simetría. Las otras cuatro columnas indican los distintos invariantes para cada dimensión desde $d = 0$ a $d = 3$.

El invariante \mathbb{Z} señala la existencia de una cantidad infinita de Hamiltonianos topológicamente distintos (ver Figura 2.1(c)), etiquetados por un conjunto de números enteros ($Q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Un ejemplo de sistema con estas características es el Efecto Hall Cuántico Entero. En este caso, el invariante topológico es el número de Chern, el cual especifica la cantidad de estados quirales y su quiralidad, opuestos para los distintos signos de Q .

El $2\mathbb{Z}$ indica que el invariante puede tomar valores pares, $Q = 0, \pm 2, \pm 4, \dots$; por tener el sistema los grados de libertad duplicados. Un ejemplo podría ser un *Quantum Dot* (QD) con spin y simetría de inversión temporal, para el cual el invariante topológico es el número de niveles de energía llenos. Para que sea un número par, es necesario que el sistema posea degeneración de Kramers.

Las entradas en donde se observa un \mathbb{Z}_2 indican dos clases distintas de Hamiltonianos: triviales ó topológicos, ambas denotadas con $Q = \pm 1$ (dependiendo de la convención, también se puede tomar $Q = 0, 1$). Un ejemplo al respecto es el modelo de Kitaev⁷ [25]: un superconductor topológico perteneciente a la clase D con $d = 1$ que distingue entre

⁵El operador de la CS al cuadrado siempre da +1

⁶Sólo se presentan los casos desde dimensión 0 a dimensión 3. Para ver qué sucede para sistemas con dimensionalidad superior, ver Ref [37].

⁷El modelo se introducirá y desarrollará en la Sección 3.4

dos fases claramente diferenciadas en donde pueden existir (o no) modos de Majorana en los extremos. Otros posibles ejemplos pueden ser los aislantes y superconductores con simetría de inversión temporal en dos y tres dimensiones.

Finalmente, los ceros en la Tabla 2.1 indican que todos los Hamiltonianos gapeados con las simetrías dadas, y en las dimensiones indicadas, pueden ser deformados unos en otros sin que se cierre el gap o se rompa alguna de las simetrías.

2.5. La Correspondencia Bulk-Edge

A la hora de trabajar con TSM, una de las preguntas que surge naturalmente tiene que ver con, dada una transición de fase topológica, determinar de qué lado quedó el estado topológico, y de qué lado quedó el trivial. En particular, resulta de interés conectar un invariante topológico a una cantidad observable experimentalmente. En la presente sección, se abordará una respuesta a las cuestiones anteriormente planteadas a través de lo que se conoce como la *correspondencia bulk-edge*.

La esencia de esta correspondencia radica en el hecho de que la presencia (o no) de estados de borde topológicamente no triviales estará fuertemente relacionada con el comportamiento del sistema en el bulk. Algo que hace aún más interesante esta correspondencia, es el hecho de que puede ser entendida de manera intuitiva.

Dado que un invariante topológico sólo puede cambiar si el gap en el bulk se cierra (y siempre que el sistema no atraviese una ruptura de simetría), cualquier región espacial en la que algún parámetro cambie de manera tal que fuerce a una transición de fase topológica, debe estar acompañado por un cierre local del gap, como se puede observar en la Figura 2.2: un sistema gapeado (línea punteada) atraviesa un cambio en el valor de un invariante topológico asociado ($\nu_I - \nu_D \neq 0$) y es ahí en donde se cierra el gap y aparece un estado de borde. Las propiedades de estos estados de borde estarán relacionadas con las simetrías que posea el bulk del sistema de estudio.

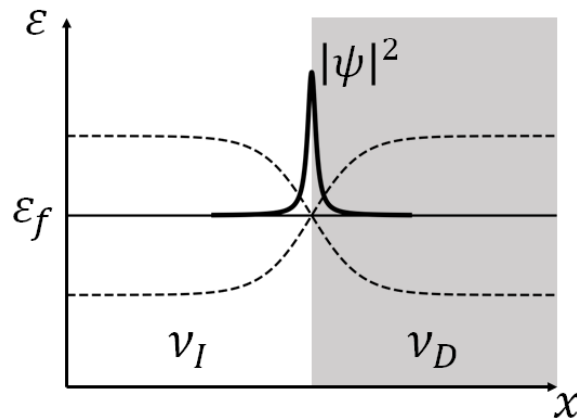


Figura 2.2: Esquema de la correspondencia bulk-edge. Si hay un cambio en el invariante topológico asociado al sistema, $\nu_I - \nu_D \neq 0$, habrá un cierre local del gap acompañado de un estado localizado ψ en el nivel de Fermi ε_f ,

A modo de corolario, si un sistema satisface la TRS, el mismo tendrá estados de borde helicoidales. Los mismos serán dos especies separadas que estarán localizadas en los bordes del sistema y que, en caso de estar en un sistema de dimensión $d \leq 2$, se

desplazarán (por el borde del sistema) en direcciones opuestas. Por otro lado, la PHS implicará que los estados de borde, en el caso de la presente tesis, los modos cero de Majorana (ver Capítulo 3) serán una superposición de partículas y agujeros (en los cuales cada especie tendrá el mismo peso). Finalmente, la CS implicará que los Majoranas serán modos helicoidales. Adicionalmente, los estados de borde serán conductores (recordar, a modo ejemplificador, el Efecto Hall Cuántico Entero) dado que cruzarán el nivel de Fermi, el cual en TSM siempre se ubica en el gap.

Es importante remarcar que no siempre las dimensiones entre lo que se está llamando borde (donde justamente surgen estos comportamientos) y el *bulk* del sistema difieren en uno. Algunos estados exóticos pueden ser atrapados en defectos topológicos, como es el caso de los modos de Majorana a energía cero (MZM por las siglas en inglés de *Majorana Zero Modes*) atrapados en vórtices cero-dimensionales presentes en superconductores topológicos bidimensionales [37, 40].

En el contexto de los TSM, esta correspondencia fue utilizada por primera vez por Halperin [15] para describir los estados de borde quirales en el Efecto Hall Cuántico Entero. A su vez, el formalismo matemático que subyace ha sido edificado por numerosos autores (ver, por ejemplo, [38, 41]).

En la presente tesis, se hará uso de la *correspondencia bulk-edge* para entender la aparición de modos de Majorana a energía cero en los bordes de sistemas superconductores unidimensionales.

Superconductividad Topológica

En el campo de los sistemas topológicos, una de las principales direcciones de investigación se encuentra orientada en la detección de los modos de Majorana a energía cero (también conocidos como *Majorana Zero Modes*, MZM). Estos modos son estados presentes en los bordes o defectos topológicos del sistema y resultan altamente prometedores en el campo de la computación cuántica [26, 42].

En este capítulo se hará una introducción general sobre el fenómeno de la superconductividad, así como el modelo teórico que se utilizará como base. A continuación se presentarán ideas generales sobre los fermiones de Majorana haciendo énfasis en la importancia de sus propiedades, desde el punto de vista de la detección. Finalmente, se discutirán los modelos implementados en la presente tesis y que forman parte de las plataformas estudiadas.

3.1. Superconductividad

La superconductividad es un estado termodinámico de algunos sólidos que surge ante el enfriamiento de un sistema por debajo de una temperatura crítica T_c . Los dos mayores rasgos de dicha fase superconductoras son la repulsión de campos magnéticos externos y la existencia de un estado de resistencia cero. En 1911 Heike Kamerlingh Onnes descubrió, tres años después de alcanzar la primera licuación de helio que le permitió obtener la técnica de refrigeración necesaria para trabajar por encima de unos pocos grados Kelvin, que un metal revelaba un estado de alta conductividad (por lo tanto, de baja resistividad) por debajo de una cierta temperatura [43]. En la Figura 3.1 se puede ver cómo los valores de la resistencia del mercurio caen alrededor de una cierta temperatura, T_c .

Dicho comportamiento resultó inesperado en su momento dado que se esperaba que la conductancia desapareciera conforme la temperatura del sistema baja. Esto surgía de la idea de pensar que para temperaturas cercanas a cero (Kelvin), la energía cinética de los electrones se iría a cero. De este modo, se creía que el sistema entraría en un estado aislante o de alta resistencia, completamente contrario a lo que se observaba. Otro fenómeno que se evidenciaba en materiales expuestos por debajo de una cierta T_c

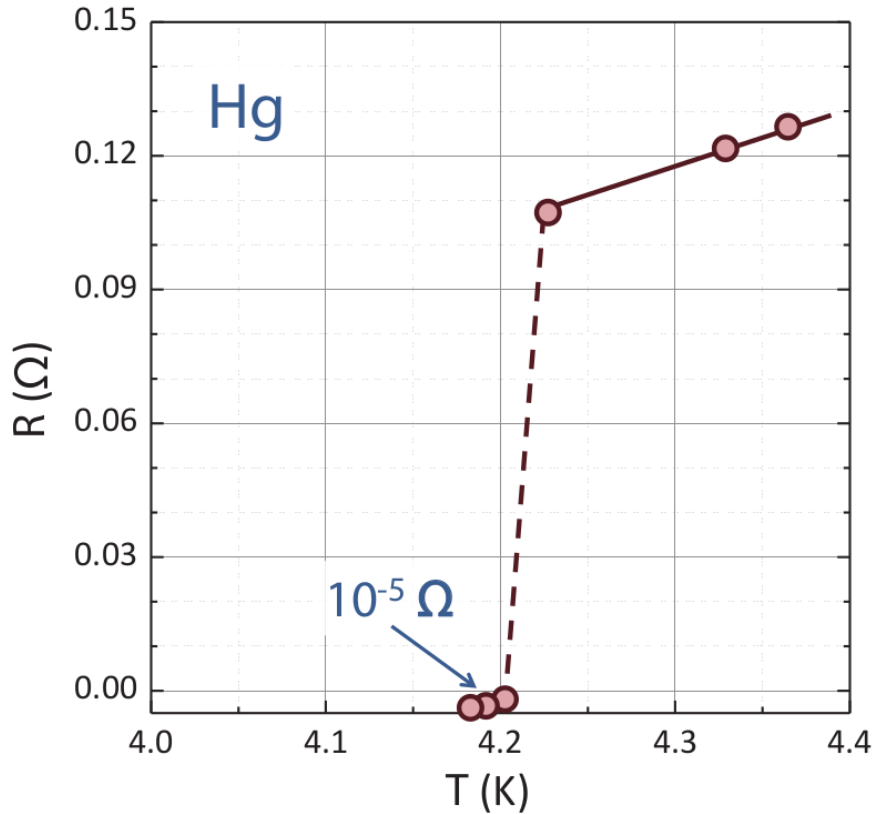


Figura 3.1: Superconductividad en Hg. Por debajo de una $T = 4,2K$, se observa una caída de la resistencia en el mercurio. Reproducido a partir de la publicación original de Onnes.

y que resultó ser una característica propia de los superconductores es lo que se conoce como efecto Meissner, y que se puede observar en la Figura 3.2. El mismo consta de una expulsión del campo magnético B cuando un sistema transiciona hacia la fase superconductora.

La expulsión del campo magnético externo no es total, sino que logra penetrar en el superconductor y se caracteriza por un parámetro llamado longitud de penetración de London, por encima del cual el campo decae exponencialmente a cero dentro del volumen del material.

Durante la década de 1950 se logró un entendimiento de lo que se conoce como superconductividad convencional¹ gracias a una serie de contribuciones remarcables: la teoría fenomenológica de Guinzburg-Landau [44] y la teoría microscópica conocida como BCS [45].

En la primera se utilizó como base la teoría de Landau para transiciones de fase de segundo orden y se lograron explicar propiedades macroscópicas de los superconductores. En particular, se predijeron los superconductores tipo I y II.

Menos de una década después, Bardeen, Cooper y Schrieffer propusieron una teoría microscópica para la superconductividad [46] en la cual explicaban que la corriente superconductora observada era un superfluido de pares de Cooper. Aún cuando el apareamiento que generan estos pares de Cooper tiene un origen cuántico, el mismo puede

¹La superconductividad no convencional está compuesta por materiales que no se ajustan a lo que explica la teoría BCS. En la presente tesis se considerarán superconductores convencionales.

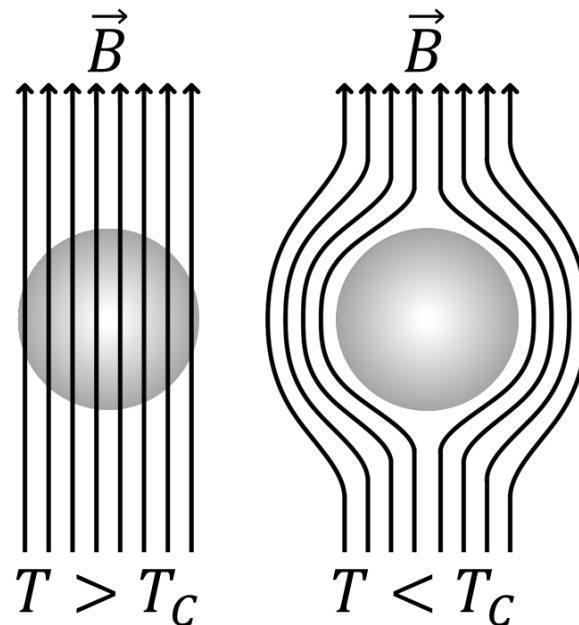


Figura 3.2: Efecto Meissner. Las líneas de campo magnético, representadas por las flechas negras, no logran atravesar un sistema que se encuentra por debajo de su temperatura crítica T_c , es decir, en la fase superconductora.

ilustrarse de manera simplificada desde un punto de vista clásico. Un electrón en un metal se comporta como una partícula libre y repele (y es repelido por) otros electrones, debido a su carga, a la vez que es atraído por los iones positivos que conforman dicho metal. Esta atracción distorsiona la estructura cristalina moviendo ligeramente los iones que la conforman al pasar los electrones. Esto incrementa la densidad de carga positiva en la vecindad de la red atrayendo otros electrones. A largas distancias, esta atracción entre electrones debido al pequeño desplazamiento de los iones supera la repulsión electrónica y causa que los pares de electrones se formen. La descripción cuántica rigurosa de los superconductores convencionales muestra que el efecto arriba mencionado es debido a la interacción electrón-fonón, con este último siendo la representación del movimiento colectivo de las cargas positivas de la red. Por otro lado, la descripción de los superconductores de alta T_c aún permanece como un problema abierto en el área.

Los pares de Cooper poseen una energía de apareamiento del orden de $10^{-3}eV$, es por eso que pueden romperse ante pequeñas perturbaciones térmicas y sólo a bajas temperaturas existe la posibilidad de encontrar un número significativo de electrones ligados de esta manera. Además, debido a que la interacción que da origen al apareamiento es de larga distancia, los electrones del par no tienen porque estar necesariamente cerca. En particular, pueden estar a cientos de nanómetros de distancia, la cual es usualmente mayor a la distancia promedio entre electrones, de manera tal de que muchos pares de Cooper pueden ocupar el mismo lugar. A su vez, dado que los electrones poseen spin $1/2$, pero el spin total de los pares de Cooper es entero (0 ó 1), es posible que múltiples pares de Cooper estén en el mismo estado cuántico, formando un condensado altamente colectivo. En este estado *condensado*, la ruptura de un par cambiará la energía de todo el condensado, no solo de un solo electrón o de un solo par. Por lo tanto, la energía requerida para romper un solo par está relacionada con la energía requerida para romper todos los pares (o más de dos electrones). Debido a que el emparejamiento aumenta esta

barrera de energía, los efectos de átomos oscilantes en el conductor (que son pequeños a temperaturas suficientemente bajas) no son suficientes para afectar el condensado como un todo, o cualquier par individual dentro del condensado. Por lo tanto, los electrones permanecen emparejados y el flujo de electrones como un todo (la corriente a través del superconductor) no experimentará resistencia. Por lo tanto, el comportamiento colectivo del condensado es un ingrediente crucial y necesario para la superconductividad.

Finalmente, la demostración de que la transición de fase era de segundo orden, junto con la explicación del efecto Meissner y de los cálculos de los calores específicos y las longitudes de penetración apareció en un artículo llamado *Theory of Superconductivity* [45]. A continuación se presentarán los rasgos principales de la teoría BCS de campo medio con la que Bardeen, Cooper y Schrieffer lograron explicar el origen microscópico de la superconductividad en los llamados *superconductores tradicionales* (*Al*, *Hg*, por ejemplo).

3.2. Teoría BCS de Campo Medio

El punto de partida será el siguiente Hamiltoniano

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow}. \quad (3.1)$$

El término con $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ se introduce al considerar que sólo electrones con energías $|\xi_{\mathbf{k}}| \lesssim \omega_D$ (frecuencia de Debye, característica de los fonones) relativas a la energía de Fermi son tenidos en cuenta. Por otro lado la inestabilidad en el mar de Fermi se debe a la dispersión (scattering) entre electrones en un estado de una partícula $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$ y $|\mathbf{k}, \downarrow\rangle$ (estados relacionados entre sí por simetría de inversión temporal). Además,

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0 & \text{para } |\xi_{\mathbf{k}}| < \omega_D \text{ y } |\xi_{\mathbf{k}'}| < \omega_D \\ 0 & \text{en el resto de los casos.} \end{cases} \quad (3.2)$$

Una aproximación de campo medio consiste en reemplazar el producto de los operadores A , B de la siguiente manera

$$AB \cong \langle A \rangle B - \langle B \rangle A + \langle A \rangle \langle B \rangle = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle), \quad (3.3)$$

es decir, de segundo orden en las derivaciones de los valores medios de A y B . Una aproximación de campo medio bien conocida es la de Hartree así como también la de Stoner, que en el caso del presente Hamiltoniano definirían $A = c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}$ y $B = c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}$. Sin embargo, Bardeen, Cooper y Schrieffer se dieron cuenta de que la superconductividad puede ser entendida si se considera $A = c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger}$ y $B = c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow}$. Esto lleva al Hamiltoniano de BCS de campo medio

$$\begin{aligned} H_{\text{BCS}} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} + c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \langle c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \rangle \langle c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} \rangle \right). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Definiendo

$$\Delta_{\mathbf{k}} := -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} \rangle \quad (3.5)$$

de manera tal de que

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* := -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (3.6)$$

La Ecuación (3.5) define el gap de energía y se relaciona con el parámetro de orden que define Guinzburg-Landau en su teoría fenomenológica[47]. Asimismo, como se puede observar en la Ecuación (3.6), esta magnitud posee una fase y un módulo que se verá que son relevantes para el presente trabajo. Es posible escribir

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger + \text{cte}. \quad (3.7)$$

La constante sólo define un corrimiento del cero de energía y, como también puede verse, $\Delta_{\mathbf{k}}$ juega el rol de un “*potencial de pairing*”. El Hamiltoniano de la Ecuación (3.7) es bilineal en c , c^\dagger , por lo que describe un sistema efectivo no-interactuante. Al mismo tiempo, contiene términos de la forma cc y $c^\dagger c^\dagger$ que no conservan el número de electrones. Aún así, el estado fundamental que se obtiene a partir de este modelo es adecuado para describir la fase superconductora.

Existen diferentes tipos de potenciales de pairing: por un lado el singlete (*singlet pairing*) en donde $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{-\mathbf{k}}$, el cual caracteriza los superconductores tipo-s y tipo-d; y por otro lado el triplete (*triplet pairing*) en donde $\Delta_{\mathbf{k}} = -\Delta_{-\mathbf{k}}$, característico de los superconductores tipo-p. Si bien la mayoría de los superconductores son tipo-s, el caso de los superconductores tipo-p será relevante más adelante, más precisamente, en la Sección 3.4. Asimismo, ambos casos aparecerán juntos en la descripción de uno de los modelos con los que se trabajó en la presente tesis (Capítulo 7).

Para diagonalizar el Hamiltoniano de la Ecuación (3.7) se pueden introducir unos nuevos operadores fermiónicos que resultan de la combinación lineal de los operadores de creación y destrucción arriba mencionados

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Este mapeo se conoce como transformación de Bogoliubov (ó Bogoliubov-Valatin), y al tener que cumplir γ y γ^\dagger las relaciones de anti-conmutación fermiónicas, se obtiene que $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$.

Es importante notar que esta transformación no es un simple cambio de base, sino que permite describir a estas excitaciones de cuasi-partículas (conocidas como *Bogoliubones* o *partículas de Bogoliubov*) como superposiciones de electrones y agujeros. Reemplazando la transformación (3.8) en la Ecuación (3.7), se obtiene

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (3.9)$$

con la relación de dispersión dada por

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}. \quad (3.10)$$

Esta expresión deja en evidencia que la superconductividad abre un gap de energía en el espectro de excitación. Es posible reformular el Hamiltoniano de BCS en la construcción

teórica denominada formalismo de Bogoliubov-de Gennes, la cual pone de manifiesto la simetría partícula-agujero (PHS) presente en el Hamiltoniano BCS [48](Ver Sección 2.12).

Este formalismo se define introduciendo los llamados *spinors de Nambu*, los cuales, en su versión más simple son

$$\Psi_k = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \Psi_k^\dagger = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k},\downarrow}). \quad (3.11)$$

Definiendo, además, el Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes

$$H_{\text{BdG}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

que permite re-escribir la Ecuación (3.7) como

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger H_{\text{BdG}} \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (3.13)$$

El objetivo de la presente sección fue mostrar el origen de la aproximación de campo medio utilizada para llegar al Hamiltoniano que aparecerá en reiteradas oportunidades en la tesis. En [47, 48] se encuentra un desarrollo minucioso del presente modelo.

Más adelante se utilizará una base de spinors de Nambu de cuatro componentes que no es más que una generalización de la presentada en la Ecuación (3.11), pero que contempla los ingredientes y grados de libertad relevantes en los modelo a considerar en las futuras secciones. Asimismo, la estructura de la transformación (3.8) aparecerá nuevamente en el presente trabajo y será fundamental en el entendimiento de los modelos que se presentarán.

3.3. Introducción a Modos de Majorana a Energía Cero

La ecuación de Dirac [49] describe fermiones de spin 1/2. Su solución pertenece al plano complejo y las componentes de, por ejemplo, electrones y positrones se encuentran relacionados a través del operador de conjugación de carga de manera tal que, $\psi_C = \mathcal{C}\psi$.

Ettore Majorana notó que, para cierta elección de las matrices de Dirac², la ecuación de Dirac admite soluciones reales tales que $\psi = \psi_C$ [51]. Dicha solución se conoce actualmente como *fermión de Majorana* y poseen dos características que los hacen a la vez interesantes y singulares: poseen carga neutra y son su propia anti-partícula.

En el campo de la física de la materia condensada, las partículas fermiónicas son electrones, los cuales, como es sabido, son fermiones de Dirac. No obstante lo cual, los fermiones de Majorana pueden emerger como cuasi-partículas en cierto tipo de sistemas de muchos cuerpos. El concepto de cuasi-partícula no resulta novedoso; como ejemplos bien conocidos se pueden nombrar a los fonones, los magnones, los plasmones³, presentes

²De hecho, esto mismo había sido estudiado por Eddington [50], pero sin la interpretación de las partículas siendo sus propias anti-partículas.

³En materia condensada, el electrón mismo es una cuasi-partícula dado que su masa está renormalizada por interacciones.

en gran parte de las descripciones de sistemas tradicionales de materia condensada, en donde su tratamiento no posee una distinción respecto de las partículas elementales, sin importar su nivel de *realismo*. Los Bogoliubones, que son las cuasi-partículas cuya descripción aparece en el contexto de la superconductividad (ver Sección 3.2) y cumplen con la propiedad de ser fermiones de Majorana puesto que, como se vió en la Ecuación (3.8), son combinaciones de partículas y huecos.

En lo que sigue, se desarrollará esta idea a partir del formalismo de segunda cuantización, dentro del cual es posible dividir al operador de creación fermiónico, c_j^\dagger , y al operador de aniquilación, c_j , en dos operadores reales⁴, etiquetados A y B , de acuerdo con

$$\left. \begin{aligned} c_j &= (\gamma_{A,j} + i\gamma_{B,j})/2 \\ c_j^\dagger &= (\gamma_{A,j} - i\gamma_{B,j})/2 \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{cases} \gamma_{A,j} = c_j + c_j^\dagger, \\ \gamma_{B,j} = -ic_j + ic_j^\dagger \end{cases} \quad (3.14)$$

Con las relaciones canónicas de anti-conmutación para fermiones de la Ecuación (2.2), se desprende que los operadores de Majorana deben satisfacer

$$\gamma_{A(B),j} = \gamma_{A(B),j}^\dagger, \quad \{\gamma_{A,i}, \gamma_{B,j}\} = 2\delta_{AB}\delta_{i,j}. \quad (3.15)$$

El hecho de que el operador sea igual a su conjugado implica que las cuasi-partículas creadas por dichos operadores son sus propias anti-partículas. Estos operadores γ son los que describen a los fermiones de Majorana.

Hasta aquí, la re-escritura presentada en la Ecuación (3.14) es tan solo una transformación unitaria que permite otra representación de los grados de libertad de los electrones en donde los mismos son expresados por dos fermiones de Majorana. En principio, esta transformación no resultaría de interés dado que, en lugar de un electrón, se tienen dos Majoranas ligados. Aún así, es interesante preguntarse si existen sistemas físicos en los cuales dos fermiones de Majorana (que constituyen un electrón) estén espacialmente separados y puedan ser manipulados y observados independientemente.

De hecho, el término a la derecha de la Ecuación (3.14) sugiere que un potencial escenario en el cual encontrar a los Majoranas es aquel en donde se tienen superconductores, en los cuales las excitaciones de cuasi-partículas son superposiciones de electrones y agujeros (*Bogoliubones* o *partículas de Bogoliubov*) cuya carga eléctrica, debido a la presencia de pares de Cooper en el condensado, vale $2e$. Como consecuencia de esto, es posible trazar una analogía entre los Bogoliubones y los fermiones de Majorana [52–54]. En este sentido, la evidencia experimental existente (y el formalismo subyacente) resulta prometedora como punto de partida para experiencias en donde emerjan fermiones de Majorana en superconductores.

Asimismo, existe un fenómeno altamente interesante que puede ocurrir: los Bogoliubones pueden estar ligados a defectos topológicos de los sistemas, como por ejemplo vórtices o a los bordes mismos del sistema [55, 56]. Debido a la PHS, esos estados ligados tienen que aparecer de a pares, incluso con la posibilidad de que exista un estado no apareado con energía cero⁵. Estos estados de cuasi-partícula son conocidos como *estados de Majorana a energía cero* (MZM), o *estado ligado de Majorana* (MBS por las siglas en inglés de *Majorana bound state*), o simplemente, *Majoranas*; y se conoce a los superconductores en los cuales se manifiestan los mencionados estados, como *superconductores*

⁴Similar a la posibilidad de escribir a un número complejo en términos de dos números reales

⁵El espectro de un superconductor debe tener un número par de autoestados, aún cuando dichos estados se encuentren separados espacialmente.

topológicos. Los MZM resultan sumamente interesantes debido a su estadística, por la que reciben la etiqueta de aniones no-abelianos. Es importante destacar la diferencia existente entre los MZM y la interpretación general de los fermiones de Majorana como cuasi-partículas de Bogoliubov.

Para entender en qué tipo de superconductores pueden manifestarse MZM, se necesita tener en cuenta los operadores que crean cuasi-partículas en un superconductor del tipo-s (*s-wave*). El mismo tendrá la forma $b = uc_{\uparrow}^{\dagger} + vc_{\downarrow}$, donde u y v son las amplitudes de los electrones y los agujeros respectivamente y los operadores c^{\dagger} y c crean y destruyen electrones y agujeros con determinada proyección de spin. La existencia de cuasi-partículas con energía cero y sin carga requiere que las amplitudes de electrones y agujeros sean iguales, $v = u^*$, así como sus proyecciones de spin. Esto indica que tiene que haber algo diferente al apareamiento tipo-s. Si en cambio se consideran superconductores tipo-p, es posible la aparición de MZM, como se verá más adelante.

3.4. La Cadena de Kitaev

En un paper revolucionario del año 2001 [25], Alexei Kitaev llamó la atención sobre la potencialidad de los MZM discutiendo un modelo teórico el cual puede ser resuelto de manera exacta en el que surgen MZM deslocalizados. El Hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \left[-t(c_j^{\dagger}c_{j+1} + c_{j+1}^{\dagger}c_j) + \Delta c_j c_{j+1} + \Delta^* c_{j+1}^{\dagger} c_j^{\dagger} - \mu(c_j^{\dagger}c_j - \frac{1}{2}) \right]. \quad (3.16)$$

Dicho modelo describe una cadena uni-dimensional con $N \gg 1$ sitios (por simplicidad, se considerará que la constante de red vale 1), que pueden estar ocupados o desocupados con fermiones sin spin⁶. Los operadores c_j^{\dagger} y c_j crean y destruyen fermiones en el sitio j , respectivamente. Asimismo, verifican las relaciones de anti-conmutación de la Ecuación (2.2).

La amplitud del acoplamiento (*hopping*) entre primeros vecinos es t , μ es el potencial químico y $\Delta = |\Delta|e^{i\theta}$ es el parámetro de orden superconductor (o potencial de pairing). En el Hamiltoniano de la Ecuación (3.16), dicho parámetro de orden se observa que está acompañado del producto de dos operadores de creación o destrucción actuando en sitios vecinos. Como se verá a continuación, estos ingredientes desembocan en un modelo superconductor de los que se conocen como *tipo-p* (también conocido como *p-wave*). En el presente caso, si se considera un sistema de fermiones sin spin (*spin-less*), el caso con parámetro de orden del *tipo-s* (*s-wave*) no es posible por el principio de exclusión de Pauli: $(c_j)^2 = (c_j^{\dagger})^2 = 0$.

Es importante notar, además, que al ser el Hamiltoniano (3.16) equivalente al de la teoría BCS, Ecuación (3.7), el mismo no conmuta con el operador número total $N_F = \sum_{j=1}^N c_j^{\dagger}c_j$ y, luego, el número total de fermiones no se conserva, al igual que en el caso BCS. De todas formas, dicho Hamiltoniano sí conmuta con el operador paridad $P = (-1)^{N_F}$, por lo tanto, dicha magnitud es una cantidad conservada.

Para poder visualizar la aparición de los MZM en el modelo de Kitaev, es importante re-escribir el operador fermiónico de cada sitio en términos de dos operadores de

⁶Se puede pensar que todos los fermiones de la cadena tienen su spin polarizado

Majorana reales (Majoranas, de aquí en adelante), 1 y 2

$$\left. \begin{aligned} c_j &= e^{-i\theta/2}(\gamma_{1,j} + i\gamma_{2,j})/2 \\ c_j^\dagger &= e^{i\theta/2}(\gamma_{1,j} - i\gamma_{2,j})/2 \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \begin{cases} \gamma_{1,j} = e^{i\theta/2}c_j + e^{-i\theta/2}c_j^\dagger, \\ \gamma_{2,j} = -ie^{i\theta/2}c_j + ie^{-i\theta/2}c_j^\dagger \end{cases} \quad (3.17)$$

de manera tal de que la fase superconductor θ puede ser, en efecto, removida. A partir de esta re-escritura de los operadores fermiónicos (similar a la realizada en (3.14)), el Hamiltoniano (3.16) se transforma en

$$\mathcal{H} = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^N [\mu\gamma_{1,j}\gamma_{2,j} + (|\Delta| + t)\gamma_{2,j}\gamma_{1,j+1} + (|\Delta| - t)\gamma_{1,j}\gamma_{2,j+1}]. \quad (3.18)$$

En esta nueva base (de Majorana), el comportamiento interesante del modelo surge en los siguientes límites:

- (a) el *trivial*, en donde $|\Delta| = t = 0$ y $\mu \neq 0$. Para este caso, el Hamiltoniano (3.18) se convierte en

$$\mathcal{H} = \frac{i\mu}{2} \sum_{j=1}^N \gamma_{1,j}\gamma_{2,j} = |\mu| \sum_{j=1}^N \left[c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right]. \quad (3.19)$$

En estas condiciones, los operadores de Majorana del mismo sitio se encuentran apareados entre sí, como se puede observar en la Figura 3.3(a). Luego, el sistema no posee estados a energía cero y el bulk está gapeado.

- (b) El límite topológico, en donde $|\Delta| = t$ y $\mu = 0$. En este caso,

$$\mathcal{H} = it \sum_{j=1}^{N-1} \gamma_{2,j}\gamma_{1,j+1} = 2t \sum_{j=1}^{N-1} \left[\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j - \frac{1}{2} \right]. \quad (3.20)$$

En la segunda igualdad se define un nuevo conjunto de operadores fermiónicos $\hat{c}_j = \frac{1}{2}(\gamma_{2,j} + i\gamma_{1,j+1})$. Con esta elección de parámetros, los operadores de Majorana se acoplan entre primeros vecinos, como se puede observar en la Figura 3.3(b).

Es fundamental detenerse en la expresión (3.20) y notar que en la misma no aparecen explícitamente los operadores $\gamma_{1,1}$ y $\gamma_{2,N}$. Ambos pueden combinarse en un mismo operador fermiónico $f = \frac{1}{2}(\gamma_{1,1} + i\gamma_{2,N})$ el cual tiene energía nula (es un término ausente en el Hamiltoniano), altamente no local, dado que ambos operadores se encuentran en los extremos del sistema, y dan lugar a un estado fundamental con doble degeneración. En contraste con un superconductor *normal*, en donde el estado fundamental es no-degenerado y consiste en una superposición de estados con una cantidad par de partículas (un condensado de pares de Cooper), el Hamiltoniano (3.16) permite un número impar de cuasi-partículas a energía cero. De esta manera, el estado fundamental resulta doblemente degenerado al poder tener en total un número par o impar de electrones en el superconductor. Este comportamiento en la paridad corresponde al autovalor del operador número del fermión a cero energía, $N_f = f^\dagger f = 0(1)$ para el caso con paridad par (impar).

La existencia de estados fermiónicos no-locales o, dicho de otra forma, la presencia de dos MZM separados espacialmente se extiende para todo el rango de parámetros

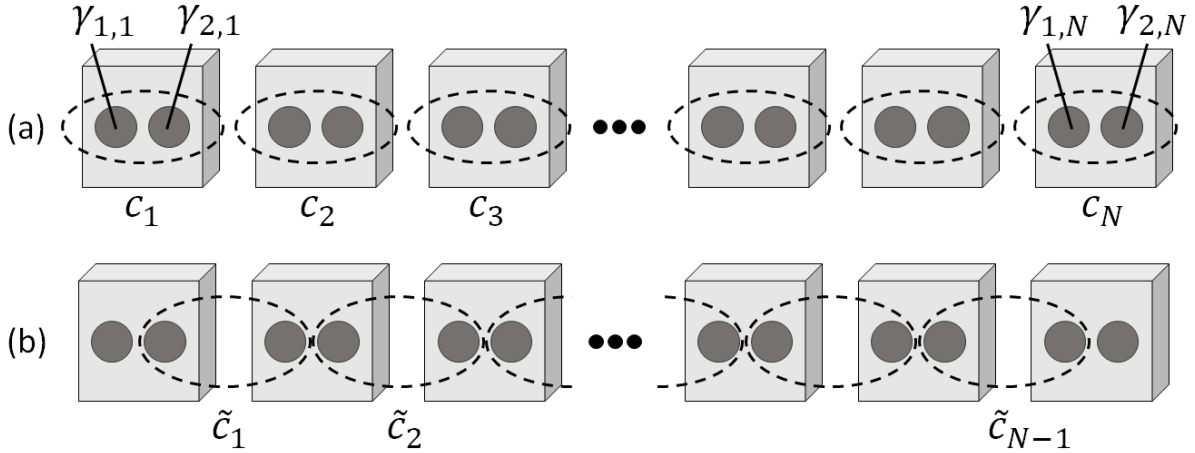


Figura 3.3: Esquema de la cadena Kitaev unidimensional. Panel superior: los operadores fermiónicos de cada sitio i pueden re-escribirse en términos de dos operadores de Majorana $\gamma_{1,i}$ y $\gamma_{2,i}$. Panel inferior: En el límite $\mu = 0$, $t = \Delta$, el Hamiltoniano es diagonal para los operadores fermiónicos al combinar operadores de Majorana de sitios vecinos $\gamma_{1,i+1}$ y $\gamma_{2,i}$. Esto deja dos operadores Majoranas desacoplados $\gamma_{1,1}$ y $\gamma_{2,N}$ los cuales pueden combinarse y formar un estado a energía cero, no local representado por un operador fermiónico f .

en donde $|\mu| < 2t$, como se puede ver en la Figura 3.4(a). La transición hacia la fase trivial, $|\mu| > 2t$, viene acompañada de un cierre del gap en $\mu = \pm 2t$. Asimismo, como se puede apreciar en la Figura 3.4(b), las funciones de onda correspondientes a los estados de borde decaen exponencialmente como $e^{-x/\xi}$ para el caso izquierdo y como $e^{-|x-L|/\xi}$ para el derecho, donde ξ es la longitud de coherencia superconductora y x un punto determinado del sistema del longitud L .

Asimismo, las funciones de onda correspondientes a los estados de borde pueden superponerse para sistemas finitos no lo suficientemente largos. Resulta inmediato notar, entonces, que para sistemas lo suficientemente grandes en una determinada dirección (por ejemplo, para sistemas unidimensionales suficientemente largos), la superposición es despreciable y los estados de borde permanecen a energía cero.

A modo de resumen, el comportamiento del sistema bajo los dos límites antes mencionados implica la existencia de dos regiones separadas en el espacio de parámetros (Ver Figura 2.1(b)). Una de estas regiones, la fase topológica, posee MZM exponencialmente localizados en los bordes del sistema, mientras que en la otra región, fase trivial, el sistema no posee dicho comportamiento.

3.5. Superconductividad Topológica en Sistemas Reales Unidimensionales

Mientras el modelo de Kitaev, Ecuación (3.16), es sin dudas importante desde el punto de vista conceptual, no deja de ser un modelo de juguete. Cabe preguntarse, entonces, en qué tipo de sistemas físicos reales podrían observarse los modos de Majorana a energía cero (MZM). En ese sentido, los principales candidatos para la aparición de dicho comportamiento son los superconductores topológicos sintéticos en los cuales se combinan sistemas bien conocidos como aislantes topológicos, superconductores tipo-s, o

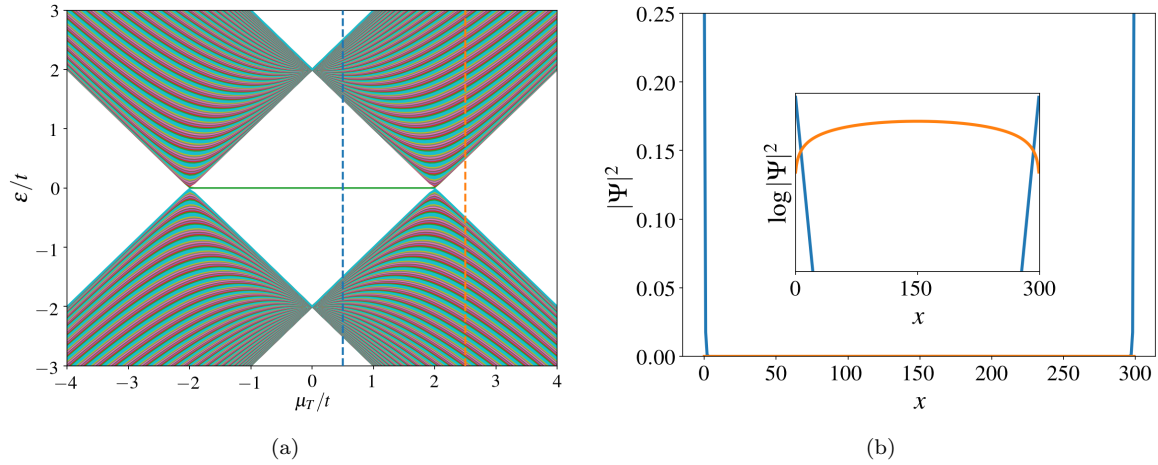


Figura 3.4: (a) Espectro de energía de una cadena de Kitaev en función del potencial químico μ . Las líneas punteadas verticales azul y naranja corresponden a la elección de parámetros elegidos para la fase topológica y trivial, respectivamente, que se observan en la Figura de la derecha. El gap de energía se cierra para $\mu = \pm 2t$. (b) Estados de baja energía de la misma cadena. En azul el caso para el sistema en la fase topológica (línea punteada en azul en (a)), mientras que en naranja se ve el comportamiento para el caso en que el sistema se encuentra en la fase trivial (línea punteada en naranja en (a)). Inset: Estados de baja energía en escala logarítmica, demostrando la naturaleza exponencial de los estados de borde no-triviales.

también ferromagnetos. Las ideas pioneras en este sentido fueron de Fu y Kane, [57, 58], quienes mostraron que es posible obtener un superconductor topológico, así como utilizar esa plataforma para detectar MZM combinando los bordes de un aislante topológico con un superconductor del tipo-s. Posteriormente, surgieron alternativas experimentales no sólo más simples, sino más accesibles que reemplazaron al aislante topológico con materiales como semiconductores o sistemas magnéticos.

En el camino hacia la realización de este tipo de sistemas, existen distintas direcciones: por un lado sistemas (cadenas) con impurezas magnéticas sobre estructuras superconductoras [59–62], y por otro lado los sistemas formados por nanocables superconductores con acoplamiento spin-órbita fuerte en presencia de campos magnéticos externos [63, 64]. En la presente tesis, el trabajo se centrará en el estudio de configuraciones con estas últimas características, así como aquellos en donde la topología también se manifiesta en presencia de la conservación de la simetría de inversión temporal.

Ahora bien, para llevar a cabo experimentalmente un sistema análogo a la cadena de Kitaev, existen dos ingredientes básicos que deben ser satisfechos:

- (I) el electrón debe ser, de modo efectivo, *spinless* (es decir, no debe tener spin)⁷;
- (II) superconductividad tipo-p.

Se podría pensar que con la aplicación de un campo magnético que dé lugar a un efecto Zeeman que genere una polarización de spin, y tomando un potencial químico entre ambas bandas polarizadas, sería suficiente para obtener un régimen en el que el sistema sea *spinless* (ver Figura 3.5(a)). Desafortunadamente, en este caso sería difícil inducir

⁷Se puede pensar, en ese sentido, que la mitad de los grados de libertad de spin del sistema están congelados

superconductividad en el sistema dado que la misma, en el caso de la superconductividad tipo-s⁸, corresponde a un pairing entre electrones de distinto spin.

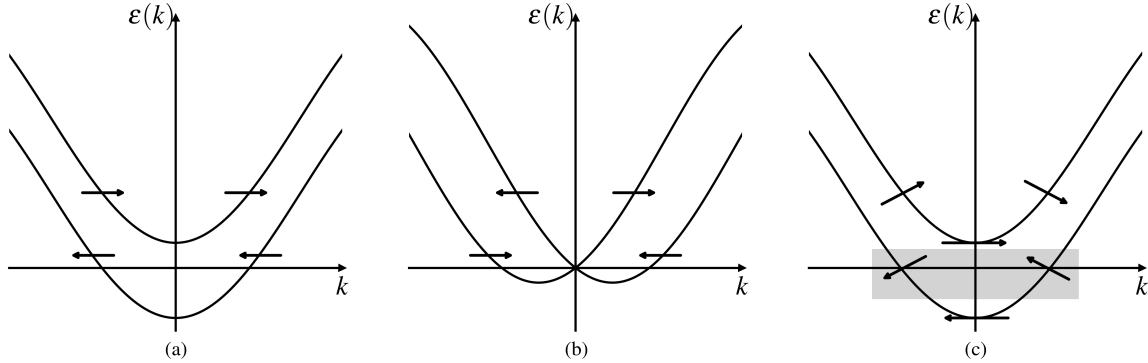


Figura 3.5: Esquema del espectro de energía de un sistema unidimensional con dispersión parabólica y polarización de spin indicada en flechas negras. (a) El efecto de un campo magnético que polariza las dos bandas. (b) el acoplamiento de spin órbita de Rashba separa las dos bandas degeneradas en spin en dos ramas. (c) La combinación de un acoplamiento de spin-órbita de Rashba y un campo magnético perpendicular genera una polarización de spin parcial de las bandas. Si el valor potencial químico se ubica entre estas bandas, más precisamente en la zona rectangular indicada, el efecto proximidad inducirá superconductividad del tipo-p en el nanocable.

Si en cambio, se tiene en cuenta el acoplamiento spin-órbita de Rashba (ver Apéndice A), es posible fijar la polarización de spin del electrón con la dirección del movimiento. Como se muestra en la Figura 3.5(b), el acoplamiento spin-órbita en efecto separa las bandas de spin degeneradas en dos ramas en las cuales el spin se encuentra polarizado de manera perpendicular a la dirección del cable. Si sobre dicha configuración se aplica un campo magnético perpendicular a la dirección de polarización, las dos bandas se separarán en energía y con un potencial químico seleccionado entre ambas bandas (Ver Figura 3.5(c)), la mitad de los grados de libertad estarían inactivos. El punto crucial a continuación es que los spines cerca del nivel de Fermi (en donde sucede el apareamiento superconductor) inducen un apareamiento tipo-p al ser todos paralelos. Ajustando el valor del campo magnético de manera adecuada, es posible obtener como resultado un superconductor topológico efectivo tipo-p.

Finalmente, es importante remarcar que no se conocen materiales que posean esta fase superconductor. Aún así, es posible inducir superconductividad en sistemas con spin-órbita grande al ponerlos en contacto con un superconductor con el que se hibridiza fuertemente. Esto se conoce como efecto proximidad.

3.6. Superconductor Topológico en la Red

En el año 2010, se propuso un modelo para cables cuánticos el cual incluía los componentes mínimos necesarios para emular un sistema fermiónico sin spin como el discutido en la sección anterior [63, 64]. En dicho modelo se considera un sistema unidimensional con acoplamiento spin-órbita de Rashba y un campo de Zeeman B , acoplado por

⁸Los superconductores más comunes utilizados en la realización de estas plataformas (Al , Nb , Pb , Sn) poseen apareamiento tipo-s. Luego, al no tener una dependencia con el momento, se trata de un apareamiento local en el espacio.

proximidad a un superconductor tipo-s con parámetro de pairing Δ . El Hamiltoniano propuesto es

$$H = \left(\frac{p^2}{2m} + up\sigma_x - \mu \right) \tau_z - B\sigma_z + \Delta\tau_x \quad (3.21)$$

donde u denota la fuerza del acoplamiento de spin-órbita de Rashba, m la masa efectiva del electrón y μ es el potencial químico. $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli en el espacio spin, mientras que $\vec{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ son las matrices de Pauli que actúan en el espacio de partícula-agujero. El campo de spin-órbita se considera en la dirección \hat{x} y es perpendicular al campo de Zeeman que se toma en la dirección \hat{z} . En [64] se muestra que cables con acoplamiento spin-órbita fuerte en proximidad con un superconductor poseen estados helicoidales efectivos. Asimismo, proponen que configurando el gap superconductor Δ , el campo de Zeeman B o el potencial químico μ , estados con fermiones de Majorana pueden crearse y ser detectados experimentalmente.

En el Capítulo 7 se estudiará un modelo con los ingredientes presentes en el Hamiltoniano (3.21), pero formulado en una red. Dicha descripción en la red resulta conveniente para la implementación de las funciones de Green a partir de las cuales se describen los fenómenos de transporte de interés en el presente trabajo.

El Hamiltoniano correspondiente, en la base de Nambu $\mathbf{c}_k = (c_{k,\uparrow}, c_{k,\downarrow}, c_{-k,\downarrow}^\dagger, -c_{-k,\uparrow}^\dagger)^T$, será

$$H_S = \frac{1}{2} \sum_k \mathbf{c}_k^\dagger \mathcal{H}_k \mathbf{c}_k, \quad (3.22)$$

donde \mathcal{H}_k , el Hamiltoniano de Bogoliubov-de-Gennes (BdG), está dado por

$$\mathcal{H}_k = \tau^z \otimes [\xi_k \sigma^0 - \lambda_k \vec{n}_\lambda \cdot \vec{\sigma}] - B\tau^0 \otimes \vec{n}_B \cdot \vec{\sigma} + \Delta\tau^x \otimes \sigma^0. \quad (3.23)$$

σ^0 y τ^0 son las matrices unitarias de 2×2 en los subespacios de spin y partícula-agujero, respectivamente. $\xi_k = -2t \cos(ka) - \mu$ es la relación de dispersión relativa al potencial químico μ , y t el parámetro de acoplamiento entre primeros vecinos. La constante de la red es a , mientras que $\lambda_k = 2\lambda \sin(ka)$ es la amplitud del acoplamiento spin-órbita orientado en la dirección \vec{n}_λ . Los otros parámetros del Hamiltoniano de la Ecuación (3.23) son: la magnitud del campo magnético orientado según \vec{n}_B , que introduce una separación Zeeman de amplitud B ; y un potencial de pairing Δ . Como se verá en el Capítulo 7, la fase topológica en este modelo existirá para ciertos valores de los parámetros, así como para un rango de valores de las orientaciones relativas entre los vectores spin-órbita y campo magnético.

3.7. Superconductores Topológicos con Simetría de Inversión Temporal (TRITOPS)

Como se ha visto al principio de la presente tesis, tener en cuenta las simetrías presentes en el sistema, puede abrir las puertas a una rica variedad de fases topológicas [32–34, 65]. Al igual que en el QHE, estas fases poseen modos de borde en donde el gap se cierra y se encuentran fuertemente ligadas a la naturaleza topológica del bulk y protegidos por la presencia de ciertas simetrías del sistema (ver Sección 2.5). El caso paradigmático para ilustrar lo arriba mencionado es el aislante topológico (*TI* por las siglas en inglés de *topological insulator*) el cual en el ejemplo bidimensional puede ser

pensado como dos copias del QHE para el caso en que hay simetría de inversión temporal (TRS). Los estados de borde *gapless* en este caso son helicoidales (en lugar de quirales) y los mismos se encuentran protegidos por la presencia de la TRS (Ver Figura 3.6(a)).

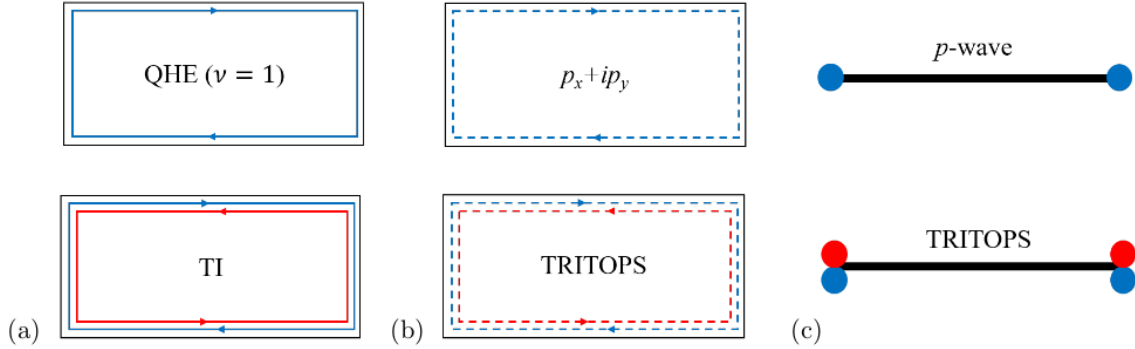


Figura 3.6: (a) Descripción esquemática del Efecto Hall Cuántico entero y su versión con simetría de inversión temporal; el aislante topológico (TI). Para el factor de llenado $\nu = 1$, el QHE entero posee estados de borde quirales. El aislante topológico puede pensarse como la composición de dos copias en la fase Hall relacionadas entre sí por la simetría de inversión temporal (TRS). Como consecuencia, el TI posee modos helicoidales contra-propagantes. (b) Un superconductor topológico del tipo $p_x + ip_y$ con TRS rota y su versión con simetría de inversión temporal - el TRITOPS - en dos dimensiones. Cada superconductor $p_x + ip_y$ posee estados con cierta quiralidad que se convertirán en modos de Majorana (línea punteada). Luego, la fase TRITOPS equivale a dos copias del superconductor $p_x + ip_y$ (vinculadas por la simetría de inversión temporal) con modos de Majorana contra-propagantes y protegidos por la TRS. (c) Superconductor topológico con TRS rota y TRITOPS en una dimensión. Los modos de borde protegidos topológicamente son estados ligados de Majorana a energía cero. En la fase TRITOPS estos modos aparecen de a pares (pares de Majorana Kramers).

Los superconductores topológicos pertenecientes a la clase D (ver Sección 2.4) existen en una y dos dimensiones y si bien no poseen TRS, sí tienen simetría de partícula-agujero (PHS).

La cadena de Kitaev (Sección 3.4) así como el modelo introducido en la Sección 3.6, están basados en ingredientes que rompen la TRS. Asimismo, existe otra familia, los superconductores topológicos con simetría de inversión temporal (TRITOPS por las siglas en inglés de *time-reversal invariant topological superconductors*) que pertenecen a la clase DIII (ver Tabla 2.1) y poseen excitaciones a energía cero que aparecen como pares de Kramers⁹. Si bien al momento no hay realizaciones experimentales concretas de este tipo de estados topológicos, estas configuraciones recibieron mucha atención desde el punto de vista teórico en los últimos años [34, 65–79]. Una característica interesante de estos estados de borde es que poseen proyecciones de spin fraccionarias[71], propiedad que puede resultar relevante para su detección [80–83].

En los TRITOPS la inversión temporal protege a los pares de Majoranas de la hibridación permitiendo que dichos estados permanezcan a energía cero. De manera similar, el spin fraccionario se encuentra topológicamente protegido y no puede ser determinado a partir de mediciones locales sin la ruptura de la mencionada simetría de inversión temporal.

⁹Recordar que el teorema de Kramers postula que en presencia de TRS, todos los estados de energía del sistema estarán doblemente degenerados.

3.7.1. Modelo Mínimo de Baja Energía

Resulta instructivo introducir el modelo de baja energía más simple que describe la fase TRITOPS. Este modelo servirá, en primer lugar, como plataforma para examinar de manera genérica las propiedades de la fase, como por ejemplo, sus bordes. En segundo lugar, los grados de libertad de los diversos modelos de TRITOPS, podrán ser descriptos de manera más simple, gracias a la versión minimalista del presente modelo. El Hamiltoniano en cuestión en una dimensión (1D) está dado por

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_\Delta, \\
 H_0 &= -i \int dx \left\{ v_+ \left[\psi_{R,\uparrow}^\dagger(x) \partial_x \psi_{R,\uparrow}(x) - \psi_{L,\downarrow}^\dagger(x) \psi_{L,\downarrow}(x) \right] \right. \\
 &\quad \left. + v_- \left[\psi_{R,\downarrow}^\dagger(x) \partial_x \psi_{R,\downarrow}(x) - \psi_{L,\uparrow}^\dagger(x) \psi_{L,\uparrow}(x) \right] \right\}, \\
 H_\Delta &= \int dx \left[\Delta_+ \psi_{R,\uparrow}^\dagger(x) \psi_{L,\downarrow}^\dagger(x) + \Delta_- \psi_{L,\uparrow}^\dagger(x) \psi_{R,\downarrow}^\dagger(x) + h.c. \right] \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

con $\psi_{R,s}$ ($\psi_{L,s}$) el operador de aniquilación para los fermiones con spin s que se mueven hacia la derecha (izquierda). En este caso, Δ_+ y Δ_- son los dos potenciales de apareamiento inducidos. Los subíndices denotan apareamiento entre modos de helicidad positiva (Δ_+), $\psi_{R,\uparrow}$ y $\psi_{L,\downarrow}$, y los modos con helicidad negativa (Δ_-), $\psi_{L,\uparrow}$ y $\psi_{R,\downarrow}$ ¹⁰. De manera similar, v_\pm son las velocidades de los modos con helicidades positivas y negativas, respectivamente. La dispersión del Hamiltoniano H_0 se puede observar en la Figura 3.7.

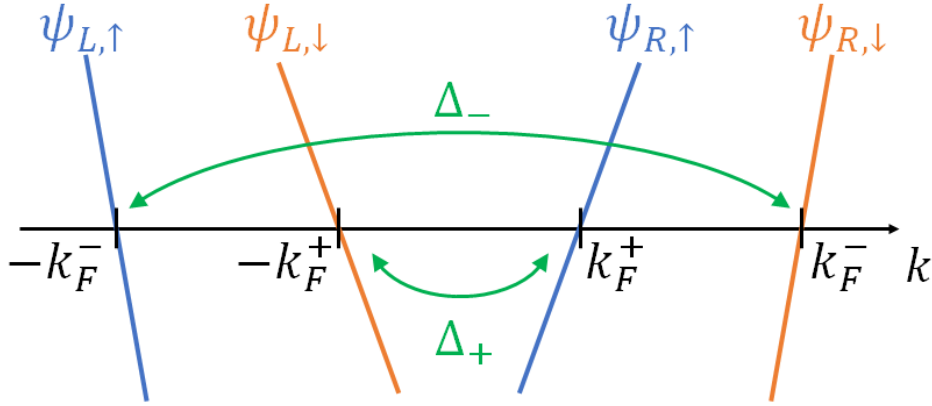


Figura 3.7: Relación de dispersión para el Hamiltoniano unidimensional H_0 de la Ecuación (3.24). El mismo posee dos modos que se mueven hacia la derecha y dos modos que se mueven a la izquierda. El Hamiltoniano H_Δ describe la superconductividad inducida. El parámetro Δ_+ acopla modos con helicidad positiva mientras que Δ_- los modos con helicidad negativa.

El interés particular, en este caso, es en sistemas que obedecen la simetría de inversión temporal. Para ello, se define el operador \mathbb{T} a partir de cómo actúa en los operadores arriba definidos (ver Sección 2.3):

¹⁰Es importante notar que los índices que identifican el spin, $s = \uparrow, \downarrow$ no resultan, en este caso, relevantes. En la explicación antes realizada, se podría optar por considerar un modelo con modos $\psi_{R,1}(x), \psi_{R,2}(x)$ y sus correspondientes pares vinculados por la inversión temporal, $\psi_{L,2}(x), \psi_{L,1}(x)$, respectivamente. Con el significado físico de la helicidad ausente, es posible referirse a $\psi_{R,1}$ y $\psi_{L,2}$ como los casos con helicidad positiva, mientras que $\psi_{R,2}$ y $\psi_{L,1}$ como los de helicidad negativa o bien al revés.

$$\mathbb{T}\psi_{R,s}\mathbb{T}^{-1} = i\sigma_{s,s'}^y\psi_{L,s'} \quad ; \quad \mathbb{T}\psi_{L,s}\mathbb{T}^{-1} = i\sigma_{s,s'}^y\psi_{R,s'} \quad ; \quad \mathbb{T}i\mathbb{T} = -i, \quad (3.25)$$

donde $\{\sigma^i\}_{i=x,y,z}$ es el conjunto de matrices de Pauli. La TRS invierte la propagación de las partículas así como el spin de las mismas. La última identidad de la Ecuación (3.25) implica que \mathbb{T} es una transformación anti-unitaria que toma números complejos y devuelve su complejo conjugado. La imposición de que H obedezca TRS, $\mathbb{T}H\mathbb{T}^{-1} = H$, exige que tanto Δ_+ como Δ_- sean reales.

Dado que la TRS que obedece H cumple con (2.14), el sistema pertenece a la clase de simetría conocida como DIII (ver Tabla 2.1). Como se vió en el capítulo anterior, esta clase determina el número de fases topológicas distintas en las que puede estar dicho sistema físico. Para el caso de Hamiltonianos unidimensionales de la clase DIII, el invariante será el \mathbb{Z}_2 , y las fases topológicas presentes en el sistema se distinguen físicamente por la presencia (o ausencia) de estados de borde protegidos a energía cero, conocidos como pares de Majorana Kramers.

Finalmente, dado que Δ_+ y Δ_- son reales, su signo puede cambiar sólo si se hacen cero, es decir, si el gap se cierra. De esta manera, es posible definir un invariante topológico para este Hamiltoniano [84]

$$\nu = \text{sgn}(\Delta_+)\text{sgn}(\Delta_-), \quad (3.26)$$

que toma el valor 1 cuando el sistema se encuentra en la fase no-topológica y -1 cuando se encuentra en la fase topológica.

En el Capítulo 6 se trabajará con modelos definidos en una red que describen TRITOPS. En el marco del análisis de la corriente Josephson, se hará uso de las propiedades que poseen los TRITOPS y se buscarán los mecanismos relevantes a tener en cuenta en realizaciones experimentales.

Fenómenos de Transporte en Heteroestructuras Unidimensionales

Los estados topológicos de la materia han sido un tópico de interés en distintas áreas de la física. Desde la comunidad de sólidos, hasta la de átomos fríos, pasando por fotónica, se encuentran contribuyendo al estudio y entendimiento de estas propiedades presentes en la naturaleza.

En los capítulos anteriores se introdujeron los conceptos e ingredientes fundamentales para comprender el origen de los mismos y su conexión con las distintas simetrías presentes en los sistemas físicos de interés. Asimismo, se presentaron los conceptos básicos necesarios para el entendimiento y clasificación de las configuraciones a estudiar.

En el presente capítulo se explicarán los fenómenos de transporte a través de los cuales se busca entender y detectar experimentalmente la existencia de transiciones de fase topológicas. Se hará una breve introducción de los mismos para luego profundizar en los mecanismos involucrados que explican la física asociada así como los fenómenos emergentes y los modelos a través de los cuales se realizan los estudios.

4.1. Origen Microscópico de la Corriente y la Conductancia

Una de las mayores dificultades en la detección de los MZM se debe a la nula carga eléctrica y a la falta de momento magnético de estas cuasi-partículas. Esto hace, en consecuencia, que no se acoplen *directamente* con campos eléctricos o magnéticos externos. Aún así, electrones cargados tienen la capacidad de tunelear en sistemas con superconductividad topológica para terminar acoplándose con estos MZM. El mecanismo clave presente en este escenario es lo que se conoce como reflexión de Andreev. A continuación, haciendo uso de ejemplos, se discutirán las distintas plataformas experimentales utilizadas en la detección de los Majoranas.

Para introducir los mecanismos microscópicos que explican el origen de la corriente y la conductancia se tomará como caso testigo la más simple de las juntas directas:

Normal-Superconductor (NS). Se buscará entender los mecanismos fundamentales en el transporte eléctrico analizando los mismos cuando el superconductor se encuentra tanto en la fase trivial así como en la topológica.

Sea una junta Normal-Superconductor sin impurezas. Ambas partes del sistema se encuentran empalmadas, como se indica en la Figura 4.1. Se establece una diferencia de potencial a lo largo de la junta y se supone que dicha diferencia de potencial es pequeña en comparación con el gap de energía, $eV < \Delta$.

Un electrón que se propaga por la porción metálica hacia la derecha, para energías por debajo del gap superconductor (y en particular, para energía cero) enfrentará dos posibles procesos: (i) reflexión normal, $e \rightarrow e$ ó (ii) reflexión de Andreev, $e \rightarrow h$, en la interfase NS.

En la reflexión normal, el electrón es simplemente reflejado, como se ve en la Figura 4.1(a). En este caso, no hay transferencia neta de carga de un electrodo a otro, además, este proceso no contribuye a la generación de corriente. De hecho, suponiendo, nuevamente, que el electrón que se está considerando proviene de la izquierda, no importa si lo que está a la derecha es un superconductor o un aislante.

Por otro lado, la reflexión de Andreev [85] es un proceso único de las interfaces NS. En este caso, el superconductor convierte al electrón incidente en un agujero (h) y se crea un par de Cooper en el superconductor (ver Sección 3.1), como se puede ver en la Figura 4.1(b) y se transfiere una carga $2e$ del electrodo de la izquierda al de la derecha. Para voltajes pequeños, este proceso será el único responsable para la generación de una corriente eléctrica.

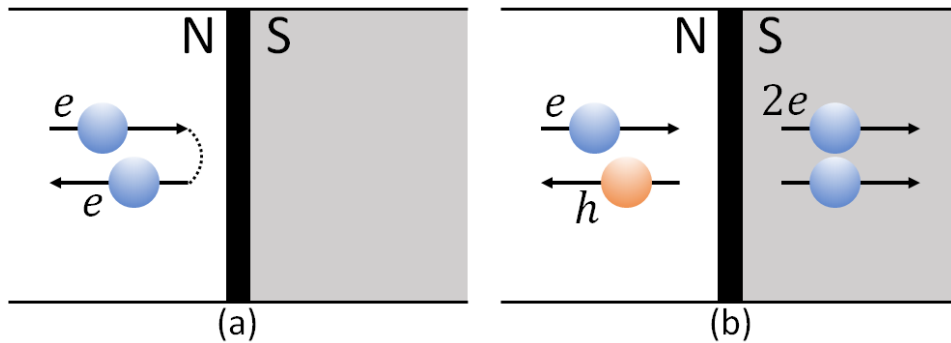


Figura 4.1: Representación esquemática de (a) la Reflexión Normal y (b) la Reflexión de Andreev.

Por encima del gap superconductor, $eV > \Delta$, la transmisión de un electrón incidente en el SC también contribuye a la corriente. Todo esto permite pensar la reflexión de Andreev como un problema de transmisión. Debido a la presencia de un superconductor, la transferencia de un lado a otro va a estar mediada tanto por electrones como por agujeros. Se puede conceptualizar esta situación separando el sistema de la izquierda en dos, uno por el que circulan electrones (canal e) y el otro por donde circulan agujeros (canal de h). Ambos sistemas están conectados por un superconductor que convierte los electrones incidentes en agujeros en el segundo sistema y viceversa, como se puede ver en la Figura 4.2. Al tener en cuenta el spin del sistema, la conductancia total tendrá un pico cuantizado en $4e^2/h$.

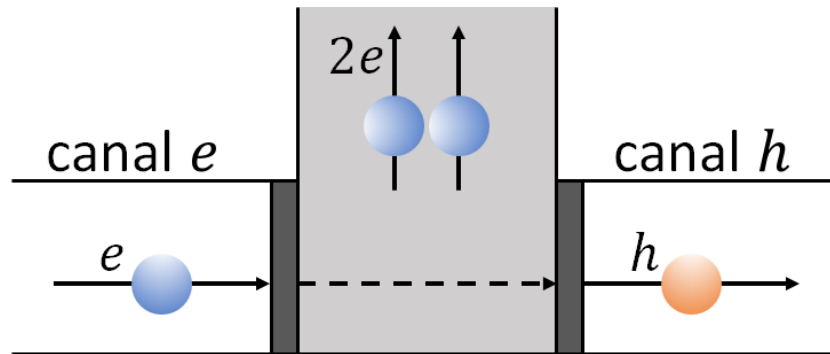


Figura 4.2: Forma alternativa de pensar el comportamiento microscópico de la corriente en una junta NS

Finalmente, resta entender qué sucede en el caso en el que el superconductor se encuentra en la fase topológica. En ese caso, como ya se ha mencionado anteriormente, en dicha fase florecen estados de borde en la muestra, modos de Majorana, cuya función será la de tunear en el reservorio metálico de manera tal de que se cambie drásticamente cualquier propiedad relacionada con la reflexión de Andreev. Ahora el modo de Majorana aparecerá como un estado ligado en la interfase, como se puede ver en la Figura 4.3.

En presencia de un estado ligado, se abre la puerta a que exista una transmisión resonante. Esto significa que la probabilidad de que un electrón incidente se refleje como un agujero aumentará, y en particular, dada la presencia de dicho modo a energía cero, en estos casos el sistema tendrá un pico de resonancia cuantizado en la conductancia a $V = 0$ (ó *Zero Bias Conductance Peak*, ZBCP). Si el modo a energía cero está polarizado, se transmitirán las partículas y las anti-partículas con la misma polarización, dando lugar a una conductancia cuantizada, en este caso, de $2e^2/h$. Este es un rasgo distintivo que marca una diferencia respecto del caso de la junta NS. El estudio teórico de los ZBCP [86–93] continúa siendo un área muy dinámica, al igual que los experimentos que buscan dar con dicha medición [28, 89, 94, 95]. Una de las mayores dificultades en este contexto es la existencia de estados ligados de Andreev. Estos son también estados localizados en la junta pero poseen un origen no topológico. Resulta muy difícil distinguirlos de los estados de Majorana, siendo una de sus características distintivas el hecho de que, a la hora de medir la conductancia, dan lugar a valores acotados por $4e^2/h$ mientras que, como se mencionara anteriormente, los Majoranas poseen una cota en el valor de la conductancia dada por $2e^2/h$.

4.2. Quantum Dots

Otra configuración sumamente importante en este trabajo es lo que se conoce como puntos cuánticos (ó *Quantum Dots*, QD). La física alrededor de los mismos ha sido un tópico altamente fructífero desde los primeros estudios en la década de los '80 y en la actualidad forman parte de las plataformas a través de las que se estudian diversos fenómenos de transporte.

Un QD es una estructura artificial que puede ser llenada con electrones (o agujeros). El QD puede acoplarse a reservorios con los que puede intercambiar electrones dando lugar a fenómenos de transporte. Su tamaño ronda los $2 - 10nm$ de modo que resultan

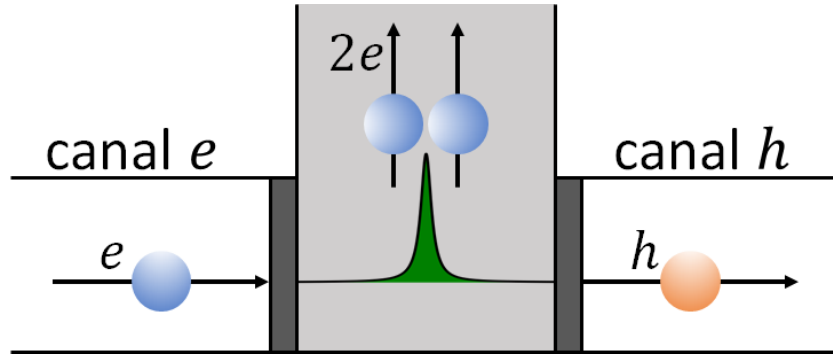


Figura 4.3: Transporte de carga en una juntura Normal-Superconductor topológico. La presencia de un modo de Majorana a energía cero permite que exista una transmisión resonante a $V = 0$.

lo suficientemente pequeños como para exhibir propiedades cuánticas. En la actualidad existen diversas técnicas para confinar electrones en semiconductores para construir Quantum Dots. La más usual es el cultivo mediante técnicas epitaxiales avanzadas en nanocristales producidos por métodos químicos o por implantación de iones, así como en nanodispositivos usando técnicas litográficas. La aplicación de potenciales de compuerta (potenciales de *gate*) electrostáticos sobre la superficie de estas heteroestructuras permite controlar la densidad de portadores de carga en, por ejemplo, sistemas de gases de electrones bidimensionales y además confinar a los electrones en forma controlada en las dos direcciones restantes. De esta forma, los electrones se encuentran confinados en las tres direcciones espaciales, aunque el confinamiento en la interfase es usualmente más fuerte que el confinamiento lateral debido a los contactos. En consecuencia los electrones se encuentran en el estado de menor energía en la dirección normal a la interfase y el punto cuántico es bidimensional.

4.2.1. Efecto Kondo en QDs: Modelo de Anderson

A continuación se dará una muy breve explicación del Efecto Kondo así como una pequeña introducción del Modelo de Anderson, dado que juegan un rol en algunos de los efectos analizados en la presente tesis. Para una explicación más detallada, se recomiendan las Referencias [96, 97].

El efecto, que lleva el mismo nombre que su descubridor Jun Kondo, describe el scattering de electrones de conducción en un metal debido a las impurezas magnéticas, lo que resulta en un cambio característico de la resistividad eléctrica con la temperatura[98]. El Hamiltoniano efectivo de Kondo describe la interacción entre el spin de los electrones de conducción (reservorio) y el spin de la impureza magnética, ya que considera que las excitaciones de baja energía son sólo excitaciones de ese grado de libertad:

$$H = \sum_k \varepsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + J \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} \left(c_{k,\sigma}^\dagger \frac{1}{2} \bar{\sigma}_{\sigma,\sigma'} c_{k',\sigma'} \right) \cdot \bar{S}, \quad (4.1)$$

donde $\bar{\sigma}$ es el vector de matrices de Pauli que describe el spin de los electrones de la banda de conducción y \bar{S} el spin de una impureza. Puede demostrarse que el estado fundamental del modelo antiferromagnético con $J > 0$ es un singlete de spin entre los electrones de conducción y la impureza magnética. A partir del Hamiltoniano (4.1), Kondo logró mostrar que la resistencia eléctrica diverge a medida que la temperatura se

aproxima a $0K$ y de ese modo explicar el aumento de la resistividad a bajas temperaturas en algunos metales.

El modelo propuesto por Philip Anderson [99] para describir impurezas magnéticas embebidas en contactos metálicos permitió entender con mayor detalle los procesos físicos que llevan al modelo de Kondo. Este modelo también sirve para describir el efecto de la interacción de Coulomb en QD. Su Hamiltoniano es:

$$H_{An} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U d_{\uparrow}^\dagger d_{\uparrow} d_{\downarrow}^\dagger d_{\downarrow} + \sum_{k\sigma} (W_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \text{h.c.}). \quad (4.2)$$

El primer término de la Ecuación (4.2) representa el Hamiltoniano de los electrones en la banda de conducción (reservorio) y los siguientes dos términos representan el Hamiltoniano de una impureza que puede alojar hasta dos electrones. El término con U describe la energía de repulsión coulombiana que experimentan dos partículas con spines opuestos ocupando el mismo nivel. La última contribución al Hamiltoniano de la Ecuación (4.2) representa el acoplamiento entre la impureza y los electrones de conducción del reservorio. Un esquema de lo arriba representado se puede observar en la Figura 4.4.

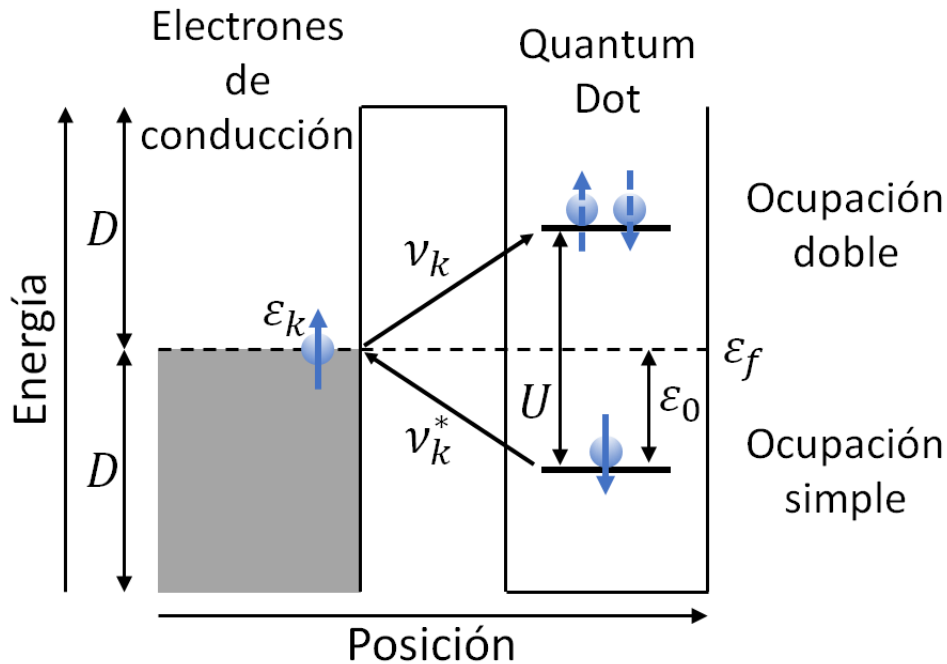


Figura 4.4: Quantum dot acoplado a un reservorio fermiónico. El esquema ilustra los distintos procesos que describe el Hamiltoniano del modelo de Anderson.

El Hamiltoniano que resulta de sintonizar la energía del último nivel ocupado del QD con la mitad de la energía electrostática $\varepsilon_{\sigma} = -U/2$ se conoce como modelo de Anderson simétrico. Representa un caso especial caracterizado por tener un único electrón ocupando el último nivel del QD, lo que implica que $\langle n_{\sigma} \rangle = 1/2$. Cuando la interacción coulombiana U es lo suficientemente grande, suprime las fluctuaciones de carga en el QD y el único grado de libertad que permanece activo es su spin. En ese caso, el QD puede molearse como un sistema de spin $1/2$ localizado, dando lugar al efecto Kondo. Este régimen se manifiesta como una resonancia en la densidad de estados del QD y se presenta cuando la temperatura es inferior a la llamada temperatura de Kondo,

T_K . Conforme $T > T_K$, las fluctuaciones térmicas conspiran contra la formación de la resonancia de Kondo ocasionando una disminución de la conductancia.

El efecto Kondo abre la posibilidad de tener procesos efectivos de transferencia de partículas entre dos reservorios acoplados a cada lado de un QD. La amplitud de un proceso de este tipo diverge logarítmicamente cuando la energía ω de un electrón entrante tiende a cero. Dado que $\omega \sim T$, la singularidad logarítmica en la amplitud de transmisión se traslada a un aumento dramático de la conductancia a través del QD a bajas temperaturas. En condiciones ideales, este máximo puede alcanzar el límite cuántico de conductancia $2e^2/h$ [100].

Finalmente, si el número de ocupación dentro del QD varía hasta alcanzar un número par de electrones, el sistema entra en un régimen que se denomina *Coulomb blockade*. El mismo se caracteriza por una supresión de la conductancia a excepción de aquellos valores del voltaje de superficie que sintonicen con un punto de degeneración de carga.

4.3. Efecto Josephson

Una de las pruebas más claras de la fase superconductora es el efecto Josephson: un fenómeno en el que una corriente fluye a través de dos superconductores débilmente acoplados, separados por una barrera pequeña, una juntura Josephson, y asociada con la coherencia de tuneleo cuántico entre ambos extremos de la juntura. Una estructura clásica en la que se observa esta corriente son los superconductores anulares a los que se les quita una pequeña porción y se atraviesa el centro con un flujo magnético. En 1962 Josephson predijo que una supercorriente J_J podría observarse en la juntura arriba mencionada y que su valor sería proporcional al seno de la diferencia de fases $\phi = \phi_1 - \phi_2$ presentes en el parámetro de orden $\Delta_1 e^{i\phi_1}$ y $\Delta_2 e^{i\phi_2}$,

$$J_J(\phi) = J_C \sin \phi, \quad (4.3)$$

conocido como efecto Josephson directo¹ (*DC Josephson Effect*). El máximo de corriente J_C se conoce como corriente crítica. El comportamiento de la corriente Josephson generada en dicha juntura como función de la fase $\phi = 2\pi\Phi/\Phi_0$, donde Φ es el flujo y $\Phi_0 = h/2e$ es el cuanto de flujo; constituye una herramienta fundamental para develar física ligada a la naturaleza del superconductor o de la juntura. Por ejemplo, en el caso de superconductores ordinarios (es decir, en la fase no-topológica), la relación entre la fase y la corriente se puede observar en una periodicidad 2π que adquiere la corriente al graficarla como función de dicha fase.

La física detrás del efecto Josephson directo puede ser entendida si se tiene en cuenta que las cuasi-partículas localizadas en la barrera no pueden penetrar directamente en el superconductor si su energía es menor que la del gap superconductor, tal y como se explicó anteriormente (ver Sección 4.1). Aún así, puede ocurrir otra forma de transporte de carga a partir de la reflexión de Andreev. Un electrón con momento \mathbf{k} que incide sobre la interfaz se convertirá en un agujero moviéndose en sentido opuesto, como se puede visualizar en la Figura 4.1(b), y generando un par de Cooper en el superconductor. A continuación, este agujero sufrirá nuevamente una reflexión de Andreev pero ahora del superconductor en el otro extremo de la juntura, convirtiéndose nuevamente

¹En la presente tesis nos centraremos en este caso.

en un electrón y llevando a la destrucción del par de Cooper arriba mencionado. El resultado de este ciclo es el que un par de electrones correlacionados es transferido de un superconductor a otro, creando una supercorriente que fluye a través de la juntura, se puede observar en la Figura 4.5.

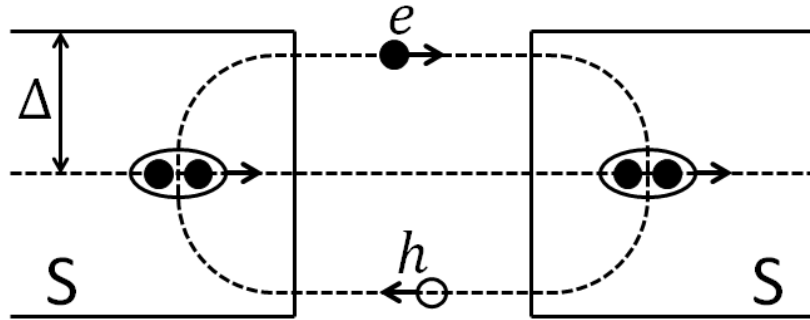


Figura 4.5: Representación gráfica del comportamiento microscópico de la corriente en una juntura S-S.

Es usual que en la juntura se formen estados ligados dentro del gap llamados *estados de Andreev*. Los mismos son particularmente sensibles a ϕ y suelen determinar el comportamiento de la corriente Josephson.

En el caso de junturas con superconductores topológicos, el espectro de Andreev está constituido por la hibridización de los estados de borde de los dos superconductores topológicos conectados por la juntura. Una de las características de dichas junturas topológicas es un cruce de niveles en $\phi = \pi$, y su periodicidad es 4π si la paridad electrónica del sistema se conserva. Cuando la paridad no se conserva, esto da lugar a un salto para $\phi = \pi$ de $J_J(\phi)$. Las junturas Josephson con superconductores topológicos unidimensionales con la simetría de inversión temporal rota han sido estudiadas en numerosos trabajos y el comportamiento de su corriente es considerado desde hace años un potencial mecanismo para detectar fases topológicas [58]. Distintas configuraciones han sido estudiadas en este contexto, así como aquellas que incluyen Quantum Dots con interacciones de muchos cuerpos (*many-body*) y múltiples terminales [101–103]. En particular, en el Capítulo 6 se presentará un estudio detallado de las propiedades de la corriente Josephson para el caso de sistemas con superconductividad topológica y simetría de inversión temporal (TRITOPS) con el objetivo de identificar características relevantes en futuros experimentos con sistemas en la fase TRITOPS.

Otro aspecto importante de la corriente Josephson en junturas con superconductores no-topológicos, simetría de inversión temporal y QD interactuantes es que poseen la misma periodicidad con el flujo magnético que el caso de la juntura directa (es decir, sin el QD). Estos casos exhiben lo que se conoce como transición $0 - \pi$ [102, 104–106]. Los procesos de transferencia de pares de Cooper a través de un QD implican la necesidad de romper los pares y justamente hacer que uno de los electrones del par tunelee. Esto sucederá si el parámetro de apareamiento es menor que el parámetro de acoplamiento de la juntura. Asimismo, dependiendo de la paridad del número de electrones en el dot, la corriente tendrá diferentes características.

Para un número par de electrones, Figura 4.6(a), cada par de Cooper involucrado en la transferencia de un extremo a otro de la juntura se ve involucrado en cuatro procesos: (1) un electrón con spin- \downarrow deja el QD creando una excitación de cuasi-partícula virtual y

dejando al QD en un estado de alta energía virtual; (2) un electrón con spin- \downarrow ingresa al QD luego de romper un par de Cooper en el reservorio de la izquierda; (3) un electrón con spin- \uparrow tunelea hacia el reservorio de la derecha formando un par de Cooper; (4) el spin- \uparrow remanente ingresa desde la izquierda al QD, llevando al mismo a su estado fundamental original. Estos procesos transferirán un par de Cooper en estado de singlete desde la izquierda, $|\psi\rangle_L = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$, hacia el lado derecho, $|\psi\rangle_R = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$. Dado que no hay ningún cambio de fase a lo largo del presente proceso, se obtiene la relación ya conocida para la corriente Josephson, la cual se puede observar en azul en la Figura 4.6(c).

Cuando un QD está ocupado por un número impar de electrones, como se puede observar en la Figura 4.6(b), formando un estado fundamental con un doblete de spin, la secuencia en el traspaso de un par de Cooper a lo largo de dicha juntura es la siguiente: (1) un electrón con spin- \uparrow tunelea hacia el reservorio de la derecha; (2) un electrón con spin- \downarrow que forma un par de Cooper tunelea hacia el QD; (3) el mismo electrón con spin- \uparrow salta al reservorio de la derecha para formar un par de Cooper; (4) el spin- \uparrow remanente tunelea hacia el QD desde la izquierda. El spin total en el QD es el mismo que inicialmente. Sin embargo, el ordenamiento de spin se invierte respecto del par de Cooper en el lado derecho: $|\psi\rangle_R = (|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle) = e^{i\pi} |\psi\rangle_L$. Esta fase π que adquiere el estado fundamental se traduce en un corrimiento de fase π (π -phase) en la corriente Josephson y que se puede observar en rojo en la Figura 4.6(c).

Por otro lado, frente al caso de una ocupación simple en presencia del efecto Kondo, pueden manifestarse diferentes regímenes que involucran una competencia entre la temperatura de Kondo T_K y el gap de energía:

- Si $\Delta \gg T_K$, no habrá ningún electrón en los alrededores del nivel de Fermi capaz de participar del apantallamiento Kondo, dando como resultado una juntura- π .
- En el caso en que $\Delta \ll T_K$, las correlaciones debido al efecto Kondo co-existirán en el sistema junto con aquellas debidas a la superconductividad. Los procesos de tuneleo aumentarán, transfiriendo pares de Cooper y favoreciendo la formación de estados singlete de Kondo/BCS. Esto da como resultado una juntura-0 con la posibilidad de aumento de la corriente.
- Finalmente, puede existir un régimen intermedio en donde $\Delta \approx T_K$. En este caso se registrará una transición $0 - \pi$ la cual puede entenderse a partir de la dependencia con la fase de los estados de Andreev[102, 107].

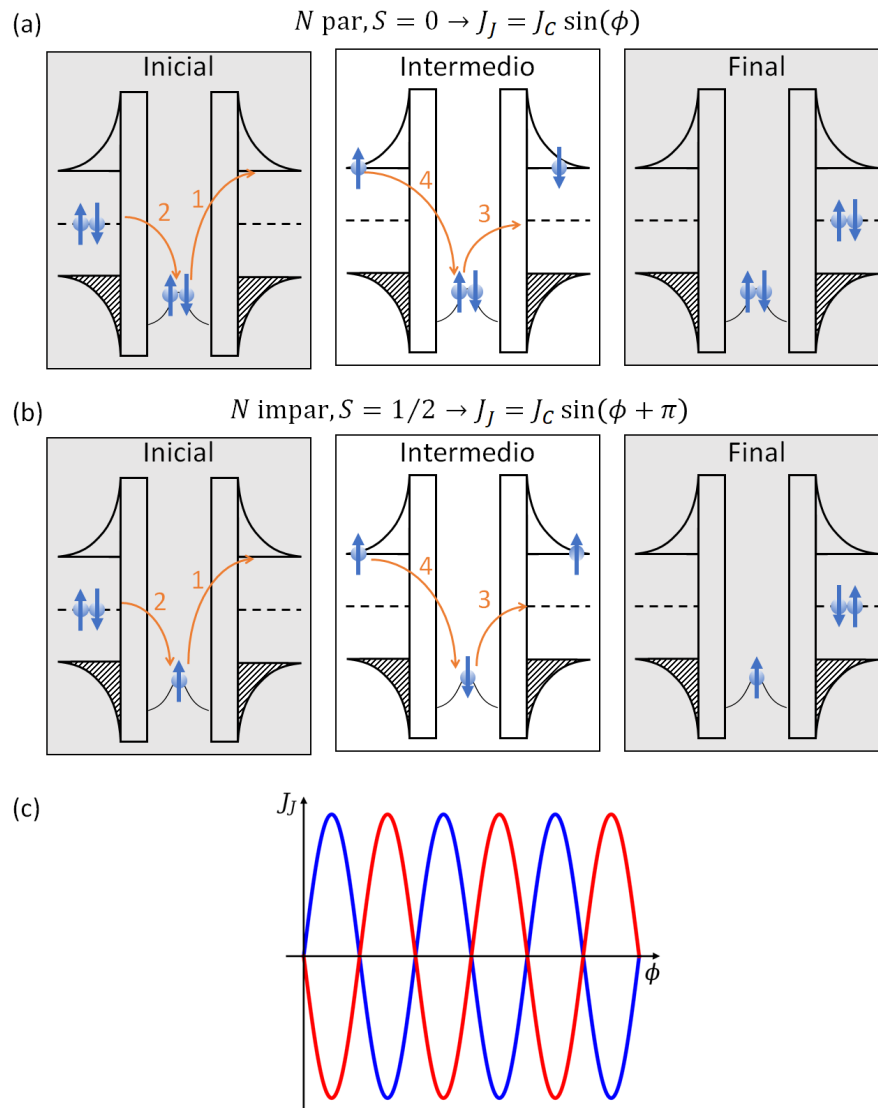


Figura 4.6: Explicación cualitativa de la transición $0 - \pi$ inducida por paridad. Dependiendo de la paridad en el QD, los procesos de tuneldeo serán distintos.

Metodología

En este capítulo se presentará el formalismo teórico utilizado en la presente tesis para el estudio del transporte electrónico fuera del equilibrio. Se hará una síntesis que buscará abarcar los contenidos básicos relevantes en los cálculos de las magnitudes físicas de interés. En las Referencias [108, 109] se podrá encontrar material más desarrollado con el cual complementar lo expuesto a continuación.

Se comenzará con un repaso del formalismo de funciones de Green para sistemas en equilibrio y fuera del equilibrio. Luego se mostrará cómo se usó el mismo para el cálculo de las magnitudes desarrolladas en el Capítulo 4.

5.1. Formalismo de las Funciones de Green

El método de funciones de Green es una poderosa herramienta matemática para resolver ecuaciones diferenciales lineales con aplicaciones en varios campos de la física: desde ecuaciones diferenciales clásicas hasta problemas cuánticos de muchos cuerpos. En el contexto cuántico, las funciones de Green representan funciones de correlación de las cuales es posible extraer información del sistema en estudio (densidad de estados, tiempos de relajación y funciones de respuesta, entre otros). Asimismo, en el contexto de la presente tesis, las funciones de Green resultan fundamentales al ser adecuadas para estudiar propiedades de un sistema descrito por Hamiltonianos que no siempre pueden ser resueltos en forma exacta.

Sea un Hamiltoniano que puede expresarse como

$$H = H_0 + V, \quad (5.1)$$

donde H_0 es la parte del Hamiltoniano que se puede resolver de manera exacta y V contiene todas las interacciones. La elección de H_0 es tal que los efectos introducidos por V pueden ser tratados perturbativamente. Es decir, se resolverá el Hamiltoniano H_0 para luego incluir los efectos de V . Finalmente, se realizan los cálculos para ver los cambios en las propiedades del sistema a partir de la introducción de V .

Ahora bien, el tratamiento de los operadores y estados asociados al problema estará sujeto a qué tipo de representación de la mecánica cuántica se elija.

5.1.1. Representaciones en Mecánica Cuántica

Representación de Schrödinger

En esta representación, el estado del sistema evoluciona de acuerdo a la Ecuación de Schrödinger¹

$$i\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle. \quad (5.2)$$

La solución para esta Ecuación será

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\Psi(0)\rangle \quad (5.3)$$

En ambas expresiones se están suponiendo dos cosas, a tener en cuenta:

- funciones de onda dependientes del tiempo
- operadores constantes en el tiempo.

De esta manera, la dependencia temporal de una cierta magnitud (asociada a un observable) estará determinada por el estado del sistema y no por sus operadores, es decir

$$\langle O \rangle(t) = \langle \Psi(t) | O | \Psi(t) \rangle \quad (5.4)$$

Representación de Heisenberg

Otra forma de resolver los problemas en la mecánica cuántica es a partir de la representación de Heisenberg. Las propiedades de la representación de Heisenberg son

- las funciones de onda son independientes del tiempo
- los operadores tienen una dependencia en el tiempo de la forma

$$O(t) = e^{iHt} O(0) e^{-iHt}. \quad (5.5)$$

En este caso, se trata de resolver la ecuación de movimiento que cumplen los operadores

$$\frac{\partial}{\partial t} O(t) = i[H, O(t)] \quad (5.6)$$

Representación de Interacción

Por último, existe una tercera representación a utilizar frente a la resolución de problemas en mecánica cuántica. En esta representación la dependencia temporal se distribuye entre los estados y los operadores del sistema. Una característica importante es que los operadores evolucionan sólo por influencia de la parte no perturbativa H_0 , mientras que los estados lo hacen según la interacción V . En este caso, la dependencia temporal se define de la siguiente manera

- las funciones de onda evolucionan como

$$|\hat{\Psi}(t)\rangle = e^{iH_0 t} e^{-iHt} |\Psi(0)\rangle. \quad (5.7)$$

¹De aquí en adelante se considerará $\hbar = 1$.

- Los operadores tienen una dependencia temporal de la forma

$$\hat{O}(t) = e^{iH_0 t} O e^{-iH_0 t} \quad (5.8)$$

Al igual que en las representaciones anteriores, la dependencia temporal se elige de manera que los elementos de la matriz de los operadores sean los mismos.

En la Ecuación (5.7) se introdujo el operador llamado evolución temporal, $U(t) = e^{iH_0 t} e^{-iHt}$ y que verifica $\hat{U}(0) = 1$.

Tomando la derivada del operador $U(t)$

$$\begin{aligned} \partial_t U(t) &= ie^{iH_0 t} (H - H_0) e^{-iHt} \\ &= -ie^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t} e^{iH_0 t} e^{-iHt} \\ &= -i\hat{V}(t)U(t) \end{aligned} \quad (5.9)$$

Luego, integrando la ecuación anterior respecto del tiempo,

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n). \quad (5.10)$$

Es aquí donde resulta conveniente definir el operador orden temporal T , el cual se define como

$$T[\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2)] = \Theta(t_1 - t_2) \hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) + \Theta(t_2 - t_1) \hat{V}(t_2) \hat{V}(t_1). \quad (5.11)$$

De esta manera, volviendo a la Ecuación (5.10) y haciendo tender todos los extremos de integración a t ,

$$U(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \frac{1}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n T[\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n)] \quad (5.12)$$

la cual puede abreviarse de la siguiente manera

$$U(t) = T \exp \left\{ -i \int_0^t dt_1 \hat{V}(t_1) \right\} \quad (5.13)$$

Es importante remarcar que la Ecuación (5.12) es válida aún cuando V no depende del tiempo.

Finalmente, es posible definir un operador S tal que

$$\hat{\Psi}(t) = S(t, t') \hat{\Psi}(t') \quad (5.14)$$

donde

$$S(t, t') = U(t) U^\dagger(t'). \quad (5.15)$$

Este operador cumple con tres propiedades fundamentales a tener en cuenta:

- $S(t, t) = 1 = U(t) U^\dagger(t)$
- $S^\dagger(t, t') = S(t', t)$
- $S(t, t') S(t', t'') = S(t, t'')$

Si se deriva el operador $S(t, t')$ respecto a t , se obtiene una ecuación diferencial y se resuelve, se obtiene que

$$S(t, t') = T \exp \left\{ -i \int_{t'}^t dt_1 \hat{V}(t_1) \right\} \quad (5.16)$$

5.2. Funciones de Green para Sistemas en Equilibrio a $T = 0$

Dado un Hamiltoniano como el de la Ecuación (5.1), se define la función de Green (o propagador) del sistema como

$$G(1, 1') = -i \langle \Psi_0 | T[(\Psi_H(1)\Psi_H^\dagger(1')) | \Psi_0 \rangle \quad (5.17)$$

donde $1 = (\mathbf{x}, t)$, $1' = (\mathbf{x}', t')$ y Ψ_H el operador de campo en la representación de Heisenberg. La presencia del operador T hace que la función de Green esté ordenada temporalmente, razón por la cual se conoce a la Ecuación (5.17) como función de Green causal.

La definición de la función de Green contiene una dificultad: el estado fundamental $|\Psi_0\rangle$ corresponde al Hamiltoniano H , del cual no se conoce la estructura de sus autoestados y sus autoenergías. Justamente es a través del formalismo de Green que se intenta obtener información al respecto. Aún así, lo que sí puede obtenerse es el estado fundamental del Hamiltoniano sin interacción (H_0), $|\phi_0\rangle$ y utilizarlo para expresar el estado fundamental del problema completo, $|\Psi_0\rangle$. La relación entre ambos estados fundamentales a temperatura nula está determinada por el teorema de Gell-Mann y Low[110]

$$|\Psi_0\rangle = S(0, \infty) |\phi_0\rangle. \quad (5.18)$$

La idea fundamental detrás de este teorema es que previo a encender la perturbación V (en $t \rightarrow -\infty$) el sistema se halla en el estado fundamental $|\phi_0\rangle$. Para $t = 0$, cuando la perturbación está encendida, el sistema se encontrará en el estado fundamental $|\Psi_0\rangle$ que se genera a partir de la evolución en forma adiabática del autoestado $|\phi_0\rangle$ del Hamiltoniano no interactuante.

En este contexto, se consideran sistemas en equilibrio a aquellos que son perturbados por potenciales reversibles. Esto implica que cuando la perturbación se apaga en $t \rightarrow \infty$, el estado del sistema $|\hat{\Psi}(\infty)\rangle$ vuelve a ser el estado fundamental del Hamiltoniano H_0 (a menos de una fase global L). De esta manera,

$$|\phi_0\rangle e^{iL} = |\hat{\Psi}(\infty)\rangle = S(\infty, 0) |\hat{\Psi}_0\rangle = S(\infty, -\infty) |\phi_0\rangle \Rightarrow e^{iL} = \langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle. \quad (5.19)$$

Combinando esta última expresión con las propiedades de S , $\langle \Psi_0 |$ puede escribirse de la siguiente manera

$$\langle \Psi_0 | = \langle \phi_0 | S(-\infty, 0) = e^{-iL} \langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) S(-\infty, 0) = \frac{\langle \phi_0 | S(\infty, 0)}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (5.20)$$

A continuación, la función de Green definida en la representación de Heisenberg, se la convierte a la representación de interacción. Para ello, se utilizan las Ecuaciones (5.5) y (5.8)

$$\begin{aligned} \Psi_H(t) &= e^{iHt} e^{-iH_0 t} \hat{\Psi}_{H_0}(t) e^{iH_0 t} e^{-iHt} \\ &= U^\dagger(t) \hat{\Psi}_{H_0}(t) U(t) \\ &= S(0, t) \hat{\Psi}_{H_0}(t) S(t, 0) \end{aligned} \quad (5.21)$$

donde el subíndice H_0 en el operador de campo indica que está en la representación de interacción, en la que los operadores evolucionan según la parte no perturbada del Hamiltoniano. Entonces, se puede reescribir el producto de operadores de campo como

$$\Psi_H(1)\Psi_H^\dagger(1') = S(0, t)\hat{\Psi}_{H_0}(t)S(t, 0)S(0, t')\hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(t')S(t', 0). \quad (5.22)$$

Haciendo uso de las propiedades del operador S vistas anteriormente,

$$G(1, 1') = -i \frac{\langle \phi_0 | T[S(\infty, -\infty)\hat{\Psi}_{H_0}(1)\hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(1')] | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (5.23)$$

Para los sistemas en equilibrio, se supone que la perturbación no depende explícitamente del tiempo, por lo que se puede reemplazar la dependencia temporal a partir de la redefinición $\tau = t - t'$. De esta manera, todas las cantidades físicas de interés dependen sólo de la diferencia entre tiempos. El procedimiento para el cálculo de las funciones de Green continúa expandiendo la matriz S en potencias de $\hat{V}(t)$

$$G(1, 1') = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^{n+1} \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \frac{\langle \phi_0 | T[\hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \hat{\Psi}_{H_0}(1) \hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(1')] | \phi_0 \rangle}{\langle \phi_0 | S(\infty, -\infty) | \phi_0 \rangle}. \quad (5.24)$$

Llegado a este punto, la dificultad surge de la evaluación de los elementos en *brackets* con productos de operadores ordenados temporalmente. Es acá en donde entra en juego el teorema de Wick [111] junto con las reglas diagramáticas de Feynman. El mencionado teorema permite obtener la función de Green total a partir de las funciones de Green del sistema no perturbado, también conocidas como propagadores libres y que tienen la siguiente estructura

$$G^0(t - t') = -i \langle \phi_0 | T[\hat{\Psi}_{H_0}(1) \hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(1')] | \phi_0 \rangle. \quad (5.25)$$

En el caso $t' > t$, el operador orden temporal T hace que las posiciones de los operadores de campo se intercambien (con el consecuente cambio de signo en el caso fermiónico). De esta manera, el operador $\hat{\Psi}_{H_0}(1)$ va a actuar directamente sobre el estado fundamental $|\phi_0\rangle$. Luego, un electrón en ese estado será destruido a tiempo t y creado a tiempo t' , sólo si hay electrones en el estado fundamental a temperatura cero. Un caso en el que esto sucede es el mar de Fermi de un metal; allí remover un electrón crea un estado vacante, llamado agujero.

El teorema de Wick tiene en cuenta todas las posibles parejas que se pueden armar entre operadores y todos los ordenamientos temporales. Por lo tanto, el resultado será la suma sobre todas las contracciones de a parejas. Cada término puede ser fácilmente expresado en término de los diagramas de Feynman, cada uno de los cuales poseen propiedades muy distintas. Un desarrollo al respecto se puede encontrar en [41, 111]

5.3. Funciones de Green para Sistemas Fuera del Equilibrio

En el caso de sistemas fuera del equilibrio, una vez que la perturbación es encendida o apagada, no hay garantía que el sistema vuelva al mismo estado inicial para tiempos

asintóticamente largos debido a la irreversibilidad de los procesos. En sistemas fuera del equilibrio, el estado a $t \rightarrow \infty$ debe ser definido con mucho cuidado ya que puede ocurrir que el estado ϕ_0 del sistema no interactuante no sea una buena descripción. Algunos de los ejemplos de perturbaciones fuera del equilibrio pueden ser: un campo electromagnético, un pulso de luz o un acoplamiento del sistema con reservorios a diferentes potenciales químicos.

Un método para manipular el límite para $t \rightarrow \infty$ consiste en pensar que la integral temporal de S , Ecuación (5.16), tiene dos partes: la primera desde $(-\infty, \tau)$, y la segunda desde $(\tau, -\infty)$, para luego tomar $\tau \rightarrow -\infty$. El camino de integración es un loop temporal que empieza y termina en $t = -\infty$ y tiene la ventaja de ser conocidos el estado inicial y el final $|\Psi(-\infty)\rangle = |\phi_0\rangle$. A este camino se lo conoce como contorno de Keldysh y se lo ilustra en la Figura 5.1

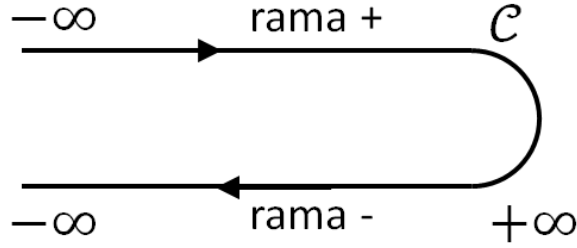


Figura 5.1: Representación esquemática del contorno de Keldysh

Las ramas se grafican separadas con el fin de enfatizar que el ordenamiento temporal de cada una es diferente. Sobre la rama superior (+), el ordenamiento temporal es cronológico, mientras que en la rama inferior (-) el ordenamiento es anti-cronológico.

En este caso, la función de Green es ordenada en el contorno \mathcal{C} y definida como

$$G(1, 1') \equiv i \langle T_{\mathcal{C}} \Psi_H(1) \Psi_H^\dagger(1') \rangle = \begin{cases} i \langle \Psi_H(1) \Psi_H^\dagger(1') \rangle, & \text{si } \tau_1 > \tau_{1'} \text{ en } \mathcal{C} \\ -i \langle \Psi_H^\dagger(1') \Psi_H(1) \rangle, & \text{si } \tau_1 < \tau_{1'} \text{ en } \mathcal{C} \end{cases} \quad (5.26)$$

donde $T_{\mathcal{C}}$ es el operador de orden a lo largo del contorno de Keldysh \mathcal{C} y los operadores de campo están expresados en la representación de Heisenberg. El ket, al igual que anteriormente, representa el estado fundamental del estado interactuante.

De forma análoga al caso en equilibrio, se puede expresar la función de Green en la representación de interacción. Para ellos, es necesario transformar los operadores y estados mediante el operador evolución temporal S , que sobre el contorno \mathcal{C} , se define como

$$S_{\mathcal{C}}(t_1, t_2) = T_{\mathcal{C}} \exp \left\{ -i \int_{t_1}^{t_2} d\tau \hat{V}(\tau) \right\}. \quad (5.27)$$

A partir de esta definición y las relaciones (5.18) y (5.22) se obtiene que

$$G(1, 1') = -i \langle \phi_0 | T_{\mathcal{C}} [S_{\mathcal{C}}(-\infty, -\infty) \hat{\Psi}_{H_0}(1) \hat{\Psi}_{H_0}^\dagger(1')] | \phi_0 \rangle \quad (5.28)$$

En lugar del operador de orden temporal utilizado en la teoría de equilibrio, se introduce el operador de ordenamiento sobre el contorno \mathcal{C} , el cual ordena los tiempos de acuerdo

al orden que tienen en el contorno. Con esta generalización, la estructura del formalismo es idéntica al caso de equilibrio. La única diferencia es que ahora las integrales son sobre el contorno de Keldysh, en lugar del eje real.

Tanto para sistemas en equilibrio como para sistemas fuera del equilibrio, la expansión de S (o S_C) conduce a una ecuación cerrada para G . Por el teorema de Wick, cada término de la expansión puede escribirse como una suma de productos de funciones de Green de una partícula del sistema no perturbado. Esta expansión da lugar a una expresión conocida como Ecuación de Dyson [111],

$$G(1, 1') = G^0(1, 1') + \int d^3x_2 \int d^3x_3 \int_C d^3\tau_2 \int_C d^3\tau_3 G^0(1, 2) \Sigma(2, 3) G(3, 1'), \quad (5.29)$$

donde G^0 es la función de Green del sistema sin perturbar y Σ es la autoenergía. Esta última contiene los efectos de la interacción y está compuesta por la suma de un número infinito de diagramas distintos (ver [41, 111]). Este método es útil si Σ puede ser aproximada por algunos pocos términos de la serie de bajo orden en la perturbación. Esto puede ocurrir, por ejemplo, en teorías de acoplamiento débil, en las cuales la perturbación es lo suficientemente débil como para obtener una aproximación adecuada teniendo en cuenta solamente algunos términos.

Una desventaja de la utilización del loop temporal es que este método emplea seis funciones de Green diferentes. La necesidad de introducir estas funciones se puede entender a partir del operador de ordenamiento sobre el contorno T_C . Por ejemplo, si τ_1 y $\tau_{1'}$ se encuentran sobre la rama +, el ordenamiento en el contorno es idéntico al ordenamiento temporal cronológico. En cambio, si ambos se encuentran en la rama -, el ordenamiento va a coincidir con el anti-cronológico. También puede ocurrir que τ_1 y $\tau_{1'}$ estén en ramas diferentes, y en ese caso están automáticamente ordenados. Entonces, resulta conveniente definir, además de la función de Green ordenada temporalmente, una que sea ordenada anti-temporalmente y dos que no tengan ordenamiento temporal. Estos casos diferentes dan cuatro funciones de Green ($G_t, G_{\bar{t}}, G^<, G^>$), mientras que las otras dos (G^r, G^a) son combinaciones lineales de las anteriores.

Es fácil ver que, frente a la cantidad de funciones de Green que aparecieron, es conveniente utilizar una representación matricial para la función de Green ordenada en el contorno.

5.4. Representación Matricial de la Función de Green en el Contorno

En esta representación, la función de Green en el contorno C será expresada como una matriz de 2×2 cuyas componentes serán las funciones de Green definidas sobre el eje temporal real.

$$\tilde{G}(1, 1') = \begin{pmatrix} G_t(1, 1') & -G^<(1, 1') \\ G^>(1, 1') & -G_{\bar{t}}(1, 1') \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

Cada elemento de la matriz dependerá de la ubicación de los argumentos temporales sobre el contorno de Keldysh. Luego, se tienen las siguientes funciones

Función de Green Mayor

$$G^>(1, 1') = -i\langle \Psi_H(1)\Psi_H^\dagger(1') \rangle \quad (5.31)$$

Función de Green Menor

$$G^<(1, 1') = -i\langle \Psi_H^\dagger(1')\Psi_H(1) \rangle \quad (5.32)$$

Función de Green Causal u Ordenada Temporalmente

$$G_t(1, 1') = \Theta(t_1 - t_{1'})G^>(1, 1') + \Theta(t_{1'} - t_1)G^<(1, 1') \quad (5.33)$$

Función de Green anti-Causal u Ordenada anti-Temporalmente

$$G_{\bar{t}}(1, 1') = \Theta(t_{1'} - t_1)G^>(1, 1') + \Theta(t_1 - t_{1'})G^<(1, 1') \quad (5.34)$$

A partir de las expresiones arriba presentadas es posible demostrar que $G_t + G_{\bar{t}} = G^< + G^>$. Esto implica que de la Ecuación (5.30) sólo tres funciones son independientes. Esta libertad de elección da lugar a la posibilidad de diferentes convenciones. Para el propósito de la presente tesis, las funciones de Green más adecuadas para los cálculos serán $G^<$, $G^>$, la retardada y la avanzada. Estas dos últimas se definen de la siguiente manera

$$G^r = -i\Theta(t_1 - t_{1'})\langle \{\Psi_H(1), \Psi_H^\dagger(1')\} \rangle \quad (5.35)$$

y

$$G^a = i\Theta(t_{1'} - t_1)\langle \{\Psi_H(1), \Psi_H^\dagger(1')\} \rangle. \quad (5.36)$$

Nuevamente, resulta simple ver que se verifica la relación

$$G^r - G^a = G^> - G^<, \quad (5.37)$$

de donde se desprende, como se mencionara anteriormente, que tres de las funciones son independientes. Además, haciendo uso de las Ecuaciones (5.35) y (5.36), se puede ver que

$$G_a = [G_r]^\dagger \quad (5.38)$$

En la representación matricial, la función de Green \tilde{G} también obedece la Ecuación de Dyson

$$\tilde{G}(1, 1') = \tilde{G}^0(1, 1') + \int d^3x_2 \int d^3x_3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_3 \tilde{G}^0(1, 2)\tilde{\Sigma}(2, 3)\tilde{G}(3, 1'), \quad (5.39)$$

donde la autoenergía en la representación matricial tiene una expresión análoga a la introducida para la función de Green en la Ecuación (5.30) y sus componentes cumplen

con las siguientes relaciones

$$\Sigma_t(1, 1') = \begin{cases} -\Sigma^>(1, 1') & \text{si } t_1 > t_{1'} \\ -\Sigma^<(1, 1') & \text{si } t_1 < t_{1'} \end{cases}, \quad (5.40)$$

$$\Sigma_{\bar{t}}(1, 1') = \begin{cases} -\Sigma^>(1, 1') & \text{si } t_1 < t_{1'} \\ -\Sigma^<(1, 1') & \text{si } t_1 > t_{1'} \end{cases}. \quad (5.41)$$

5.5. Teorema de Langreth

Este teorema, también conocido como reglas de Langreth, será de gran utilidad en el cálculo de corrientes (y por lo tanto, también lo será en el cálculo de las conductancias). El mismo permite expresar los elementos de cualquier producto de matrices en el espacio de Keldysh en función exclusivamente de las componentes retardada, avanzada y menor. Asimismo, transforma la integral sobre un contorno cerrado \mathcal{C} en integrales ordinarias definidas sobre el eje real. El método² consiste en deformar el contorno \mathcal{C} de manera apropiada tal que se re-escriban las integrales resultantes utilizando las relaciones presentadas en las Ecuaciones (5.31), (5.32), (5.33) y (5.34).

Dadas dos funciones de Green $A(t_1, \tau)$ y $B(\tau, t'_1)$, la utilidad del teorema de Langreth surge si se quiere calcular la convolución de ambas funciones, tal y como aparece por ejemplo en la Ecuación (5.29), y las mismas no se encuentran sobre el mismo contorno,

$$C(t_1, t'_1) = \int_{\mathcal{C}} d\tau A(t_1, \tau) B(\tau, t'_1); \quad t_1 \in \mathcal{C}_+, t'_1 \in \mathcal{C}_-. \quad (5.42)$$

En ese caso, la componente menor de la función C se escribirá como

$$C^<(1, 1') = \int_{-\infty}^{\infty} dt [A^r(t_1, t) B^<(t, t_{1'}) + A^<(t_1, t) B^a(t, t_{1'})], \quad (5.43)$$

La expresión para la función de Green mayor es el mismo cambiando $<$ por $>$. También se puede aplicar el mismo procedimiento para la componente avanzada y retardada,

$$C^{r/a} = A^{r/a} B^{r/a}. \quad (5.44)$$

En este punto, es fácil generalizar el resultado de la Ecuación (5.43) para un producto de tres funciones. Tomando $D = ABC$ en el contorno \mathcal{C} , luego en el eje real se tiene

$$D^{\lessgtr} = A^r B^r C^{\lessgtr} + A^r B^{\lessgtr} C^a + A^{\lessgtr} B^a C^a. \quad (5.45)$$

Haciendo uso de esta expresión en la Ecuación de Dyson (5.29), se obtiene

$$G^{\lessgtr} = (1 + G^r \Sigma^r) G^{0\lessgtr} (1 + \Sigma^a G^a) + G^r \Sigma^{\lessgtr} G^a. \quad (5.46)$$

Para el caso de sistemas estacionarios, puede demostrarse que el primer término de la Ecuación (5.46) puede despreciarse.

²La demostración de este teorema se puede encontrar en [109]

5.6. Corrientes de carga

Los flujos de carga que se manifiestan en sistemas conformados por reservorios pueden ser calculadas a partir de la evolución temporal de los operadores número de partículas

$$N_\alpha = \sum_{k_\alpha} c_{k_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha}. \quad (5.47)$$

A partir de la ecuación de Heisenberg, es posible escribir la corriente en función de conmutadores

$$J_\alpha = e \langle \dot{N}_\alpha \rangle = ie \langle [H, N_\alpha] \rangle \quad (5.48)$$

Se consideran positivas a aquellas corrientes que salen del sistema central e ingresan al reservorio. A continuación, haciendo uso de las relaciones de anti-conmutación que obedecen los operadores fermiónicos (Ecuación (2.2)), es fácil probar que

$$[H_{res}, N_\alpha] = [H_{sist}, N_\alpha] = [H_{res}, H_{res_\alpha}] = [H_{sist}, H_{res_\alpha}] = 0, \quad (5.49)$$

ya que el número de partículas del reservorio α se conserva cuando está aislado. El único término del Hamiltoniano que posee contribución no nula al conmutador es el que describe el acoplamiento entre los reservorios y el sistema central, H_{cont} . De esta manera, se obtiene que

$$J_\alpha = ie \langle [H_{cont}, N_\alpha] \rangle = -ie \sum_{l_\alpha, k_\alpha} [w_{k_\alpha, l_\alpha} \langle c_{k_\alpha}^\dagger d_{l_\alpha} \rangle - w_{k_\alpha, l_\alpha}^* \langle d_{l_\alpha}^\dagger c_{k_\alpha} \rangle], \quad (5.50)$$

en donde w_{k_α, l_α} es el parámetro de acoplamiento entre reservorio y sistema central. En este momento resulta importante notar que la estructura de ambos términos en la Ecuación (5.50) es la misma que la Ecuación (5.32), es decir, es posible definir dos funciones de Green menores

$$G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t') \equiv i \langle c_{k_\alpha}^\dagger(t') d_{l_\alpha}(t) \rangle, \quad (5.51)$$

$$G_{k_\alpha, l_\alpha}^<(t, t') \equiv i \langle d_{l_\alpha}^\dagger(t') c_{k_\alpha}(t) \rangle. \quad (5.52)$$

Asimismo, a partir de la Ecuación (5.50) se observa que la corriente J_α está escrita en términos de una función de Green menor evaluada en tiempos iguales. De este modo, teniendo en cuenta que $G_{k_\alpha, l_\alpha}^<(t, t) = -[G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t)]^*$, la corriente puede ser expresadas como

$$J_\alpha = -2e \operatorname{Re} \left\{ \sum_{l_\alpha, k_\alpha} w_{k_\alpha, l_\alpha} G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t) \right\}. \quad (5.53)$$

El siguiente paso será hallar una expresión para $G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(t, t)$. En este caso, la relación general para la función de Green ordenada en el contorno $G_{l_\alpha, k_\alpha}^<(\tau, \tau')$ se podrá derivar fácilmente a partir de la técnica que involucra la ecuación de movimiento. Como ha sido explicado en la Sección 5.3, la teoría para sistemas fuera del equilibrio es estructuralmente equivalente a la teoría de equilibrio a $T = 0$. La diferencia reside en que el ordenamiento es sobre el contorno \mathcal{C} en lugar de tener un ordenamiento temporal cronológico. Luego, resulta suficiente considerar la ecuación de movimiento para la función de Green ordenada temporalmente (G_t).

A continuación, antes del cálculo de la corriente Josephson, se introducirán los conceptos más importantes a tener en cuenta en la utilización del método de funciones de Green para sistemas superconductores.

5.7. Formalismo de la Función de Green en la Representación de Nambu

A continuación, se extenderá el desarrollo hasta aquí presentado al contexto de la representación de Nambu.

El punto de partida será la versión continua del Hamiltoniano de la teoría BCS de la Ecuación (3.7)

$$\begin{aligned}
 H_{\text{BCS}} = & \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \partial_x^2 - \mu \right] \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) \\
 & + \int d\mathbf{x} \left[\Delta(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}) + \Delta^* \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \right], \quad (5.54)
 \end{aligned}$$

donde los operadores de campo cumplen con las reglas de anti-conmutación fermiónicas introducidas en la Ecuación (2.2). Es posible, teniendo en cuenta la Ecuación (5.2), escribir la dinámica para los operadores del Hamiltoniano de la Ecuación (5.54)

$$\begin{cases}
 i\partial_t \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \partial_x^2 - \mu \right] \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t) + \Delta^*(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \\
 -i\partial_t \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \partial_x^2 - \mu \right] \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) - \Delta(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t) \\
 -i\partial_t \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \partial_x^2 - \mu \right] \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) + \Delta(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t) \\
 i\partial_t \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \partial_x^2 - \mu \right] \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}, t) - \Delta^*(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}, t)
 \end{cases} \quad (5.55)$$

Como se puede ver, el término de *pairing* superconductor genera la presencia de operadores de creación en la dinámica de operadores de destrucción y viceversa. La naturaleza misma del apareamiento superconductor hace, además, que estos operadores que acompañan a Δ y Δ^* tengan un spin distinto al del operador cuya dinámica se está describiendo.

A partir de los operadores de la Ecuación (5.55) es posible definir las funciones de Green (5.31), (5.32), (5.35) y (5.36). Junto con esas funciones, debido a la estructura del Hamiltoniano y lo mencionado en el párrafo anterior, también se definen las funciones de Green anómalas, F , las cuales involucran valores medios de productos de dos operadores de creación o dos operadores de destrucción. Tanto la función de Green G como la anómala F se encuentran relacionadas con otras dos funciones, \bar{G} y \bar{F} , a través de la simetría CT (conjugación de carga junto a inversión temporal, ver Sección 2.3) de manera tal de que todo esto puede representarse de la siguiente manera

$$\hat{G}^{\text{all}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') = \begin{pmatrix} G^{\text{all}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') & F^{\text{all}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') \\ \bar{F}^{\text{all}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') & \bar{G}^{\text{all}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') \end{pmatrix}, \quad (5.56)$$

donde el supraíndice hace alusión a la posibilidad de escribir de esta forma a las distintas funciones de Green (menor, mayor, retardada y avanzada).

Ahora bien, una parte de los fenómenos de transporte que se analizan en la presente tesis puede ser descripta, como se vió en la Sección 5.6 a partir de la función de Green menor (ver Ecuación (5.53)). En este caso, la función de Green menor será

$$\begin{aligned}\hat{G}^<(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') &= \begin{pmatrix} G^<(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') & F^<(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') \\ \bar{F}^<(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') & \bar{G}^<(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') \end{pmatrix} \\ &= i \begin{pmatrix} \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t) \rangle & \langle \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}', t') \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}, t) \rangle \\ \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \rangle & \langle \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}', t') \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}, t) \rangle \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (5.57)$$

Como se puede ver en la Ecuación (5.53), la función de Green menor es un correlador que involucra elementos de los reservorios entre los que circula la corriente. Su expresión se puede derivar a partir de (5.39), para luego, utilizando la Ecuación (5.43) obtener una expresión en términos de funciones de Green (retardadas, avanzadas y autoenergías) de un reservorio. Teniendo en cuenta esto, a continuación se presentará, a modo de guía, el procedimiento para obtener las expresiones analíticas de las funciones de Green G^r y F^r para el caso de un superconductor BCS. Dado que para los cálculos numéricos es más simple la implementación de modelos tipo *tight-binding* (ver Sección 2.2), los mismos se realizarán para la versión discretizada del Hamiltoniano (5.54), es decir, para (3.7).

Expresiones Analíticas para las Funciones de Green

Se define el spinor de Nambu de la siguiente manera,

$$\hat{\psi}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{\mathbf{k},\downarrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \\ -c_{-\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \end{pmatrix}.\quad (5.58)$$

Teniendo en cuenta que el Hamiltoniano de BCS (3.7) puede re-escribirse como

$$H^{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{h}_{\mathbf{k}}^{\text{BdG}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}}\quad (5.59)$$

donde

$$\hat{h}_{\mathbf{k}}^{\text{BdG}} = \xi_{\mathbf{k}}(\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_0) + \Delta(\hat{\sigma}_0 \otimes \hat{\tau}_x)\quad (5.60)$$

Las ecuaciones de movimiento para las funciones G y F , serán

$$\begin{cases} (\omega + i\eta)G_{\mathbf{k}}^r(\omega) - \xi_{\mathbf{k}}G_{\mathbf{k}}^r(\omega) - \Delta F_{\mathbf{k}}^r(\omega) = 1 \\ (\omega + i\eta)F_{\mathbf{k}}^r(\omega) - \xi_{\mathbf{k}}F_{\mathbf{k}}^r(\omega) - \Delta G_{\mathbf{k}}^r(\omega) = 0 \end{cases}\quad (5.61)$$

Finalmente, es posible escribir una ecuación de movimiento en representación matricial para $\hat{G}_{\mathbf{k}}^r(\omega)$ en donde estará condensada toda la información de la Ecuación (5.56)

$$\hat{G}_{\mathbf{k}}^r(\omega) \left((\omega + i\eta)\hat{\tau}_0 - \hat{h}_{\mathbf{k}}^{\text{BdG}} \right) = \hat{\tau}_0\quad (5.62)$$

con $\hat{h}_{\mathbf{k}}^{\text{BdG}}$ dado por la Ecuación (5.60).

Finalmente, se pueden obtener explícitamente los elementos de la matriz $\hat{G}_{\mathbf{k}}^r(\omega)$ obtienen las funciones de Green

$$G_{\mathbf{k}}^r(\omega) = \frac{\omega + \xi_{\mathbf{k}} + i\eta}{(\omega + i\eta)^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2 - \Delta^2} \quad (5.63)$$

$$F_{\mathbf{k}}^r(\omega) = \frac{-\Delta}{(\omega + i\eta)^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2 - \Delta^2} \quad (5.64)$$

Es fácil ver, a partir de la Ecuación (5.64), que la aparición de la función de Green anómala está determinada por el término de apareamiento superconductor.

5.8. Relaciones de fluctuación-disipación en sistemas en equilibrio

Como se ha mencionado anteriormente, al considerar un sistema en equilibrio, se está pensando que

$$\hat{G}(t, t') \equiv \hat{G}(t - t') \quad (5.65)$$

Asimismo, es posible transformar Fourier de manera tal de tener, en el caso mas general

$$\hat{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t, t') = \sum_{\mathbf{k}} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')} \hat{G}(\omega) \quad (5.66)$$

De esta manera, se obtienen las siguientes relaciones

$$\begin{cases} \hat{G}^<(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = f(\omega) \left[\hat{G}^a(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) - \hat{G}^r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \right] \\ \hat{G}^>(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) = (1 - f(\omega)) \left[\hat{G}^a(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) - \hat{G}^r(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \omega) \right] \end{cases} \quad (5.67)$$

las cuales serán fundamentales a la hora del cálculo de corrientes.

5.9. Corriente Josephson DC en Juntura S-S

En esta sección se presentará el método para el cálculo de la corriente Josephson en una juntura como la de la Figura 4.5. El punto de partida será lo que se introdujo en la Sección 5.6

Al tener una juntura superconductor sobre la que se aplica un campo magnético, el mismo genera un desfase entre los pares de Cooper que atraviesan dicha juntura, de forma análoga a lo que se conoce como efecto Aharonov-Bohm [112]. El Hamiltoniano de la juntura será

$$H_{S-S} = \sum_{\alpha=L,R} H_{\alpha}^{BCS} + H_t, \quad (5.68)$$

donde

$$H_{\alpha}^{BCS} = -t_0 \sum_{\sigma, j=1}^{N_{\alpha}} c_{\alpha, j, \sigma}^{\dagger} c_{\alpha, j+1, \sigma} + \Delta \sum_{j=1} \left(e^{-i\phi_{\alpha}} c_{\alpha, j, \uparrow}^{\dagger} c_{\alpha, j, \downarrow}^{\dagger} + h.c. \right). \quad (5.69)$$

$\alpha = L, R$ simbolizando los reservorios de la izquierda y la derecha de la juntura. El último término de la Ecuación (5.68) representa el contacto entre ambos reservorios y estará dado por

$$H_t = W \sum_{\sigma} c_{L,1,\sigma}^{\dagger} c_{R,1,\sigma} + hc. \quad (5.70)$$

Realizando una transformación de gauge de la forma

$$c_{\alpha,j,\sigma}^{\dagger} \rightarrow e^{-i\frac{\phi\alpha}{2}} c_{\alpha,j,\sigma}^{\dagger} \quad (5.71)$$

se obtiene el término con la fase en la parte correspondiente al acoplamiento. De esta manera, a la hora de calcular la corriente se tendrán que averiguar las expresiones para \dot{N}_{α} con $\alpha = L, R$. De esta manera, luego de realizar cada uno de los conmutadores correspondientes (Ver Ecuación (5.48)) se llega a la siguiente expresión para la corriente Josephson

$$J_J(\phi) = -iW \sum_{\sigma} \left[e^{-i\frac{\phi}{2}} \langle c_{L,1,\sigma}^{\dagger} c_{R,1,\sigma} \rangle - e^{i\frac{\phi}{2}} \langle c_{R,1,\sigma}^{\dagger} c_{L,1,\sigma} \rangle \right] \quad (5.72)$$

Nuevamente, mirando la estructura de los términos de la Ecuación (5.72), es fácil ver que pueden re-escribirse en términos de funciones de Green menores (Ver Ecuación (5.32))

$$J_J(\phi) = eTr \left[\hat{\tau}_z \left(\hat{W}_{LR} \hat{G}_{RL}^{<}(t, t) - \hat{W}_{RL} \hat{G}_{LR}^{<}(t, t) \right) \right] \quad (5.73)$$

donde los productos en la Ecuación (5.73) involucran matrices (Sección 5.7). En particular, el término de acoplamiento entre reservorios será

$$\hat{W}_{LR} = W \hat{\tau}_z e^{i\hat{\tau}_z \frac{\phi}{2}} = W \begin{pmatrix} e^{i\frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & -e^{i\frac{-\phi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (5.74)$$

Finalmente, a partir de la relación de fluctuación-disipación (Sección 5.8, Ecuación (5.67)) se puede escribir la $I_J(\phi)$ en términos de las funciones de Green avanzadas y retardadas.

$$J_J(\phi) = e \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) Tr \left\{ \hat{\tau}_z \left[\hat{W}_{LR} \left(\hat{G}_{RL}^a(\omega) - \hat{G}_{RL}^r(\omega) \right) - \hat{W}_{RL} \left(\hat{G}_{LR}^a(\omega) - \hat{G}_{LR}^r(\omega) \right) \right] \right\} \quad (5.75)$$

Notar que en la Ecuación (5.75) también se transformó Fourier, y se está trabajando en el espacio de frecuencias. Una vez que se llega a este punto, sólo resta hallar explícitamente las expresiones de las funciones de Green avanzadas y retardadas. Ambas verifican la ecuación de Dyson, por lo tanto

$$\hat{G}_{RL}^{r/a}(\omega) = \hat{G}_R^{r/a}(\omega) \hat{W}_{RL} \hat{g}_L^{r/a}(\omega) = \hat{g}_R^{r/a}(\omega) \hat{W}_{RL} \hat{G}_L^{r/a}(\omega). \quad (5.76)$$

Aquí, las letras minúsculas hacen alusión a las funciones de Green para cada uno de los sistemas desacoplados, es decir, las calculadas sobre el Hamiltoniano (5.69). Por otro lado, las funciones en mayúscula se calculan a partir del Hamiltoniano que incluye el contacto entre ambos reservorios de la Ecuación (5.68).

Es importante remarcar que el resultado de la Ecuación (5.76) se puede generalizar de acuerdo a cada juntura con la que se decida trabajar.

5.10. Corriente Eléctrica en Junturas Normal-Superconductor

A continuación, se presentará el desarrollo teórico detrás del cálculo de corriente para una juntura con un reservorio conductor normal (R) y un superconductor (L). En la presente tesis se considerará al superconductor tanto dentro como fuera de la fase topológica. Aún así, la generalidad de la cuenta aquí presentada (y lo que se presentará en la próxima Sección) permite que los ingredientes propios de cada una de las fases, se encuentren dentro de las expresiones de las funciones de Green.

Para este caso, se consideró una diferencia de potencial eV aplicada sobre el sistema normal. Ahora bien, al estar trabajando con una juntura con un superconductor, los grados de libertad incluirán la fenomenología correspondiente a los electrones (e), así como la correspondiente a los agujeros (h). Luego, la corriente total será

$$J_T = J_e + J_h. \quad (5.77)$$

Las expresiones generales para J_e y J_h se corresponden con lo obtenido en la Ecuación (5.53). Re-escribiendo la función de Green menor a partir de la Ecuación (5.43)

$$J_T = \frac{2e}{\hbar} \operatorname{Re} \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi} \operatorname{Tr} \left[\hat{\tau}_z (\hat{\Sigma}_R^< \hat{G}^a + \hat{\Sigma}_R^r \hat{G}^<) \right] \right\}, \quad (5.78)$$

donde

$$J_e = \frac{2e}{\hbar} \operatorname{Re} \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{j=1}^2 \left[\hat{\tau}_z (\hat{\Sigma}_R^< \hat{G}^a + \hat{\Sigma}_R^r \hat{G}^<) \right]_{j,j} \right\} \quad (5.79)$$

$$J_h = \frac{2e}{\hbar} \operatorname{Re} \left\{ \int \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{j=3}^4 \left[\hat{\tau}_z (\hat{\Sigma}_R^< \hat{G}^a + \hat{\Sigma}_R^r \hat{G}^<) \right]_{j,j} \right\}. \quad (5.80)$$

Si se toma la expresión para J_e y se considera la base $\Psi = (\psi_\uparrow, \psi_\downarrow, \psi_\uparrow^\dagger, \psi_\downarrow^\dagger)$. Analizando en detalle los distintos términos involucrados en la expresión de la corriente, es posible decir que

$$\hat{\Sigma}_\alpha^< = \hat{f}_\alpha (\hat{\Sigma}_\alpha^a - \hat{\Sigma}_\alpha^r), \quad \alpha = R, L \quad (5.81)$$

$$\hat{G}^< = \hat{G}^r \hat{\Sigma}^< \hat{G}^a = \hat{G}^r \left[\hat{f}_R (\hat{\Sigma}_R^a - \hat{\Sigma}_R^r) + \hat{f}_L (\hat{\Sigma}_L^a - \hat{\Sigma}_L^r) \right] \hat{G}^a \quad (5.82)$$

$$\hat{G}^a - \hat{G}^r = \hat{G}^r \left[\hat{\Sigma}_T^a - \hat{\Sigma}_T^r \right] \hat{G}^a = \hat{G}^r \left[\hat{\Sigma}_R^a + \hat{\Sigma}_L^a - \hat{\Sigma}_R^r - \hat{\Sigma}_L^r \right] \hat{G}^a. \quad (5.83)$$

Las funciones f_L y f_R son las funciones de Fermi para cada uno de los reservorios. Teniendo en cuenta la base en la cual se está trabajando, y cómo se está aplicando la diferencia de potencial

$$\hat{f}_L = f(\omega) \hat{I} = f(\omega) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.84)$$

mientras que

$$\hat{f}_R = \begin{pmatrix} f^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f^- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f^- \end{pmatrix}, \quad (5.85)$$

donde $f^\mp = f(\omega \mp eV)$. Finalmente, reemplazando las Ecuaciones (5.81), (5.82) y (5.83) en la expresión para la corriente total, Ecuación (5.79),

$$\begin{aligned} J_T = & \frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ (f^- - f^+) \sum_{\substack{j=1,2 \\ \bar{j}=3,4}} \left[\hat{\Sigma}_R^a - \hat{\Sigma}_R^r \right]_{j,j} \hat{G}_{j,\bar{j}}^r \left[\hat{\Sigma}_R^a - \hat{\Sigma}_R^r \right]_{\bar{j},\bar{j}} \hat{G}_{\bar{j},j}^a \right\} \\ & + \frac{e}{\hbar} \int \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ \left[(f_L - f^+) \sum_{j=1,2} \left(\hat{\Sigma}_R^r - \hat{\Sigma}_R^a \right) \hat{G}^r \left(\hat{\Sigma}_L^a - \hat{\Sigma}_L^r \right) \hat{G}^a \right]_{j,j} \right\}. \quad (5.86) \end{aligned}$$

En el Capítulo 7 se utilizará esta expresión y se verá que cada uno de los términos posee un significado físico fundamental en los fenómenos de transporte que se estudian.

5.11. Funciones de Green para Sistemas Finitos

Como se ha visto en las Secciones 5.9 y 5.10 y en particular en las Ecuaciones (5.76) y (5.86), el elemento necesario para poder calcular las corrientes de carga es la función de Green retardada del sistema acoplado a reservorios. En la presente sección se presentarán los métodos utilizados para la resolución numérica de los modelos estudiados. En el Apéndice B se ofrece la resolución del sistema conformado por dos sitios. La información allí volcada resultará complementaria a las cuentas presentadas a continuación.

Se supondrá un sistema descrito por un Hamiltoniano tipo tight-binding (Sección 2.2).

5.11.1. Método Recursivo para Funciones de Green

En esencia, la idea de particionar el sistema y modelarlo como un cadena es lo que subyace en el método de recursión para funciones de Green. En [113] se puede encontrar un desarrollo suplementario de lo que se presentará a continuación.

El punto de partida será escribir las ecuaciones de movimiento para las funciones de Green retardadas de cada uno de los sitios, indicados en los subíndices,

$$\begin{aligned} (\omega - H_{00})G_{00}^r &= I + H_{01}G_{10}^r \\ (\omega - H_{00})G_{10}^r &= H_{01}^\dagger G_{00}^r + H_{01}G_{20}^r \\ &\dots \\ (\omega - H_{00})G_{n0}^r &= H_{01}^\dagger G_{n-1,0}^r + H_{01}G_{n+1,0}^r, \quad (5.87) \end{aligned}$$

donde $H_{i,j}$ denota el elemento de matriz del Hamiltoniano entre los sitios i y j .

En la Ecuación (5.87) se supone que el sistema es homogéneo, es decir, $H_{00} = H_{11} = \dots$ y $H_{01} = H_{12} = \dots$. A continuación se discutirá lo que se conoce como método efectivo de capas (*method of effective layers*).

De la última línea de la Ecuación (5.87),

$$G_{n0}^r(\omega) = (\omega - H_{00})^{-1}(H_{01}^\dagger G_{n-1,0}^r + H_{01} G_{n+1,0}^r), \quad n \geq 1. \quad (5.88)$$

Para $n = 1$ y reemplazando en la primera línea de la Ecuación (5.87),

$$\left[\omega - H_{00} - H_{01}(\omega - H_{00})^{-1}H_{01}^\dagger \right] G_{00}^r = I + H_{01}(\omega - H_{00})^{-1}H_{01} G_{20}^r \quad (5.89)$$

se obtiene una relación entre G_{00}^r y G_{20}^r . Luego, aplicando la Ecuación (5.87) en $G_{n-1,0}^r$ y en $G_{n+1,0}^r$, se obtiene

$$\begin{aligned} G_{n-1,0}^r &= [\omega - H_{00}]^{-1} \left(H_{01}^\dagger G_{n-2,0}^r + H_{01} G_{n,0}^r \right) \\ G_{n+1,0}^r &= [\omega - H_{00}]^{-1} \left(H_{01}^\dagger G_{n,0}^r + H_{01} G_{n+2,0}^r \right). \end{aligned} \quad (5.90)$$

Lo cual, si se reemplaza en la Ecuación (5.89)

$$\begin{aligned} [(\omega - H_{00}) - H_{01}(\omega - H_{00})^{-1}H_{01}^\dagger - H_{01}^\dagger(\omega - H_{00})^{-1}H_{01}] G_{n,0}^r = \\ H_{01}^\dagger(\omega - H_{00})^{-1}H_{01}^\dagger G_{n-2,0}^r + H_{01}(\omega - H_{00})^{-1}H_{01} G_{n+2,0}^r \end{aligned} \quad (5.91)$$

Como puede verse, los primeros vecinos desaparecen de las Ecuaciones (5.89) y (5.91). Todo esto puede ser escrito de una manera más compacta

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_{1s}) G_{00}^r &= I + \alpha_l G_{20}^r \\ (\omega - \epsilon_1) G_{n0}^r &= \beta_l G_{n-2,0}^r + \alpha_l G_{n+2,0}^r \quad n \geq 2 \\ (\omega - \epsilon_1) G_{nn}^r &= I + \beta_l G_{n-2,0}^r + \alpha_l G_{n+2,0}^r \end{aligned} \quad (5.92)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha_l &= H_{01}(\omega - H_{00})^{-1}H_{01} \\ \beta_l &= H_{01}^\dagger(\omega - H_{00})^{-1}H_{01}^\dagger \\ \epsilon_{1s} &= H_{00} + H_{01}(\omega - H_{00})^{-1}H_{01}^\dagger \\ \epsilon_1 &= H_{00} + H_{01}(\omega - H_{00})^{-1}H_{01}^\dagger + H_{01}^\dagger(\omega - H_{00})^{-1}H_{01} \end{aligned} \quad (5.93)$$

Las dos primeras Ecuaciones en (5.93) describen interacciones de primeros vecinos efectivas mientras que las otras dos Ecuaciones representan los elementos de orden cero, también de manera efectiva, para una superficie (ϵ_{1s}) y para las capas internas (ϵ_1).

A excepción de los elementos de matriz de orden cero, $\epsilon_{1s} \neq \epsilon_1$, las expresiones en (5.92) son análogas (más precisamente, isomorfas) a las expresiones en (5.87).

Como consecuencia, el procedimiento que comienza con la Ecuación (5.87) puede ser repetido l veces y obtener una secuencia iterativa. Con cada repetición se obtendrá un sistema efectivo con 2^l constantes de red. Este método es conocido como *decimation* y en esencia permite encapsular una gran cantidad de sitios en una recursión de tres puntos usando parámetros renormalizados. Luego de l iteraciones, lo que se obtiene es un sitio 1 acoplado a una cadena de 2^l sitios.

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_{l,s}) G_{00}^r &= I + \alpha_l G_{2^l(n+1),0}^r \\ (\omega - \epsilon_{l,s}) G_{2^l n,0}^r &= \beta_l G_{2^l(n-1),0}^r + \alpha_l G_{2^l(n+1),0}^r \quad n \geq 1 \end{aligned} \quad (5.94)$$

El método finalizará cuando $||\alpha_l||$ y $||\beta_l||$ sean lo suficientemente chicos. Eso sucederá cuando $\epsilon_l = \epsilon_{l-1}$, $\epsilon_{l,s} = \epsilon_{l-1,s}$ y

$$\begin{aligned} (\omega - \epsilon_{l,s})G_{00}^r &\simeq I \\ (\omega - \epsilon_l)G_{2^l n, 2^l n}^r &\simeq I \quad n \geq 1 \end{aligned} \quad (5.95)$$

Como resultado, se logra obtener una buena aproximación para G_{00} ,

$$G_{00}^r \simeq (\omega - \epsilon_{l,s})^{-1}, \quad (5.96)$$

y para $G_{nn}^r (n \rightarrow \infty) \equiv G_b^r$, la función de Green en el bulk. Más precisamente,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} G_{nn}^r = G_{2^l, 2^l}^r \simeq (\omega - \epsilon_l)^{-1} \equiv G_b^r \quad (5.97)$$

Un detalle interesante para destacar de este procedimiento iterativo es que el mismo es exacto en el sentido de que ninguna interacción ha sido omitida en la cadena a primeros vecinos. Esto no implica ninguna especial restricción dado que cualquier cadena de átomos con interacción (de un solo cuerpo) puede pensarse, de manera efectiva, como una cadena con interacciones a primeros vecinos.

Por otro lado, y como ya se ha mencionado en la Sección 5.10, para este método no se impuso ninguna restricción sobre el Hamiltoniano más que la homogeneidad. Esto hace que dado *cualquier* Hamiltoniano con estas características, es posible computar la función de Green para el caso semi-infinito sin mayor dificultad que la que implica este método.

Estudio del Efecto Josephson en Junturas con TRITOPS

Los avances en las técnicas de nanofabricación han hecho posible la elaboración de dispositivos en donde electrodos superconductores se conectan con nanoestructuras no superconductoras, como pueden ser los *Quantum Dots* (QD). Como se ha visto en el Capítulo 4, las propiedades que caracterizan a los fenómenos de transporte en estos dispositivos híbridos resultan de la combinación de fenómenos cuánticos macroscópicos que involucran un gran número de electrones (superconductividad) y la habilidad de controlar electrones individualmente, gracias a los QD.

El objetivo del presente capítulo es estudiar de manera detallada el comportamiento de la corriente Josephson en sistemas híbridos que contienen superconductores topológicos con simetría de inversión temporal (TRITOPS). A partir del análisis y comparación del espectro de Andreev y la corriente Josephson para todas las posibles configuraciones unidimensionales que contienen uno o dos cables TRITOPS con distintas orientaciones del acoplamiento de spin-órbita se identifican propiedades características de la fase topológica que pueden servir de guía en futuros experimentos. Se incluye también en el análisis la presencia de un QD interactuante en la juntura con el objetivo de estudiar la influencia de las interacciones de muchos cuerpos.

Cuando la juntura está compuesta por TRITOPS y un QD embebido, y se preserva al menos una componente de spin, la transición $0 - \pi$ (Figura 4.6) desaparece, como se discute en [81]. Esto se debe al apantallamiento del momento magnético del QD por parte de la combinación de los modos a energía cero a ambos lados del mismo. Se genera un estado fundamental correlacionado, y se observa en la corriente Josephson un comportamiento 0-fase independientemente de la intensidad del parámetro de interacción de muchos cuerpos en el QD. Otro rasgo remarcable es la existencia de discontinuidades con grandes saltos en la corriente Josephson tanto en $\phi = 0$ como en $\phi = \pi$ para configuraciones con TRITOPS y superconductores ordinarios (es decir, no-topológicos)[78, 114].

Los resultados presentados en este capítulo fueron publicados en *Physical Review B* **99**, 085431 (2019).

Modelo

La estructura completa del modelo utilizado para las configuraciones estudiadas está dada por el Hamiltoniano

$$H = \sum_{\alpha} H_{\alpha} + H_J, \quad (6.1)$$

con $\alpha = L, R$ las etiquetas de cada uno de los cables intervinientes, y H_J el Hamiltoniano para la juntura. A continuación se describirán las diferentes partes de manera separada.

6.1. Cable TRITOPS en la Red

El modelo continuo de baja energía de la Ecuación (3.24) resulta importante para analizar y entender los sistemas microscópicos con los que se trabaja en esta tesis. Ahora bien, para los cálculos numéricos en los cuales se resuelven dichos sistemas, resulta conveniente utilizar la descripción de los mismos a partir de los modelos de red.

En un modelo de red, los TRITOPS pueden describirse a partir del siguiente Hamiltoniano

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i,j} \left[\psi_i^{\dagger} h_{i,j} \psi_j + \psi_i^{\dagger} \Delta_{i,j} \psi_j^{\dagger} \right] + \text{h.c.}, \\ h_{i,j} &= -(t + i\lambda \vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \delta_{j,i+1} - \mu \delta_{i,j}, \\ \Delta_{i,j} &= (\tilde{\Delta} \delta_{j,i+1} + \Delta \delta_{i,j}) i\sigma_y, \end{aligned} \quad (6.2)$$

donde se definen los spinores $\psi_j^{\dagger} = (c_{j,\uparrow}^{\dagger}, c_{j,\downarrow}^{\dagger})$ y $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli en el espacio de spin. El término de hopping entre primeros vecinos es t , la magnitud de la interacción spin-órbita viene dada por el término λ mientras que su dirección es \vec{n} . μ corresponde al potencial químico y finalmente Δ y $\tilde{\Delta}$ representan la superconductividad tipo-s y tipo-s extendida del sistema.

Bajo la simetría de inversión temporal, el spinor que aniquila un electrón transforma según $\mathbb{T}\psi_j\mathbb{T}^{-1} = i\sigma^y\psi_j$. Luego, es posible chequear que este modelo, además, posee simetría de inversión temporal, $\mathbb{T}H\mathbb{T}^{-1} = i\sigma^y H$ siempre que los coeficientes $t, \lambda, \mu, \tilde{\Delta}$ y Δ sean reales.

El Hamiltoniano de la Ecuación (6.2) corresponde al modelo introducido por Zhang-Kane-Mele en su trabajo pionero [70] para TRITOPS (clase DIII) unidimensionales. Los componentes esenciales para la fase topológica de clase DIII son la interacción spin-órbita λ y la superconductividad tipo-s extendida $\tilde{\Delta}$. Como bien se discute en [70], la transición de fase del sistema hacia un TRITOPS sucede dentro del rango en que el potencial químico satisface $|\mu - \epsilon_0| < \epsilon_n$, con $\epsilon_0 = (t\Delta)/\tilde{\Delta}$ y $\epsilon_m = 2|\lambda|\sqrt{1 - \Delta^2/(4\tilde{\Delta}^2)}$. En la Figura 6.1 se observa el espectro de energía para el Hamiltoniano de la Ecuación (6.2)

El estado a energía cero corresponde a dos pares de Majorana Kramers localizados en los extremos opuestos del sistema. La presencia de estos pares de Majorana Kramers es

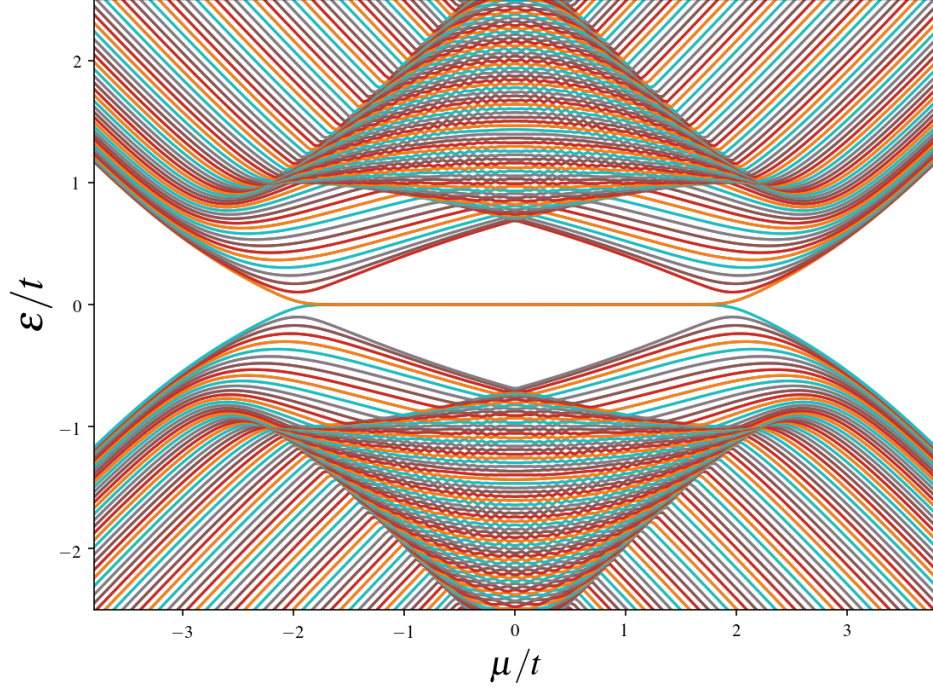


Figura 6.1: Espectro de energía para un TRITOPS dado por la Ecuación (6.2) como función del potencial químico μ . Resultado reproducido de la Referencia [70].

característica de la fase topológica y los mismos pueden representarse con los operadores fermiónicos $\gamma_s, \tilde{\gamma}_s$ con $s = \pm$, satisfaciendo [82]

$$\gamma_{,+}^\dagger = i \text{sgn}(\lambda \tilde{\Delta}) \gamma_{-}, \quad \tilde{\gamma}_{+}^\dagger = -i \text{sgn}(\lambda \tilde{\Delta}) \tilde{\gamma}_{-} \quad (6.3)$$

Es importante remarcar que $+$, $-$ representan las orientaciones paralela y antiparalela del spin a lo largo de la dirección \vec{n} .

Junturas

En el presente trabajo se consideran dos tipos de junturas: (i) junturas directas, descritas por un Hamiltoniano de tuneleo entre dos cables

$$H_{J,\text{dir}} = t_J \sum_s (e^{i\phi/2} c_{L,s}^\dagger c_{R,s} + \text{h.c.}); \quad (6.4)$$

(ii) una juntura que contiene un Quantum Dot interactuante embebido entre los dos cables, cuyo Hamiltoniano de tuneleo es

$$\begin{aligned} H_{J,\text{dot}} &= \sum_s (t_L e^{i\phi/4} c_{L,s}^\dagger d_s + t_R e^{i\phi/4} d_s^\dagger c_{R,s} + \text{h.c.}) + H_d, \\ H_d &= \varepsilon_d (n_{d,\uparrow} + n_{d,\downarrow}) + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

$\phi = 2\pi\Phi/\Phi_0$, donde Φ es el flujo magnético total y los índices $\alpha = L, R$ corresponden a los sitios en los extremos de los cables a la izquierda y la derecha de la juntura, respectivamente.

Configuraciones y simetrías

A continuación se detallan las configuraciones consideradas:

- TRITOPS - TRITOPS
 - Superconductor - TRITOPS
- } Tuneleo directo
-
- Superconductor - Superconductor
 - TRITOPS - TRITOPS
 - Superconductor - TRITOPS
- } QD embebido caracterizado por el modelo de Anderson de la Ecuación (4.2)

Cada porción del sistema por separado posee conjugación de carga, inversión temporal así como conservación de la proyección de spin en la dirección en la que se encuentra el acoplamiento de spin-órbita (*Mirror Symmetry*) y quiralidad (ver Sección 2.3). Una vez que dichas porciones se conectan, al tener diferentes orientaciones en el acoplamiento de spin-órbita, las dos últimas simetrías mencionadas se rompen. Para los casos con flujo no nulo o la mitad del cuanto de flujo superconductor ($\phi \neq 0, \pi$), también se rompe la simetría de inversión temporal. Por último, cabe destacar que para el sistema como un todo, la paridad fermiónica es una cantidad conservada.

Los casos no interactuantes (es decir, $U = 0$ en el QD) y de longitud finita pueden analizarse por medio de la diagonalización exacta del Hamiltoniano. Para estudiar estas configuraciones con un QD interactuante ($U \neq 0$) así como el espectro de muchos cuerpos (*many body*), se recurre a Hamiltonianos efectivos de baja energía. Como se verá, dichos Hamiltonianos efectivos resultan una herramienta muy útil a la hora de entender las propiedades físicas más relevantes en dichas junturas. Asimismo, la corriente Josephson se calcula a partir de

$$J_J(\phi) = \frac{\partial E_0^{\text{eff}}(\phi)}{\partial \phi} \quad (6.6)$$

con $E_0^{\text{eff}}(\phi)$ la energía del estado fundamental del espectro de muchos cuerpos calculado a partir del Hamiltoniano efectivo. Para el caso de los cables de longitud finita, se puede calcular la corriente a partir de las funciones de Green de Matsubara (ver Apéndice C) de la siguiente manera

$$J_{\text{dir}}(\phi) = 2t_J \sum_s \lim_{\tau=0^-} \text{Im} [\mathcal{G}_{LR,s}(\tau)], \quad (6.7)$$

$$J_{\text{dot}}(\phi) = 2t_L \sum_s \lim_{\tau=0^-} \text{Im} [\mathcal{G}_{Ld,s}(\tau)] \quad (6.8)$$

donde t_J y t_L son los definidos en las Ecuaciones (6.4) y (6.5), respectivamente. $\mathcal{G}_{LR,s}(\tau) = -\langle T_\tau [c_{L,s}(\tau) c_{R,s}^\dagger(0)] \rangle$ la función de Green de Matsubara para el caso de la juntura directa, y $\mathcal{G}_{Ld,s} = -\langle T_\tau [c_{L,s}(\tau) d_s^\dagger(0)] \rangle$ la función de Green de Matsubara para la juntura con un QD incluido. Esta última expresión puede ser evaluada de los resultados del espectro de una partícula (*single-particle*). En los resultados mostrados a continuación, se toma $T = 0$. Asimismo, los cálculos de dichas funciones de Green se llevan a cabo a partir de diferentes Hamiltonianos de tuneleo según la composición de la juntura.

6.2. Resultados para el caso de la Juntura Directa

6.2.1. TRITOPS-TRITOPS

En la Referencia [81] se mostró que el comportamiento de la corriente Josephson está correctamente descrito a partir de un modelo efectivo de baja energía en donde la contribución más relevante está dada por la combinación de los estados de Majorana a través de la juntura. En ese sentido, el Hamiltoniano de la Ecuación (6.4) para el caso de esta juntura será

$$H_{\text{TRITOPS-TRITOPS}}^{\text{eff}} = H_{\text{T-T}}^{\text{eff}} = t_J \sum_{s=\uparrow,\downarrow} e^{i\phi/2} \tilde{\gamma}_{L,s}^\dagger \gamma_{R,s} + \text{h.c.} \quad (6.9)$$

Los subíndices L y R hacen referencia a los TRITOPS de la izquierda y la derecha de la juntura, respectivamente. $\phi = 2\pi\Phi/\Phi_0$, donde Φ es el flujo magnético total. Los operadores $\gamma_{\alpha,s}$ y $\tilde{\gamma}_{\alpha,s}$ (con $\alpha = L, R$) se relacionan con los operadores de Bogoliubov definidos en (6.3) a través de la transformación

$$\begin{aligned} (\gamma_{\alpha,\uparrow}, \gamma_{\alpha,\downarrow})^T &= U_\alpha (\gamma_{\alpha,+}, \gamma_{\alpha,-})^T, \\ (\tilde{\gamma}_{\alpha,\uparrow}, \tilde{\gamma}_{\alpha,\downarrow})^T &= U_\alpha (\tilde{\gamma}_{\alpha,+}, \tilde{\gamma}_{\alpha,-})^T, \end{aligned} \quad (6.10)$$

y representan, como se mencionó anteriormente, el par de Kramers de energía cero en el borde.

La matriz unitaria que relaciona los operadores se define a partir de la orientación del vector $\mathbf{n}_\alpha = (\sin \theta_\alpha \cos \varphi_\alpha, \sin \theta_\alpha \sin \varphi_\alpha, \cos \theta_\alpha)$, de la siguiente manera

$$U_\alpha = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_\alpha}{2} & -\sin \frac{\theta_\alpha}{2} e^{i\varphi_\alpha} \\ \sin \frac{\theta_\alpha}{2} e^{-i\varphi_\alpha} & \cos \frac{\theta_\alpha}{2} \end{pmatrix}. \quad (6.11)$$

Sin pérdida de generalidad, se toma \mathbf{n}_R en la dirección z y $\text{sgn}(\tilde{\Delta}_\alpha \lambda_\alpha) > 0$. Re-escribiendo, $\tilde{\gamma}_{L,+} = \tilde{\gamma}$ y $\gamma_{R,+} = \gamma$,

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}_{L,\uparrow} &= \cos \frac{\theta}{2} \tilde{\gamma} - i e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \tilde{\gamma}^\dagger, & \gamma_{R,\uparrow} &= \gamma, \\ \tilde{\gamma}_{L,\downarrow} &= e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \tilde{\gamma} + i \cos \frac{\theta}{2} \tilde{\gamma}^\dagger, & \gamma_{R,\downarrow}^\dagger &= i\gamma. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Reemplazando esta transformación en la Ecuación (6.9) y haciendo uso de las relaciones de la Ecuación (6.3), se obtienen la siguiente expresión para el Hamiltoniano efectivo

$$H_{\text{T-T}}^{\text{eff}} = t_0 \tilde{\gamma}^\dagger \gamma + \delta_0 \tilde{\gamma} \gamma + \text{h.c.} \quad (6.13)$$

Donde se define

$$t_0 = 2t_J \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\phi}{2}, \quad \delta_0 = -2t_J \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\phi}{2} e^{i\varphi}. \quad (6.14)$$

Notar que las Ecuaciones en (6.13) son independientes del ángulo azimutal φ . De hecho, es posible eliminar dicho parámetro a partir de las transformaciones de gauge: $\tilde{\gamma} \rightarrow e^{i\varphi/2} \tilde{\gamma}$, $\gamma \rightarrow e^{i\varphi/2} \gamma$.

Si la transformación que relaciona los modos cero $\gamma_{\alpha,\sigma}$ con aquellos que aparecen en la Ecuación (6.2) es conocida (por ejemplo, numéricamente para cadenas largas, o analíticamente como en [82]), el parámetro de acoplamiento de la junta, t_J , puede ser calculado explícitamente. En la Ecuación (6.9) se considera, por simplicidad, $t_L = t_R = t$. En general, t_J es más chico pero del orden de t . Dado que en la construcción del Hamiltoniano efectivo las energías por encima del gap superconductor no se tienen en cuenta, la validez cuantitativa de dicho Hamiltoniano estará restringida a $t_J \ll \left| \tilde{\Delta}_\alpha \right|, |\Delta_\alpha|$ (ver Ecuación (6.2)). Los términos no tenidos en cuenta en la derivación del Hamiltoniano efectivo de la Ecuación (6.13) son las hibridaciones de los modos cero en los extremos opuestos, con las cuasi-partículas de alta energía por encima del gap. Dichos procesos, de ser tenidos en cuenta, influirán en las expresiones de los parámetros del Hamiltoniano efectivo, pero no modificarán su forma.

Los estados de muchas partículas para H_{T-T}^{eff} dados por la Ecuación (6.13) se construyeron a partir de los operadores fermiónicos γ y $\tilde{\gamma}$. Estos estados son

$$|1\rangle = |0, 0\rangle, \quad |2\rangle = |1, 0\rangle, \quad |3\rangle = |0, 1\rangle, \quad |4\rangle = |1, 1\rangle, \quad (6.15)$$

donde las entradas a izquierda y a derecha denotan los estados de ocupación de $\gamma^\dagger\gamma$ y $\tilde{\gamma}^\dagger\tilde{\gamma}$, respectivamente. H_{T-T}^{eff} conserva la paridad, luego, en el sub-espacio par, las dos auto-energías son

$$E_{\pm}^p(\phi) = \pm|\delta_0(\phi)| = \pm 2t_J \cos(\theta/2) \cos(\phi/2), \quad (6.16)$$

mientras que en el sub-espacio impar,

$$E_{\pm}^i(\phi) = \pm t_0(\phi) = \pm 2t_J \sin(\theta/2) \sin(\phi/2). \quad (6.17)$$

Los resultados del espectro y la corriente Josephson se muestran en la Figura 6.2. El primer rasgo a remarcar en estos resultados surge al observar los saltos en el comportamiento de la corriente. Esto refleja el (los) cruce(s) de nivel(es) correspondiente(s) a los estados de sub-gap. Como se mencionó en el Capítulo 4 y se muestra en [81, 102], esto no es así para la fase no topológica en donde se exhibe el comportamiento suave conocido.

Resulta notable el efecto que la orientación relativa θ del acoplamiento spin-órbita de ambos cables genera tanto en el espectro de Andreev como en la corriente Josephson. Para el caso de cables con acoplamiento spin-órbita en la misma dirección ($\theta = 0$), el espectro contiene sólo dos niveles con energías dependientes del flujo, las cuales pertenecen al sub-espacio del Hamiltoniano efectivo con un número impar de partículas, y que se cruzan en $\phi = \pi$, mientras que los estados en el sub-espacio par tienen energía cero, independientemente del valor de ϕ . Como consecuencia del cruce de niveles, la corriente Josephson posee una discontinuidad en $\phi = \pi$. Este rasgo ha sido previamente discutido en Referencias [73, 78, 81, 114]. Ahora bien, para cables con diferente orientación entre los acoplamientos de spin-órbita ($\theta \neq 0$), los estados dentro del sub-espacio con número par de partículas en H_{T-T}^{eff} poseen dispersión en ϕ . Los cruces de niveles entre estados con distinta paridad tienen lugar en los intervalos donde $0 \leq \phi \leq \pi$ y $\pi \leq \phi \leq 2\pi$, con la consecuente discontinuidad en la junta Josephson, como bien se observa en la Figura 6.2.

En el límite en el cual \mathbf{n}_L y \mathbf{n}_R forman un ángulo $\theta = \pi$, los estados dentro del sub-espacio con número de partículas impar no dispersa y tienen energía cero, mientras

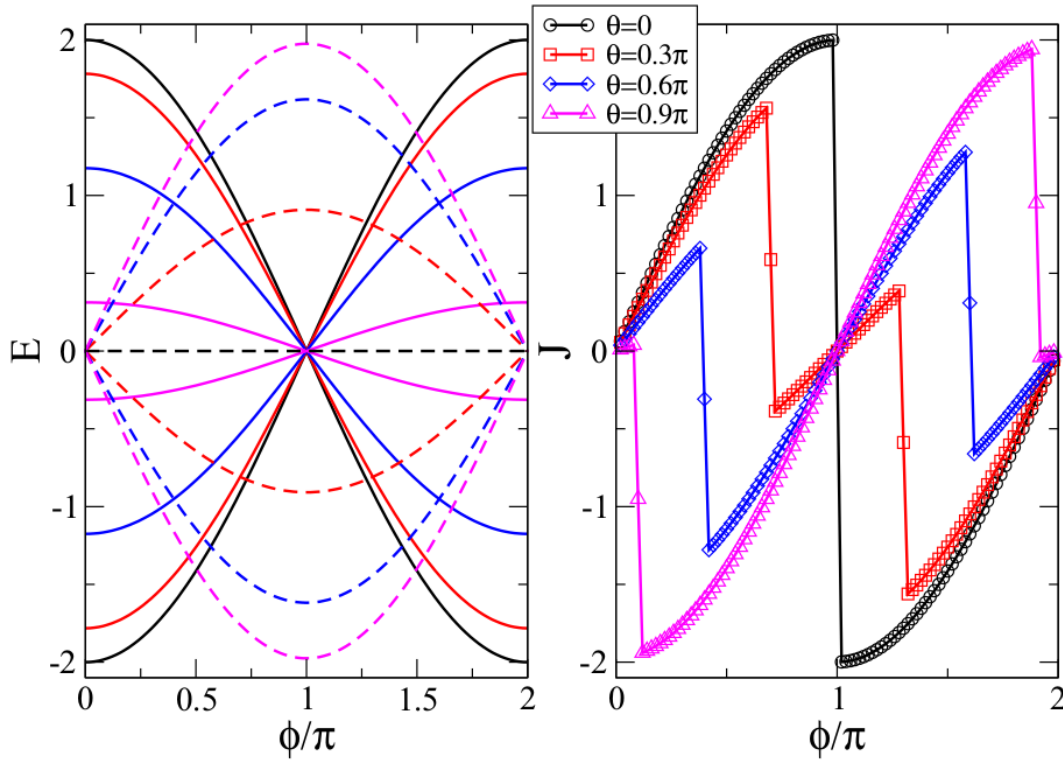


Figura 6.2: Espectro de Andreev para la juntura TRITOPS-TRITOPS con tuneo directo entre ambos cables calculado a partir del Hamiltoniano efectivo (izquierda) y corriente Josephson calculada a partir de la Ecuación 6.6 (derecha). Las curvas sólidas y puntuadas corresponden a los estados dentro del subespacio con cantidad de partículas impar y par, respectivamente. Las distintas curvas corresponden a diferentes orientaciones relativas de θ en la dirección del acoplamiento del spin-órbita. Las energías están expresadas en unidades de t .

que aquellos en el sub-espacio par determinan el comportamiento de la corriente Josephson. Una característica interesante en este límite es que ambos estados de Andreev (dispersivos) se cruzan en $\phi = 0$, llevando a una discontinuidad con un salto abrupto en la corriente Josephson a flujo cero. Dicho comportamiento resulta sumamente peculiar y también ha sido observado en otras junturas Josephson con superconductores topológicos pero con ruptura de la simetría de inversión temporal [115]. En este caso, el origen es una fase efectiva en la juntura, introducida por las diferentes orientaciones de la interacción de spin-órbita de ambos cables. Puede notarse que, cuando ambas direcciones coinciden, la proyección de spin en esa dirección es una cantidad conservada. Sin embargo, esta simetría no se encuentra en el caso más general. A partir de la solución exacta para el Hamiltoniano efectivo, Ecuaciones (6.16) y (6.17), se observa que los roles de θ y ϕ pueden ser intercambiados. En particular, modificar el valor de θ de 0 a π es equivalente a variar en π el valor de ϕ . Esto puede entenderse gracias a las relaciones que satisfacen los modos cero y que se encuentran generalizados en la Ecuación (6.3) (ver [82]).

En la Figura 6.3 se observan los resultados de la corriente Josephson calculada a partir de la diagonalización exacta de cables finitos de dimensión L . Es posible ver que cuanto más largos se consideran los cables, las corrientes reproducen mejor los comportamientos cualitativos mostrados anteriormente en la Figura 6.2. Para longitudes pequeñas, los modos en los extremos de cada TRITOPS comienzan a hibridizarse y el comportamiento

de la corriente $J(\phi)$ comienza a apartarse de lo descrito por el caso efectivo en donde, como se mencionó más arriba, sólo los modos cero se conectan directamente a la junta. Es decir, para el caso de sistemas suficientemente largos en los cuales los estados de borde no se hibridizan, se observa que la descripción del Hamiltoniano efectivo es excelente.

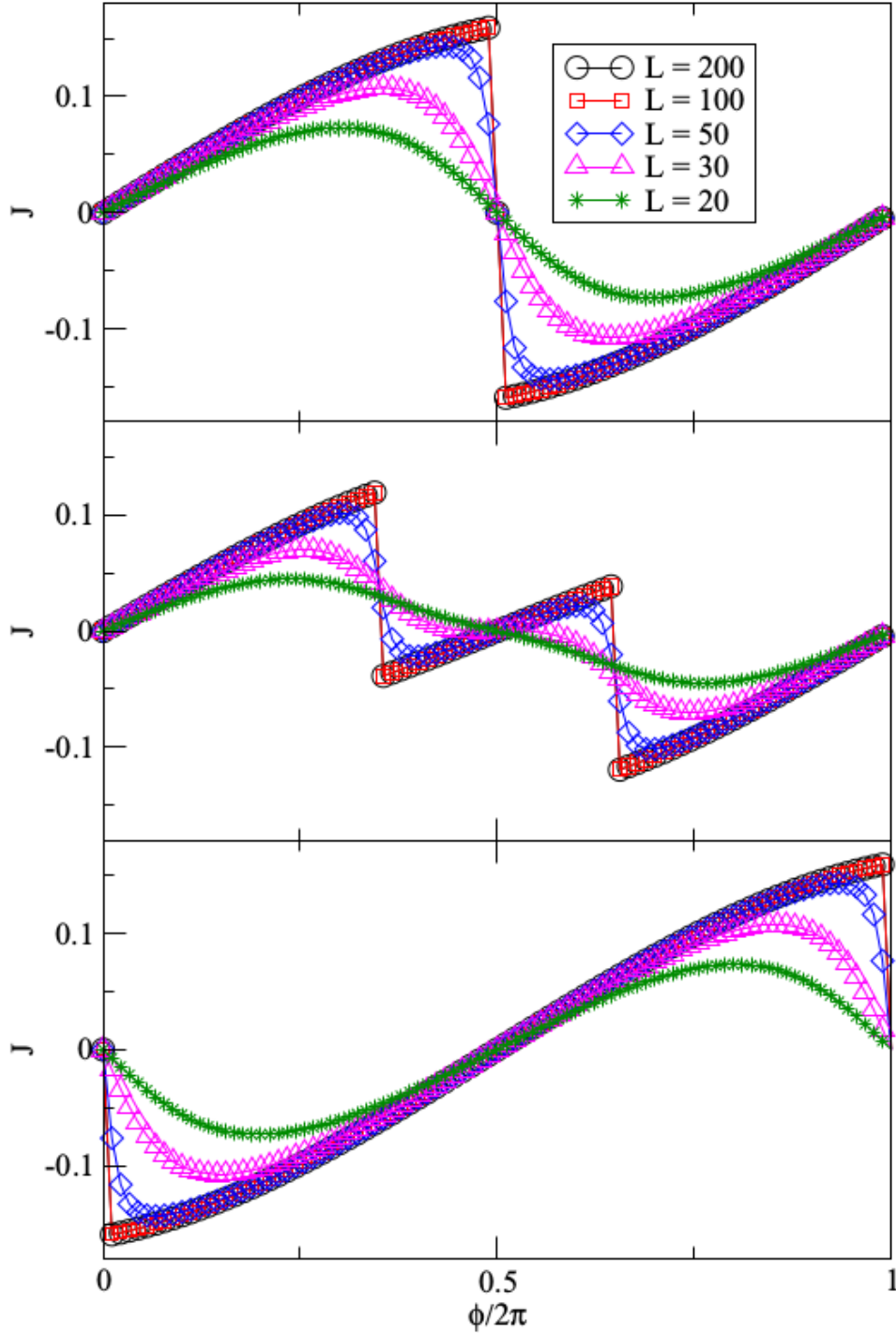


Figura 6.3: Corriente Josephson para juntas TRITOPS-TRITOPS con tuneo directo entre ambos cables con varias orientaciones en el spin-órbita del cable de la izquierda. Estos resultados corresponden al caso de la diagonalización exacta de una cadena finita. Los paneles de arriba, del medio y de abajo pertenecen a los casos $\theta = 0, 0,3\pi$ y π , respectivamente. Los parámetros son $\Delta = 0, \hat{\Delta} = 0,2, \lambda = 0,5, \mu = 0$. Las energías están en unidades de t .

6.2.2. TRITOPS-Superconductor

Para esta configuración, el Hamiltoniano efectivo es

$$H_{\text{TRITOPS-S}}^{\text{eff}} = H_{\text{T-S}}^{\text{eff}} = te^{i\phi/2}(\gamma^\dagger c_{R,+} - i\tilde{\gamma}c_{R,-}) + \Delta_R c_{R,+}^\dagger c_{R,-}^\dagger + \text{h.c.} \quad (6.18)$$

Resulta simple ver lo similar del primer término de la Ecuación (6.18) y la Ecuación (6.9) con la única diferencia de que en el presente caso, los operadores $c_{R,s}$ (con $s = \pm$) forman parte de la descripción del superconductor. Asimismo, se define $(c_{R,+}, c_{R,-})^T = U_L(c_{R,\uparrow}, c_{R,\downarrow})^T$, con U_L dado por la Ecuación (6.11). Es interesante notar la fase (explícita) $\pi/2$ en el apareamiento efectivo, la cual es consecuencia de las relaciones de la Ecuación (6.3) que verifican los modos de borde a energía cero. Esto introduce una fase en la juntura además de la que se debe al flujo magnético.

Es importante remarcar que en este caso, nuevamente, el Hamiltoniano efectivo es independiente de la orientación del spin-órbita del TRITOPS.

Para construir los estados de muchos cuerpos de $H_{\text{T-S}}^{\text{eff}}$ dados en la Ecuación (6.18), se procede de manera similar a la sección anterior. En el presente caso, los estados tienen tres entradas, las cuales se corresponden con los estados de $\gamma^\dagger\gamma$, $c_{R,\uparrow}^\dagger c_{R,\uparrow}$ y $c_{R,\downarrow}^\dagger c_{R,\downarrow}$:

$$|1\rangle = |0, 0, 0\rangle, \quad |2\rangle = |1, 1, 0\rangle, \quad |3\rangle = |0, 1, 1\rangle, \quad |4\rangle = |1, 0, 1\rangle, \quad (6.19)$$

$$|5\rangle = |1, 0, 0\rangle, \quad |6\rangle = |0, 1, 0\rangle, \quad |7\rangle = |0, 0, 1\rangle, \quad |8\rangle = |1, 1, 1\rangle, \quad (6.20)$$

donde los kets en (6.19) corresponden a los estados del sub-espacio par y los kets en (6.20) a los estados del sub-espacios impar. El ordenamiento de los operadores es tal que $|8\rangle = \gamma^\dagger c_{R,\uparrow}^\dagger c_{R,\downarrow}^\dagger |0, 0, 0\rangle$.

El Hamiltoniano resultante para el caso con cantidad de partículas par es

$$H_p = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Delta_R & ite^{i\phi/2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_R & 0 & 0 & te^{-i\phi/2} \\ -ite^{-i\phi/2} & 0 & te^{i\phi/2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.21)$$

mientras que para el caso con número impar de partículas resulta,

$$H_i = \begin{pmatrix} 0 & te^{i\phi/2} & 0 & \Delta_R \\ te^{-i\phi/2} & 0 & 0 & -ite^{i\phi/2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_R & ite^{-i\phi/2} & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.22)$$

Notar que los estados $|2\rangle$ y $|7\rangle$ son autoestados con energía 0.

Para número par de partículas, el polinomio característico $P_p(e) = \det(H_p - E)$, excluyendo el autoestado $|2\rangle$, toma la siguiente forma

$$P_p(E) = -E^3 + (\Delta_R^2 + 2t^2)E - 2t^2\Delta_R \sin(\phi). \quad (6.23)$$

Para número de partículas impar, el polinomio característico $P_i(E) = \det(H_i - E)$, excluyendo el autoestado $|7\rangle$ es

$$P_i(E) = -E^3 + (\Delta_R^2 + 2t^2)E + 2t^2\Delta_R \sin(\phi). \quad (6.24)$$

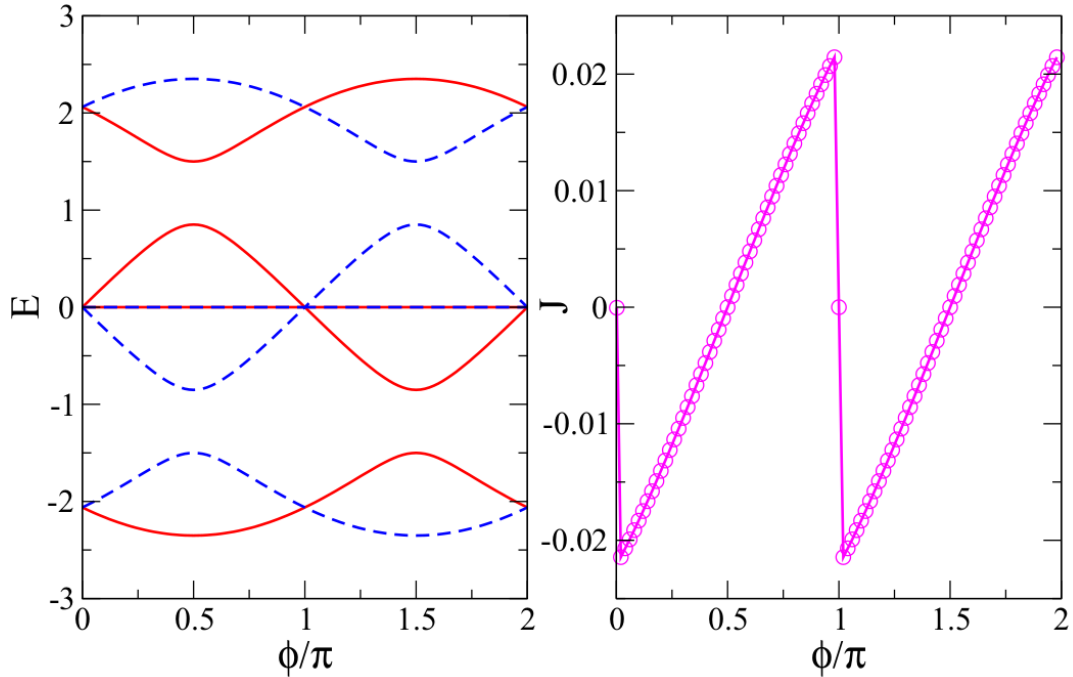


Figura 6.4: Espectro de energía (izquierda) y corriente Josephson para el caso de la juntura TRITOPS-Superconductor. Se consideró $\Delta_R = 1,5t$

Comparando (6.23) y (6.24), es fácil ver que los espectros para ambos casos coinciden a menos de un corrimiento en el flujo igual a medio cuanto de flujo superconductor ($\phi \rightarrow \phi + \pi$). Los resultados del espectro, así como la corriente Josephson, calculada a partir de (6.6), se presentan en la Figura 6.4.

Existe un cruce de las energías del estado fundamental, para el caso par e impar, en $\phi = 0$, a energía $E = -\sqrt{\Delta_R^2 + 2t^2}$, el mismo viene acompañado de una discontinuidad en la corriente Josephson. Esto es una consecuencia de la fase $\pi/2$ en el acoplamiento efectivo a lo largo de la juntura, la cual se puede rastrear, al igual que en el caso de la juntura anterior, a las relaciones entre los operadores de Bogoliubov que representan los modos cero, expresados en la Ecuación (6.3). Asimismo, se observan cruces en $\phi = \pi$ y en $\phi = 0$, los cuales, como puede observarse claramente en las Ecuaciones (6.23) y (6.24), se encuentran protegidos por la paridad fermiónica dado que los dos niveles que se cruzan pertenecen a sub-espacios con diferente paridad. Finalmente, la corriente Josephson posee periodicidad en π en lugar de 2π . De hecho, el Hamiltoniano efectivo de baja energía es exactamente periódico en π lo cual también se desprende de las Ecuaciones (6.23) y (6.24).

En el caso del cable finito, el acoplamiento de modos cero modifica este escenario. Los resultados para la diagonalización exacta para dicho caso se muestran en la Figura 6.5. Como se puede observar, la descripción del sistema en términos de un Hamiltoniano efectivo como el de la Ecuación (6.18) posee limitaciones en el caso de cadenas cortas aunque resulta sumamente preciso en cadenas largas en donde los estados de borde están desacoplados [82].

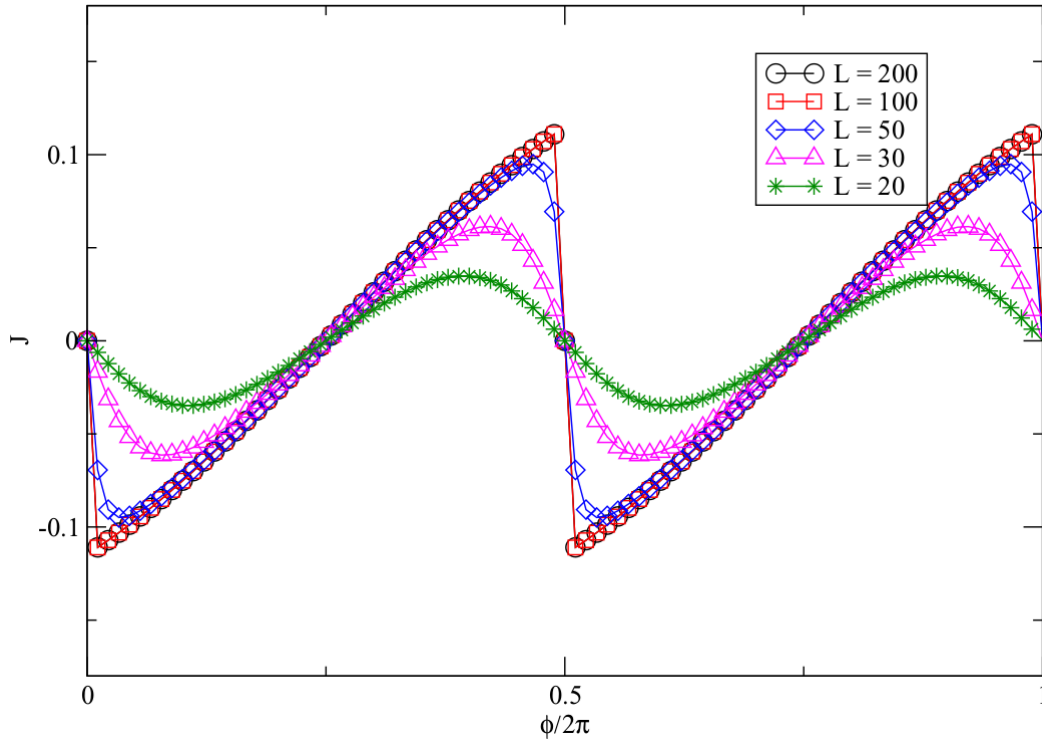


Figura 6.5: Corriente Josephson para juntura TRITOPS-Superconductor en el caso de tuneleo directo. Los resultados corresponden a la diagonalización exacta de cadenas finitas. En el sistema superconductor, $\Delta = 0,5$. Los parámetros del TRITOPS son los mismos que en la Figura 6.4.

6.3. Resultados para el caso de la Juntura con QD embebido

6.3.1. Superconductor-QD-Superconductor

Se comienza haciendo foco en el caso de una juntura entre dos superconductores no-topológicos con un QD en el medio. A partir de [102] se define el Hamiltoniano efectivo de baja energía como

$$H_{S-QD-S}^{\text{eff}} = \sum_{\alpha} \left(\Delta_{\alpha} c_{\alpha,\uparrow}^{\dagger} c_{\alpha,\downarrow}^{\dagger} + h.c. \right) + H_{J,\text{dot}}^{\text{eff}}, \quad (6.25)$$

donde $H_{J,\text{dot}}^{\text{eff}}$ es la versión de la Ecuación (6.5) para esta juntura,

$$H_{J,\text{dot}}^{\text{eff}} = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \left(t_L e^{i\phi/4} c_{L,s}^{\dagger} d_s + t_R e^{i\phi/4} d_s^{\dagger} c_{R,s} + h.c. \right) + H_d. \quad (6.26)$$

$$H_d = \varepsilon_d \left(n_{d,\uparrow} + n_{d,\downarrow} \right) + U n_{d,\uparrow} n_{d,\downarrow} \quad (6.27)$$

con, nuevamente, $\phi = 2\pi\Phi/\Phi_0$, donde Φ es el flujo magnético total y el índice $\alpha = L, R$ corresponden, nuevamente, a los superconductores a izquierda (L) ó derecha (R) de la juntura.

La descripción de los cables involucrados en la juntura (a través de un Hamiltoniano efectivo), como se mencionó anteriormente, corresponde al caso del límite atómico [102,

116], en el el cual el gap superconductor $|\Delta_\alpha|$ se supone mucho más grande que el término de salto entre sitios t_α de la cadena. Como se verá a continuación, esta aproximación es la que permite la descripción cualitativa de la transición $0 - \pi$ (ver Figura 4.6). Es ésta, precisamente, la principal característica de la juntura y tiene lugar con la variación de los parámetros ε_d y U con el dot ocupado individualmente. En la Figura 6.6 se muestran los resultados de la evolución del espectro y la corriente Josephson para este tipo de junturas.

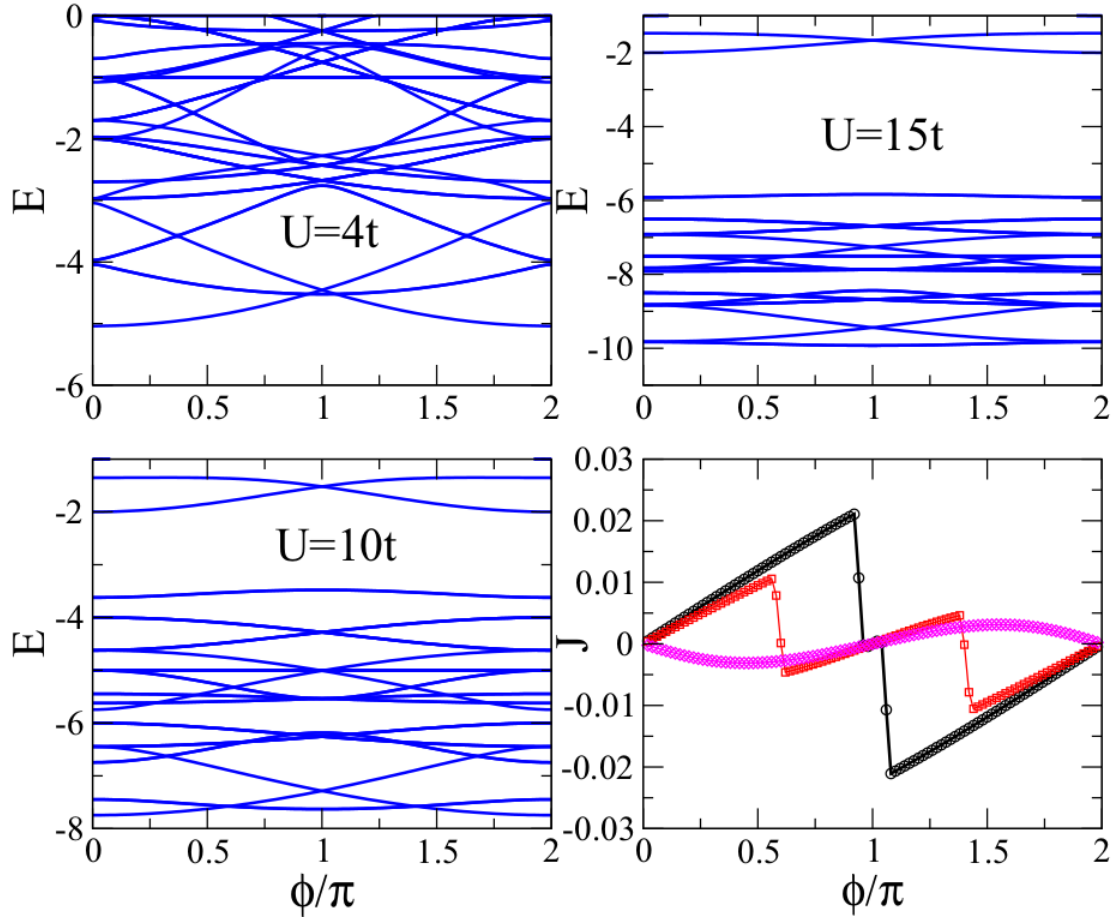


Figura 6.6: Espectro de Andreev de baja energía y corriente Josephson (izquierda abajo) para la juntura S-QD-S para distintos valores de U , $\varepsilon_d = -U/2$ y $\Delta = t$

Como se vió en la Sección 4.3, la transición $0 - \pi$ está relacionada con el efecto Kondo (Sección 4.2.1), el cual consiste en la formación de un singlete entre el spin localizado en el QD y los spines de los electrones en los cables. Este efecto está caracterizado por una escala de energía establecida por la temperatura de Kondo T_K , que en el límite Kondo $t_\alpha \ll -\varepsilon_d$, $t_\alpha \ll \varepsilon_d + U$ y $\Delta \rightarrow 0$ es $k_B T_K \propto e^{-1/(\rho J)}$ donde ρ es la densidad de estados de conducción y $J = 2(t_L^2 + t_R^2)U/[\varepsilon_d(\varepsilon_d + U)]$. Asimismo, en el caso simétrico $\varepsilon_d = -U/2$ con U creciendo, la escala de la energía de Kondo decrece. Cuando $k_B T_K \ll \Delta_R$, al sistema no le resulta conveniente, energéticamente, construir singletes de Kondo entre el electrón localizado y los electrones (o agujeros) en la banda de conducción a energía Δ_R . Luego, el estado fundamental pasa a tener un electrón (paridad impar) no apantallado y localizado en el QD. El comportamiento de la energía del estado fundamental como función de ϕ es tal que pasa de tener un mínimo en $\phi = 0$ y un máximo en $\phi = \pi$, a la

situación opuesta, con el consecuente cambio en el signo de la corriente Josephson (ver Figura 4.6).

A continuación, se analizará qué sucede cuando los superconductores son topológicos.

6.3.2. Juntura TRITOPS-QD-TRITOPS

Al igual que en la Sección 6.2.1, y siguiendo la Referencia [81], se define un Hamiltoniano en donde sólo los grados de libertad asociados a los modos cero de los cables topológicos se acoplan con el QD.

$$H_{TRITOPS-QD-TRITOPS}^{\text{eff}} = H_{T-QD-T}^{\text{eff}} = t_j \sum_{s=\uparrow,\downarrow} \left(e^{i\phi/4} \tilde{\gamma}_{L,s}^\dagger d_s + d_s^\dagger \gamma_{R,s} \right) + h.c. + H_d. \quad (6.28)$$

En ese sentido, como se mencionó oportunamente en el caso de la juntura directa, al no tener en cuenta en el Hamiltoniano el efecto de los estados por encima del gap, este modelo efectivo tendrá una validez que estará limitada a $t_J \ll |\tilde{\Delta}_\alpha|, |\Delta_\alpha|$. Asimismo, se considera, por simplicidad, $t_L = t_R = t$. Llevando a cabo un procedimiento análogo al realizado entre las Ecuaciones (6.10) y (6.12), se obtienen los siguientes Hamiltonianos efectivos

$$H_{J,\text{dot}}^{\text{eff}} = H_L + t_\phi d_\uparrow^\dagger \gamma - it_\phi d_\downarrow^\dagger \gamma^\dagger + h.c. + H_d, \quad (6.29)$$

$$H_L = \sum_{s=\uparrow,\downarrow} (t_s \tilde{\gamma}_s^\dagger d_s + \delta_s \tilde{\gamma}_s d_s), \quad (6.30)$$

donde,

$$t_\uparrow = t_\phi \cos \frac{\theta}{2}, \quad t_\downarrow = t_\phi e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2}, \quad t_\phi = t_J e^{i\phi/4}, \quad (6.31)$$

$$\delta_\uparrow = it_\phi e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2}, \quad \delta_\downarrow = -it_\phi \cos \frac{\theta}{2}. \quad (6.32)$$

Nuevamente, se puede observar que las ecuaciones arriba obtenidas son independientes del ángulo azimutal φ , con lo cual es posible eliminar dicho parámetro realizando las transformaciones de gauge: $d_\uparrow \rightarrow d_\uparrow e^{-i\varphi/2}$, $d_\downarrow \rightarrow d_\downarrow e^{i\varphi/2}$. Una representación esquemática del sistema descrito por el Hamiltoniano efectivo de las Ecuaciones (6.29) y (6.30) puede verse en la Figura 6.7

En la Figura 6.8 se puede observar el espectro de Andreev calculado a partir de la diagonalización del Hamiltoniano efectivo de la Ecuación (6.29). Sólo se muestra el sector del espectro que corresponde a baja energía. El caso para las orientaciones de spin-órbita en la misma dirección ($\theta = 0$) fue previamente analizado en [81], a través de simulaciones de Monte Carlo ante la presencia de un QD interactuante. El espectro en la parte izquierda del panel superior se encuentra caracterizado por un cruce con degeneración cuádruple en $\phi = \pi$. Esto se debe a que, junto con el cruce de dos estados pertenecientes al subespacio par, aparece un cruce con doble degeneración perteneciente al subespacio impar. Luego, la corriente Josephson presenta una discontinuidad en $\phi = \pi$.

Como se dijo al inicio del presente capítulo, uno de los objetivos del presente trabajo fue estudiar el efecto cuando $U \neq 0$. En ese sentido, se observó que el comportamiento, en el espectro y en la corriente, se ve fuertemente modificado cuando se consideran

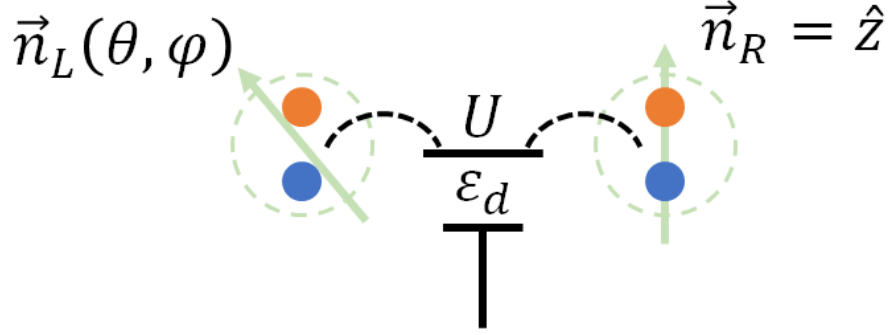


Figura 6.7: Representación esquemática del sistema TRITOPS-QD-TRITOPS descrito por el Hamiltoniano de las Ecuaciones (6.29) y (6.30). Sólo los modos a energía cero se hibridizan con el QD interactuante. El spin-órbita de la derecha se considera en la dirección z , mientras que para el spin-órbita de la izquierda se considera el vector en la dirección más general posible.

orientaciones distintas en el acoplamiento spin-órbita en los cables. Al igual que en el caso de las junturas directas analizadas en la Figura 6.2, en los intervalos $0 < \phi < \pi$ y $\pi < \phi < 2\pi$ se observan cruces entre estados de distintos sub-espacios. Los saltos en la corriente Josephson tienen lugar en esos cruces. Además, al igual que en el caso de la juntura directa, en el límite $\theta = \pi$, el cruce tiene lugar en $\phi = 0$ como consecuencia de la fase entre los modos de energía cero de la Ecuación (6.3) y que puede verse explícitamente en la Figura 6.8.

Finalmente, se observa que el efecto de la corriente Josephson prácticamente no se ve afectado por la interacción de muchos cuerpos del QD. Al igual que en lo analizado en la [81], no hay señal de transición $0 - \pi$ como función de U y la ocupación del QD. Esto se debe a que el espectro de baja energía está dominado por los modos de energía cero, los cuales se hibridizan con el QD para formar un estado combinado similar a un singlete de Kondo independientemente del valor de U . En el presente caso, el Hamiltoniano efectivo de baja energía provee una descripción cualitativa correcta de la física en donde los procesos perturbativos a alta energía tan solo introducen correcciones menores en los parámetros.

6.3.3. Juntura TRITOPS-QD-Superconductor

De manera similar a lo que se hizo para la juntura directa, para el caso de QD embebido en la configuración, se realiza la transformación $(d_+, d_-)^T = U_L(d_\uparrow, d_\downarrow)^T$ con U_L definida en la Ecuación (6.11), y se define $(c_{R,+}, c_{R,-})^T \equiv (c_{R,\uparrow}, c_{R,\downarrow})^T$. Luego, el Hamiltoniano efectivo resulta

$$\begin{aligned}
 H_{T-QD-S}^{\text{eff}} &= H_d + t_\phi \left(\tilde{\gamma}^\dagger d_+ - i\tilde{\gamma} d_- + \sum_{s=\pm} d_s^\dagger c_{R,s} \right) \\
 &+ \Delta_R c_{R,+}^\dagger c_{R,-}^\dagger + \text{h.c.}, \tag{6.33}
 \end{aligned}$$

en donde se utiliza la misma definición para t_ϕ que en la Ecuación (6.32) y H_d es el mismo Hamiltoniano de la Ecuación (6.27). Una vez más, la configuración se independiza de la orientación del spin-órbita del TRITOPS.

El cálculo de la corriente Josephson para el caso del Hamiltoniano efectivo de la Ecuación (6.33) da como resultado lo que se observa en la Figura 6.9.

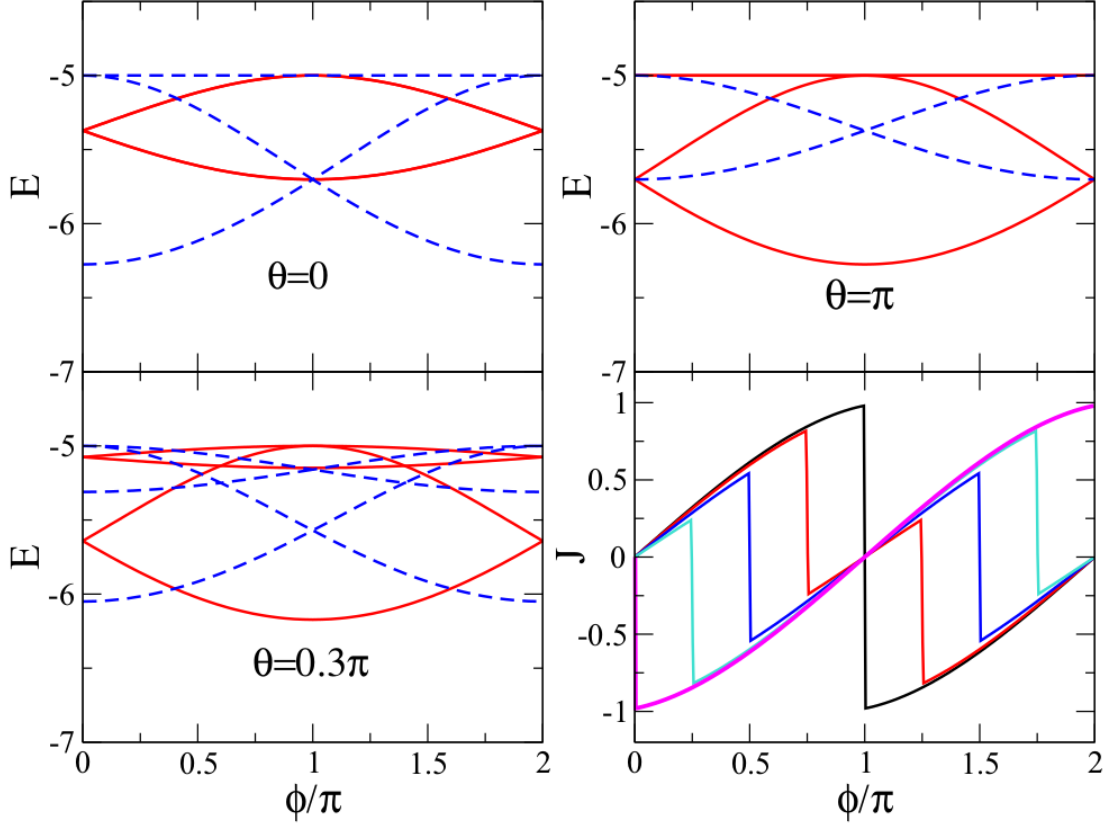


Figura 6.8: Espectro de Andreev de baja energía y corriente Josephson (derecha abajo) para la juntura TRITOPS-QD-TRITOPS. La interacción de Coulomb $U = 10t$, mientras que el potencial local del QD $\varepsilon_d = -5t$. Los distintos paneles en los que se observan los espectros corresponden a distintas orientaciones del acoplamiento spin-órbita. El resto de los parámetros son iguales a los de la Figura 6.2.

Es posible ver rasgos similares a los observados para la configuración con tuneo directo (TRITOPS-Superconductor). En particular, en esta configuración vuelve a manifestarse una discontinuidad con un salto en la corriente Josephson para flujo cero, nuevamente como consecuencia de la fase $\pi/2$ en el gap efectivo de la juntura (Ecuación (6.3)). También resulta interesante remarcar la ausencia de una transición $0 - \pi$ en este tipo de configuraciones. Debido al cruce de estados de diferente paridad a flujo π , existe siempre un máximo relativo en la energía del estado fundamental $E(\phi)$. Luego, la transición asociada con el cambio en el máximo de $E(\phi)$ de $\phi = \pi$ a un mínimo (ver Sección 4.3, Figura 4.6), acompañada de un cambio en la paridad con un incremento de U , tampoco tiene lugar en este tipo de configuraciones.

En el límite $\Delta_R \rightarrow 0$ (ver Ecuación (6.33)), es posible derivar el Hamiltoniano efectivo de baja energía a partir de una transformación de Schrieffer-Wolff[117]

$$H_{low} = J \left[(n_{d,\downarrow} - n_{d,\uparrow}) \tilde{\gamma}^\dagger \tilde{\gamma} + n_{d,\uparrow} \right], \quad (6.34)$$

con $J = -|t_\phi|^2 U / [\varepsilon_d(U + \varepsilon_d)]$. Por lo tanto, como en el caso del QD conectado a dos TRITOPS, los estados de baja energía corresponderán a las hibridaciones de los modos cero con el QD, sin importar el valor de U . El estado fundamental no experimenta ningún cambio cualitativo, explicando de esta manera la ausencia de una transición $0 - \pi$ a medida que U cambia.

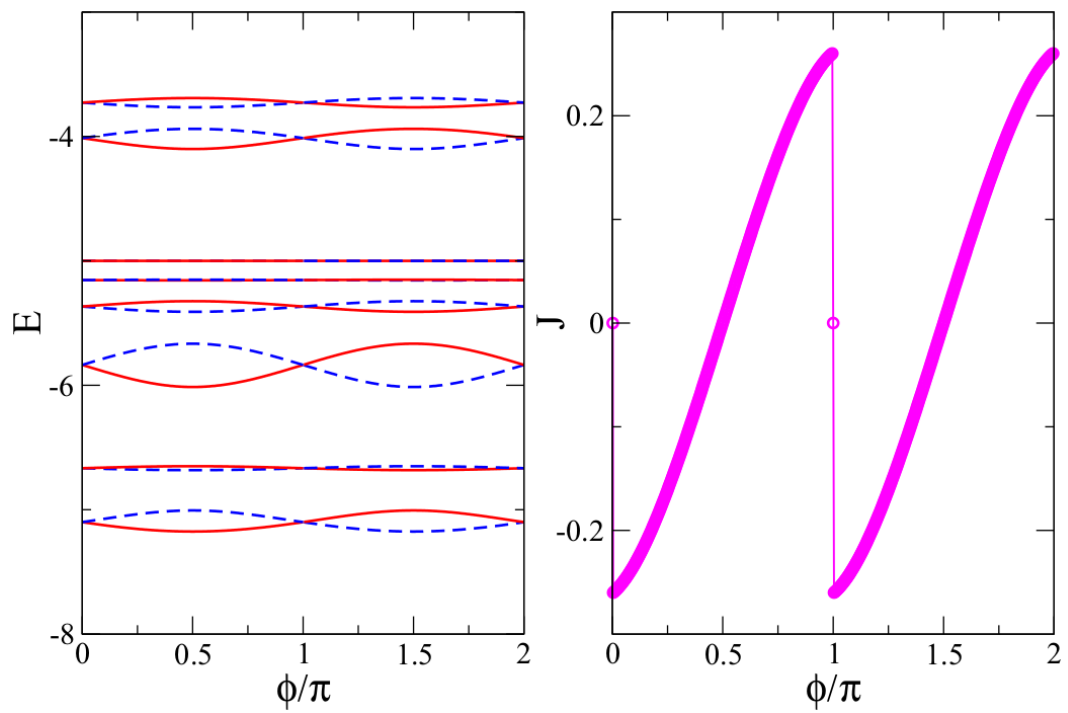


Figura 6.9: Espectro de Andreev (izquierda) y corriente Josephson (derecha) para la juntura TRITOPS-QD-Superconductor. Los parámetros son los mismos que en Figura 6.8

Estudio de la Conductancia y el Ruido en una Juntura Normal-Cable Topológico con un Quantum Dot Embebido

En la fase topológica, una de las características más importantes de los modos de Majorana a energía cero (MZM) son los picos cuantizados en la conductancia a voltaje nulo, $G(V = 0) = 2e^2/h$. Sin embargo, debido a la existencia de los estados ligados de Andreev (o *Andreev Bound States*, ABS) dentro del gap, y su impacto en el comportamiento de la conductancia a $V = 0$, la unívoca identificación de los MZM sigue siendo un problema en el área. En ese sentido, el objetivo del presente capítulo es estudiar las propiedades de transporte en junturas conformadas por un cable con superconductividad topológica con spin-órbita y campo magnético; un conductor normal y un QD embebido. En particular, se estudia el comportamiento de la conductancia y del ruido, en función del voltaje aplicado en el QD. Con el objetivo de llevar a cabo un análisis relevante desde el punto de vista experimental, se consideran sistemas de tamaño finito y en donde las orientaciones relativas entre el vector de spin-órbita y el campo magnético, se apartan del caso perfectamente perpendicular. Además, se utiliza la hibridización de los estados de Majorana con el QD para identificar la fase topológica a través de propiedades de transporte. En todos los escenarios introducidos previamente se lleva a cabo una descripción detallada de los espectros de energía del QD acoplado al cable, tanto en la fase topológica como en la trivial, describiendo las condiciones bajo las cuales se observan estados a energía cero.

Los resultados presentados en este capítulo fueron publicados en *Physical Review B* **108**, 045418 (2023).

7.1. Superconductor con Campo Magnético y Acoplamiento Spin-Órbita

El punto de partida del modelo que se utiliza para describir el superconductor topológico con acoplamiento spin-órbita y campo magnético fue introducido en la Sección 3.6 y está descrito por el Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_k = \tau^z \otimes [\xi_k \sigma^0 - \lambda_k \vec{n}_\lambda \cdot \vec{\sigma}] - B_S \tau^0 \otimes \vec{n}_B \cdot \vec{\sigma} + \Delta \tau^x \otimes \sigma^0. \quad (7.1)$$

Como se menciona en dicha sección, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ y $\vec{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ son las matrices de Pauli actuando en el espacio de spin y de partícula-agujero, respectivamente, mientras que σ^0 y τ^0 son las matrices unitarias de 2×2 en cada uno de esos espacios. $\xi_k = -2t_S \cos(ka) - \mu_S$ es la relación de dispersión relativa al potencial químico μ_S , y t_S el parámetro de acoplamiento entre primeros vecinos. La constante de la red es a , mientras que $\lambda_k = 2\lambda \sin(ka)$ es la amplitud del acoplamiento spin-órbita (SOC) orientado en la dirección \vec{n}_λ . Los otros parámetros del Hamiltoniano de la Ecuación (7.1) son: la magnitud del campo magnético orientado según \vec{n}_B , que introduce una separación Zeeman de amplitud B_S ; y un potencial de apareamiento Δ . Este Hamiltoniano posee una fase topológica para ciertos valores de los parámetros, así como para un rango de valores de orientaciones relativas entre el SOC y el campo magnético. La evaluación de los invariantes topológicos [118–121], lleva a las siguientes expresiones analíticas

$$|2t_S - r| < |\mu_S| < |2t_S + r|, \quad |\cos(\theta)| < |\Delta|/B_S < 1. \quad (7.2)$$

con $r = \sqrt{B_S^2 - \Delta^2}$ y $\cos(\theta) = \vec{n}_\lambda \cdot \vec{n}_B$.

En la Figura 7.1 es posible observar la formación de estados a energía cero para un rango de valores del potencial químico que respetan la Ecuación (7.2).

En el presente análisis, se hace foco en los valores $\mu_S < 0$. Asimismo, si se supone que t_S y $\Delta > 0$, la fase topológica corresponde al rango en el cual $-2t_S \leq \mu_S \leq \mu_c$, con

$$\mu_c = -2t_S + \sqrt{B_S^2 - \Delta^2}, \quad B_S > \Delta, \quad (7.3)$$

y ángulos relativos entre \vec{n}_B y \vec{n}_λ verificando la Ecuación (7.2). En la Figura 7.2 se puede observar el diagrama de fase correspondiente. Debido a la combinación entre superconductividad tipo-s, un acoplamiento de spin-órbita y un campo magnético, el apareamiento efectivo superconductor tendrá una componente singlete y una triplete cuando el término de apareamiento de la Ecuación (7.1) se exprese en la base que diagonaliza dicho Hamiltoniano con $\Delta = 0$. Teniendo en cuenta esto, y suponiendo condiciones de contorno periódicas [120]

$$\begin{aligned} f_{k,+} &= u_k c_{k\uparrow} + v_k c_{k\downarrow}, \\ f_{k,-} &= -v_k c_{k\uparrow} + v_k c_{k\downarrow}, \end{aligned} \quad (7.4)$$

siendo $u_k = \sqrt{1 + B/r_k}$, $v_k = \text{sgn}(\lambda_k) \sqrt{1 - B/r_k}$, con $r_k = \sqrt{\lambda_k^2 + B^2}$. En esta base, el Hamiltoniano del cable, incluyendo los términos superconductores, es

$$\begin{aligned} H_W &= \sum_{k,s=\pm} \left(\varepsilon_{k,s} f_{k,s}^\dagger f_{k,s} + \Delta_k^T f_{k,s} f_{-k,s} + \text{h.c.} \right) \\ &+ \sum_k \left(\Delta_k^S f_{k,+} f_{-k,-} + \text{h.c.} \right), \end{aligned} \quad (7.5)$$

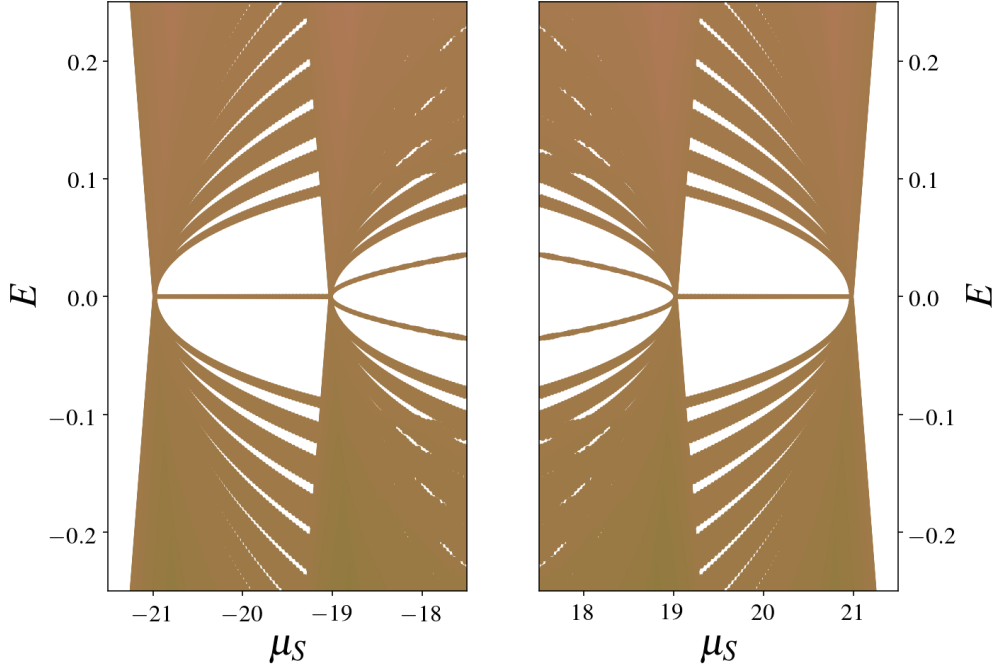


Figura 7.1: Energía como función del potencial químico μ_S en donde se puede verificar la expresión de la Ecuación (7.2). $\Delta = 0,2meV$, $B_S = 1,0meV$ y $t_S = 10meV$, para una cadena de 600 sitios.

con

$$\varepsilon_{k,\pm} = -2t_S \cos(ka) \pm r_k - \mu_S, \quad (7.6)$$

lo que define dos bandas de energía separadas por un gap determinado por $2r_k$ y dos apareamientos superconductores

$$\Delta_k^S = \frac{\Delta B}{\sqrt{B_S^2 + \lambda_k^2}}, \quad \Delta_k^T = -\frac{\Delta \lambda_k}{\sqrt{B_S^2 + \lambda_k^2}}, \quad (7.7)$$

con Δ_k^S la componente del apareamiento singlete y Δ_k^T la componente del apareamiento triplete. Como puede verse en la Ecuación (7.5), la componente de singlete actúa sobre partículas en diferentes bandas, mientras que el término triplete actúa sobre la misma banda (intra-banda). En la fase topológica, la energía de Fermi del sistema con $\Delta = 0$ se posiciona en el gap entre dos bandas. Además, para valores no nulos de Δ , el término de apareamiento triplete es dominante. La estimación de longitud de localización de los modos de Majorana es $\xi_M = (\hbar v_F)/\Delta_{\text{eff}}$ [122], siendo v_F la velocidad de Fermi y Δ_{eff} el apareamiento efectivo para los correspondientes valores del resto de los parámetros. En la fase topológica, el apareamiento relevante se define a partir de la componente triplete en el punto de Fermi dado por k_F , $\Delta_{\text{eff}} \simeq \Delta_{k_F}^T$, lo que lleva a

$$\xi_M \simeq \frac{\hbar v_F \sqrt{B_S^2 + \lambda_{k_F}^2}}{\Delta \lambda_{k_F a}}, \quad (7.8)$$

con $\lambda_{k_F a} = 2\lambda \sin(k_F a)$, $-2t_S \cos(k_F a) \simeq \mu_S$ y $\hbar v_F \simeq -2t_S a \sin(k_F a)$. La expresión de la Ecuación (7.8) permite, en el caso de sistemas finitos, establecer el largo de la cadena a partir del cual la hibridización de los Majoranas pasa a ser un factor relevante en el modelo.

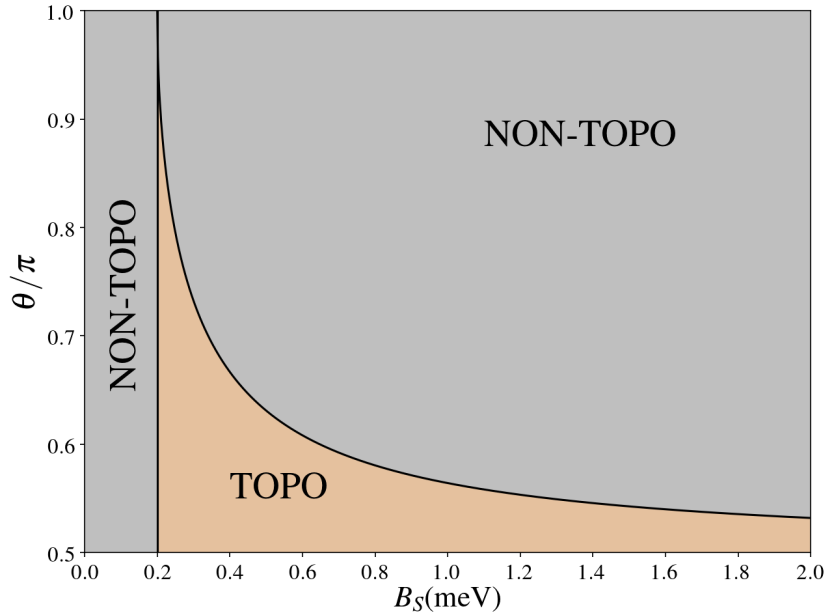


Figura 7.2: Diagrama de fase obtenido a partir de la Ecuación (7.2) para los mismos parámetros que en la Figura 7.1. TOPO y NON-TOPO denotan la fase topológica y no-topológica, respectivamente.

A continuación se presentan los resultados del estudio de los espectros y propiedades de transporte (conductancia y ruido), en heteroestructuras unidimensionales con superconductores con acoplamiento spin-órbita y campo magnético, acoplados a reservorios normales a través de un QD.

7.2. Juntura N-S con Quantum Dots embebidos

La configuración en la cual se estudiaron propiedades de transporte se puede observar en la Figura 7.3.

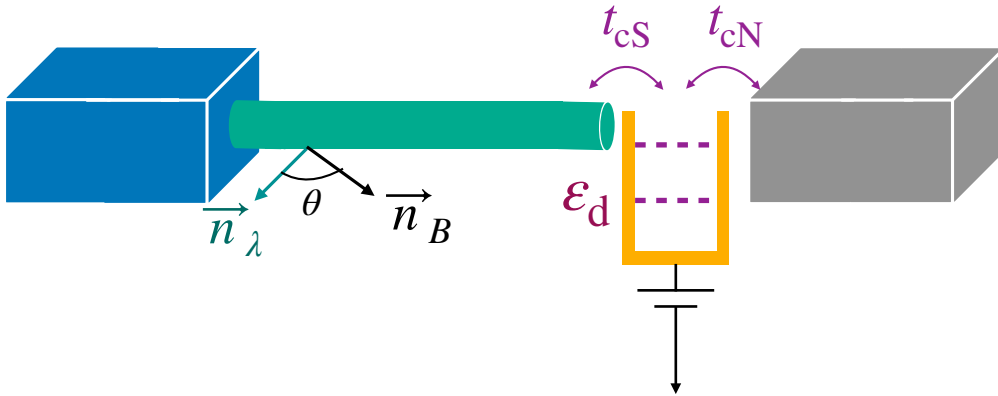


Figura 7.3: Esquema de la configuración tenida en cuenta en el presente caso de estudio. Un cable superconductor de longitud finita con acoplamiento spin-órbita y campo magnético aplicado en las direcciones \vec{n}_λ y \vec{n}_B , respectivamente. Los niveles de energía del quantum dot, ϵ_d , pueden ser fijados a partir de un voltaje de compuerta (*gate voltage*). El contacto túnel entre el cable y el QD es t_{cS} y entre el reservorio metálico y el QD es t_{cN} .

El Hamiltoniano del sistema completo es

$$H = \frac{1}{2}[H_S + H_d + H_N + H_{cont}], \quad (7.9)$$

donde H_S es el Hamiltoniano del superconductor, H_d el del QD, H_N el del reservorio metálico y H_{cont} el de contacto entre los distintos constituyentes de la juntura.

Para un sistema de N_w sitios, el Hamiltoniano para el superconductor es la versión en el espacio real del Hamiltoniano de Bogoliubov-de Gennes de la Ecuación (7.1)

$$\begin{aligned} H_S = & - \sum_{j=1}^{N_w} \left[\mathbf{c}_j^\dagger \tau^0 \otimes (t_S \sigma^0 + i\lambda_j \vec{n}_\lambda \cdot \vec{\sigma}) \mathbf{c}_{j+1} + \text{h.c.} \right] \\ & + \sum_{j=1}^{N_w} \mathbf{c}_j^\dagger \left[\Delta \tau^x \otimes \sigma^0 - B_j \tau^0 \otimes \vec{n}_B \cdot \vec{\sigma} - \mu_S \tau^z \otimes \sigma^0 \right] \mathbf{c}_j, \end{aligned} \quad (7.10)$$

con $\mathbf{c}_j = (c_{j,\uparrow}, c_{j,\downarrow}, c_{j,\downarrow}^\dagger, -c_{j,\uparrow}^\dagger)$ y

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \lambda, & 1 \leq j \leq N_w, & & \lambda_j &= 0, & j > N_w, \\ B_j &= B_S, & 1 \leq j \leq N_w, & & B_j &= 0, & j > N_w. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Se toma el sistema de coordenadas en el cual el eje z está orientado a lo largo del cable y el SOC está orientado en el eje x . Asimismo, se considera al vector \vec{n}_B en el plano (x, z) .

El contacto normal se describe a partir de un Hamiltoniano convencional de *tight binding* unidimensional con acoplamiento t_N ,

$$\begin{aligned} H_N = & \sum_{j=1}^{\infty} \left[-t_N \left(\mathbf{b}_j^\dagger \tau^z \otimes \sigma^0 \mathbf{b}_{j+1} + \text{h.c.} \right) \right. \\ & \left. - \mathbf{b}_j^\dagger \left(\mu_N \tau^z \otimes \sigma^0 + B_N \tau^0 \otimes \vec{n}_B \cdot \vec{\sigma} \right) \mathbf{b}_j \right], \end{aligned} \quad (7.12)$$

en donde se utiliza la notación $\mathbf{b}_j^\dagger = (b_{j,\uparrow}^\dagger, b_{j,\downarrow}^\dagger, b_{j,\downarrow}, -b_{j,\uparrow})$ para el spinor de Nambu en el sistema normal. El QD está modelado por el Hamiltoniano

$$H_{qd} = -\mathbf{d}^\dagger (\varepsilon_d \tau^z \otimes \sigma^0 + B_d \tau^0 \otimes \vec{n}_B \cdot \vec{\sigma}) \mathbf{d}, \quad (7.13)$$

siendo $\mathbf{d} = (d_\uparrow, d_\downarrow, d_\downarrow^\dagger, -d_\uparrow^\dagger)^T$ el spinor de Nambu que describe los correspondientes grados de libertad. \vec{B}_d el campo magnético y ε_d la energía local (la cual puede ser controlada por un voltaje externo) del QD. Es importante remarcar que no se está considerando explícitamente el efecto de la interacción de Coulomb en el QD. Esto se debe a que el régimen en el cual se hará foco es aquel en el que el campo de Zeeman introducido a través del campo magnético es dominante. Asimismo, la consideración de una interacción de Coulomb implicaría una renormalización de los parámetros B_d y ε_d . Finalmente, el último término de la Ecuación (7.9) (contacto de tuneleo entre el QD y cada uno de los sistemas a los costados del mismo),

$$H_{cont} = - \left[\left(t_{cS} \mathbf{c}_1^\dagger + t_{cN} \mathbf{b}_1^\dagger \right) \tau^z \otimes \sigma^0 \mathbf{d} + \text{h. c.} \right], \quad (7.14)$$

donde el subíndice $\ell = 1$ denota el sitio del superconductor y del reservorio normal en los bordes de cada uno de los reservorios (y en contacto con el QD).

El Hamiltoniano de la expresión (7.9) es el que se utiliza a la hora de calcular la corriente, la conductancia y el ruido. En particular, la corriente eléctrica de la Ecuación (5.86) puede escribirse, aplicando la metodología explicada en la Sección 5.10, para el caso de esta juntura, como

$$J_T = \frac{e}{h} \int d\varepsilon \{ [f(\varepsilon + eV) - f(\varepsilon)] t_N + [f(\varepsilon + eV) - f(\varepsilon - eV)] t_A \}. \quad (7.15)$$

Las expresiones de t_N y t_A están dadas por

$$t_N(\varepsilon) = \sum_{j=1,2} [\Gamma^N(\varepsilon) G_d^r(\varepsilon) \Gamma^S(\varepsilon) G_d^a(\varepsilon)]_{j,j}, \quad (7.16)$$

$$t_A(\varepsilon) = \sum_{j=1,2} \left\{ \Gamma_{j,j}^N(\varepsilon) [G_d^r(\varepsilon)]_{j,\bar{j}} \Gamma_{\bar{j},\bar{j}}^S(\varepsilon) [G_d^a(\varepsilon)]_{\bar{j},j} \right\}, \quad (7.17)$$

donde se indican los índices de Nambu con $\bar{1} \equiv 4$ y $\bar{2} \equiv 3$. El primer término de la Ecuación (7.15), la *transmisión normal* (t_N), describe el transporte normal de cuasipartículas y es dominante para $eV > \Delta$, mientras que el segundo término, la *reflexión de Andreev* (t_A), contribuye dentro del gap y describe la conversión de partículas y agujeros del lado normal, en pares de Cooper del lado superconductor (ver Sección 4.1). A diferencia de la expresión general para una juntura N-S que se obtuvo en la Sección 5.10, acá se considera un QD embebido en la misma. Las funciones de Green del QD retardadas y avanzadas que aparecen en las Ecuaciones (7.16) y (7.17) son

$$G_d^{r/a}(\varepsilon) = \left[\varepsilon \hat{1} - H_{\text{qd}} - \Sigma_S^{r/a}(\varepsilon) - \Sigma_N^{r/a}(\varepsilon) \right]^{-1}. \quad (7.18)$$

$\hat{1}$ es la matriz unitaria de 4×4 y H_{qd} es el Hamiltoniano (en la base de Nambu) del QD desacoplado, Ecuación (7.13). Por otro lado, las autoenergías $\Sigma_\alpha^{r/a}$ que aparecen en la Ecuación (7.18) son

$$\Sigma_\alpha^{r/a}(\varepsilon) = |t_{c\alpha}|^2 g_\alpha^{r/a}(\varepsilon), \quad (7.19)$$

con $\alpha = S, N$ según se describa al superconductor (S) o al reservorio normal (N). Las mismas se obtienen resolviendo la Ecuación de Dyson (5.29) para cada uno de los reservorios. Es importante remarcar que las autoenergías están escritas en términos de las funciones de Green desacopladas (ó libres) de cada uno de los sistemas, $g_\alpha^{r/a}(\varepsilon)$. Asimismo, en las Ecuaciones (7.16) y (7.17) se utilizó la re-definición

$$\Gamma^\alpha(\varepsilon) = -i [\Sigma_\alpha^r(\varepsilon) - \Sigma_\alpha^a(\varepsilon)]. \quad (7.20)$$

A temperatura cero, $T = 0$, la conductancia es

$$G = \frac{dJ_T}{dV} = G_0 [t_N(eV) + t_A(eV)], \quad (7.21)$$

en donde $G_0 = e^2/h$ es el cuanto de conductancia por canal de spin. Para el caso de un contacto balístico, se espera que $G = 4G_0$ en un superconductor ordinario y $G = 2G_0$ en el caso de un sistema topológico con los modos de Majorana perfectamente desacoplados.

7.3 Hamiltoniano Efectivo para Cable Hibridizado con un Quantum Dot 83

Junto con la conductancia, otra propiedad de transporte de interés es el ruido (*shot noise*) [123]. En particular, en el presente trabajo se analiza el ruido a cero frecuencia. El mismo se define como

$$S(eV) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau S(t, t - \tau), \quad (7.22)$$

con $S(t, t') = \langle [\delta J_T(t) \delta J_T(t') + \delta J_T(t') \delta J_T(t)] \rangle$ y $\delta J_T(t) = \dot{N}_N(t) - J_T(t)$. Para el caso de la Ecuación (7.15), el ruido adquiere la siguiente forma

$$S(eV) = \frac{e^2 t_{cN}^2}{h^2} \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \text{Tr} \{ G_{NN}^<(\varepsilon) G_{qd}^>(\varepsilon) - G_{Nd}^<(\varepsilon) G_{Nd}^>(\varepsilon) + N \leftrightarrow d \}. \quad (7.23)$$

$G_{NN}^<$ es la función de Green menor del reservorio normal acoplada al resto del sistema, $G_{qd}^>$ la función de Green mayor del QD (también acoplado a todo el sistema); y $G_{Nd}^>$ y $G_{Nd}^<$ las funciones de Green mayor y menor que tienen en cuenta la hibridización entre el reservorio metálico y el QD. El parámetro que tiene en cuenta el hopping entre ambos reservorios es t_{cN} .

Asimismo, existe un parámetro que se define a partir del ruido que se conoce como factor de Fano

$$F = \frac{S(eV)}{2eJ}, \quad (7.24)$$

que en esencia mide la relación entre el ruido de la expresión (7.22) y el valor Poissoniano $2eJ$ [101, 123]. El Fano toma valores entre cero (todos los canales de conducción son transparentes) y uno (ruido Poissoniano). Luego, a partir de un análisis teniendo en cuenta diferentes acoplamientos entre los reservorios de las juntas, este factor puede resultar complementario en el estudio de las propiedades de transporte.

Finalmente, es importante remarcar que las funciones de Green calculadas en este capítulo se obtienen a partir del método recursivo desarrollado en la Sección 5.11.1.

7.3. Hamiltoniano Efectivo para Cable Hibridizado con un Quantum Dot

Para estudiar las propiedades de transporte, en ocasiones resulta útil un análisis del espectro del sistema superconductor finito conectado a un QD.

Dentro de la fase topológica, los modos de Majorana localizados en los extremos del cable pueden ser genéricamente representados como $\eta_\nu = \gamma_\nu^\dagger + \gamma_\nu$, con $\nu = l, r$ el subíndice que indica el modo de Majorana en el extremo izquierdo (l) ó derecho (r) del sistema, y siendo $\gamma_\nu^\dagger, \gamma_\nu$ operadores fermiónicos de creación y destrucción convencionales. Los mismos se encuentran relacionados a los operadores fermiónicos definidos en el Hamiltoniano (7.10) de la siguiente manera,

$$\gamma_\nu^\dagger = e^{i\delta_\nu} \left[\cos(\theta_\nu/2) c_{\nu\uparrow}^\dagger + e^{i\varphi_\nu} \sin(\theta_\nu/2) c_{\nu\downarrow}^\dagger \right]. \quad (7.25)$$

$c_{\nu\sigma}^\dagger$ denota la combinación lineal de operadores que aparecen en la Ecuación (7.10) e involucran un cierto número de sitios cercanos al extremo ν del cable con un peso de la forma $w_{j,\nu} \propto e^{ik_F j a} e^{-j a / \xi_M}$. En este caso, j cuenta los sitios comenzando desde el extremo ν del cable, k_F es el vector de Fermi y ξ_M la longitud de localización de los modos

de Majorana. Los parámetros angulares $(\delta_\nu, \theta_\nu, \varphi_\nu)$ definen las coordenadas de Bloch generalizadas [120] y describen la fase y las coordenadas angulares del spin de la partícula que compone el modo de Majorana. En sistemas con una longitud menor a $2\xi_M$ (ver Ecuación (7.8)) se manifiesta una hibridización entre los Majoranas en los extremos del sistema, dando lugar a un subgap de cuasi-partículas con energías $\pm\varepsilon_M$. Para describir estos modos, es necesario introducir los operadores de creación y destrucción fermiónicos $\Gamma_M^\dagger, \Gamma_M$, con

$$\Gamma_M^\dagger = \eta_r + i\eta_l, \quad (7.26)$$

siendo $\eta_{l,r}$ los modos de Majorana definidos en la Ecuación (7.25). De esta manera, se considera el siguiente Hamiltoniano efectivo para el QD hibridizado con un cable superconductor topológico finito,

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= H_{\text{qd}} + \sum_n E_n \Gamma_n^\dagger \Gamma_n + \varepsilon_M \Gamma_M^\dagger \Gamma_M \\ &+ \sum_\sigma \left(t_\sigma \Gamma_M^\dagger d_\sigma + \Delta_\sigma \Gamma_M d_\sigma + \text{h.c.} \right) \\ &+ \sum_{\sigma,n} \left(t'_{n,\sigma} \Gamma_n^\dagger d_\sigma + \Delta'_{n,\sigma} \Gamma_n d_\sigma + \text{h.c.} \right). \end{aligned} \quad (7.27)$$

El primer término es el Hamiltoniano del QD definido en la Ecuación (7.13) mientras que el segundo término representa el conjunto de excitaciones de supra-gap del bulk superconductor. En un sistema de longitud infinita, esto define un continuo de modos, mientras que para el caso de un sistema finito, representan modos discretos, etiquetados con n , con energías E_n por encima del gap superconductor. El tercer término de la Ecuación (7.27) es el Hamiltoniano efectivo de baja energía para los modos fermiónicos definidos en la Ecuación (7.26). Por último, los dos términos restantes describen la hibridización del QD con los modos de Majorana así como con los estados supra-gap del cable. Los términos con $\Delta'_{n,\sigma}$ y $t'_{n,\sigma}$ pueden despreciarse para acoplamiento débil con el QD. En esos casos, los parámetros efectivos pueden calcularse proyectando el Hamiltoniano de contacto definido en la Ecuación (7.14) en los estados fermiónicos de la Ecuación (7.26). Con este objetivo, se sustituye la Ecuación (7.25) en la Ecuación (7.26). El resultado será

$$\Gamma_M^\dagger = \sum_\sigma \left(\alpha_\sigma c_{1,\sigma}^\dagger + \beta_\sigma c_{1,\sigma} \right) + \dots, \quad (7.28)$$

en donde sólo están explicitadas las componentes relacionadas con el sitio $j = 1$ del cable dado que ese es el contacto con el QD. El resto de las componentes entrarían en los puntos suspensivos. Los coeficientes en cuestión son

$$\begin{aligned} \alpha_\uparrow &= w_{1r} e^{i\delta_r} \cos(\theta_r/2) \pm i w_{1l} e^{i\delta_l} \cos(\theta_l/2), \\ \alpha_\downarrow &= w_{1r} e^{i\delta_r} e^{i\varphi_r} \sin(\theta_r/2) \pm i w_{1l} e^{i\delta_l} e^{i\varphi_l} \sin(\theta_l/2), \\ \beta_\uparrow &= w_{1r} e^{-i\delta_r} \cos(\theta_r/2) \pm i w_{1l} e^{-i\delta_l} \cos(\theta_l/2), \\ \beta_\downarrow &= w_{1r} e^{-i\delta_r} e^{-i\varphi_r} \sin(\theta_r/2) \pm i w_{1l} e^{-i\delta_l} e^{-i\varphi_l} \sin(\theta_l/2), \end{aligned} \quad (7.29)$$

donde w_{1r}, w_{1l} son los pesos de los estados generados por γ_r^\dagger y γ_l^\dagger en el sitio $j = 1$. Puede verse a partir de la Ecuación (7.29) que a medida que la longitud del cable aumenta

respecto de ξ_M , $w_{1l} \rightarrow 0$, es decir, los pesos se hacen cada vez más chicos. Asimismo, puede verse que la proyección de $c_{1,\sigma}^\dagger$ en los estados de baja energía del cable es

$$c_{1,\sigma}^\dagger = \alpha_\sigma^* \Gamma_M^\dagger + \beta_\sigma^* \Gamma_M. \quad (7.30)$$

Sustituyendo en la Ecuación (7.14), se obtiene

$$t_\sigma = t_{cS} \alpha_\sigma^*, \quad \Delta_\sigma = t_{cS} \beta_\sigma^*. \quad (7.31)$$

Tomando a \vec{n}_B sobre el eje z (perpendicular al cable), los parámetros en las Ecuaciones (7.26), (7.27) y (7.31) son

$$\delta_r = -\delta_l = -\pi/4, \quad \varphi_r = -\varphi_l = -\pi/2, \quad \theta_r = \theta_l \equiv \theta_M. \quad (7.32)$$

De esta manera, los parámetros en la Ecuación (7.31) definirán el Hamiltoniano efectivo de la Ecuación (7.27),

$$\begin{aligned} t_\uparrow &= t_{cS} e^{i\pi/4} (w_{1r} - w_{1l}) \cos(\theta_M/2), \\ t_\downarrow &= t_{cS} e^{i\pi/4} i (w_{1r} + w_{1l}) \sin(\theta_M/2), \\ \Delta_\uparrow &= t_{cS} e^{-i\pi/4} (w_{1r} + w_{1l}) \cos(\theta_M/2), \\ \Delta_\downarrow &= -t_{cS} e^{-i\pi/4} i (w_{1r} - w_{1l}) \sin(\theta_M/2), \end{aligned} \quad (7.33)$$

Un Hamiltoniano similar con $\Delta'_{\sigma,n} = t'_{\sigma,n} = 0$ ha sido presentado en [124, 125] en donde el análisis se centró en el acoplamiento débil con los QD. En el presente capítulo, se presentan los resultados para los casos de acoplamiento fuerte con el QD en donde la hibridización con los estados supra-gap de menor energía juega un papel clave. Los efectos de dichos estados están representados por los operadores Γ_n . Los parámetros de hibridización pueden ser calculados a partir de

$$\Gamma_n^\dagger = \tilde{\alpha}_{n,\sigma} c_{1,\sigma}^\dagger + \tilde{\beta}_{n,\sigma} c_{1,\sigma} + \tilde{\alpha}_{n,\bar{\sigma}} c_{1,\bar{\sigma}}^\dagger + \tilde{\beta}_{n,\bar{\sigma}} c_{1,\bar{\sigma}} + \dots, \quad (7.34)$$

con $\bar{\uparrow} = \downarrow$, $\bar{\downarrow} = \uparrow$. Los parámetros que aparecen en el Hamiltoniano efectivo serán

$$t'_{n,\sigma} = t_{cS} (\tilde{\alpha}_{n,\sigma}^* + \tilde{\alpha}_{n,\bar{\sigma}}^*), \quad \Delta'_{n,\sigma} = t_{cS} (\tilde{\beta}_{n,\sigma}^* + \tilde{\beta}_{n,\bar{\sigma}}^*). \quad (7.35)$$

El análisis se centra principalmente en los casos en los que se observan estados a energía cero en las estructuras constituídas por el cable superconductor y el QD. Los mismos tienen lugar en dos escenarios:

- el cable se encuentra en la fase topológica y posee modos de baja energía como resultado de la hibridización de los modos de Majorana en los bordes. A su vez, estos modos se hibridizan con el QD dando lugar a cruces a energía cero que pueden aparecer para cierta elección de parámetros.
- El cable no se encuentra en la fase topológica y sus estados (aislados del QD) se encuentran por encima del gap superconductor.

En el marco del Hamiltoniano efectivo, este segundo caso corresponde a la eliminación de los términos que contienen Γ_M en la Ecuación (7.27). Curiosamente, debido a la hibridización con el QD, los estados de baja energía con energía cero se desarrollan

dentro del gap para ciertos parámetros. Debido a la existencia de un campo Zeeman en el QD, este último se comporta como una impureza magnética dentro del rango de parámetros en donde está ocupado por un solo fermión (*singly occupied*). Luego, el desarrollo de estados ligados cruzando energía cero dentro del segundo escenario arriba mencionado, resulta similar al caso de los estados ligados de Yu-Shiba-Rusinov para una impureza magnética acoplada a un superconductor [126–129]. En este escenario, cuando el ángulo entre \vec{n}_λ y \vec{n}_B supera el valor crítico θ_c , surgen estados en donde el gap se cierra (*gapless*) debido a la naturaleza peculiar de este superconductor no-topológico. A partir de la hibridización con el QD, estos estados pueden dar lugar a cruces a energía cero, para cierto conjunto de parámetros. Es oportuno recordar que uno de los objetivos de la presente tesis es estudiar las características del fenómeno de transporte en las dos situaciones arriba mencionadas, con el objetivo de identificar indicios de la fase topológica.

$a = \sqrt{2mt_S}/\hbar \simeq 15nm$. Para el sistema normal, se toma $t_N = 2t_S$.

7.3.1. Espectro para el Hamiltoniano Efectivo de un Cable Hibridizado con un QD

A continuación, se analiza el espectro del Hamiltoniano de la Ecuación (7.27). Se comienza con el caso en que la hibridización con el QD es pequeña, de manera tal que el acoplamiento con los estados de supragap pueden despreciarse. Esta consideración contempla sólo la hibridización del QD con la combinación de los modos de Majorana. Asimismo, se hace foco en el caso de la energía de Zeeman mayor que dicha hibridización entre el QD y el cable.

El espectro del Hamiltoniano efectivo formulado en la Ecuación (7.27) con $t'_\sigma = \Delta'_\sigma = 0$, suponiendo que los subespacios asociados con $\sigma = \uparrow, \downarrow$ se encuentran bloqueados, son

$$E_{1,\sigma}^\pm = \pm \frac{1}{2} \left| \sqrt{(\varepsilon_M - \varepsilon_{d,\sigma})^2 + 4\Delta_\sigma^2} + \sqrt{(\varepsilon_M + \varepsilon_{d,\sigma})^2 + 4t_\sigma^2} \right|, \quad (7.36)$$

$$E_{2,\sigma}^\pm = \pm \frac{1}{2} \left| \sqrt{(\varepsilon_M - \varepsilon_{d,\sigma})^2 + 4\Delta_\sigma^2} - \sqrt{(\varepsilon_M + \varepsilon_{d,\sigma})^2 + 4t_\sigma^2} \right|, \quad (7.37)$$

con $\varepsilon_{d,\sigma} = \varepsilon_d \pm B_d$.

De manera alternativa, se puede hacer uso de la descripción basada en el formalismo de Green y calcular la función retardada del QD (Ver Capítulo 5, Ecuación (5.35)). Nuevamente, para acoplamiento pequeño, es posible despreciar el acoplamiento efectivo entre los dos estados de spin del QD frente a la hibridización con el cable superconductor. Luego, la función de Green retardada para una orientación de spin es

$$G_\sigma^{-1}(\varepsilon) = \varepsilon\tau^0 + (\varepsilon_{qd} \mp B)\tau^z - \Sigma_\sigma(\varepsilon), \quad (7.38)$$

con τ^0 la matriz identidad de 2×2 y τ^z la matriz de Pauli operando en los grados de libertad de partícula-agujero. Asimismo $\Sigma_\sigma(\varepsilon)$ es la matriz de 2×2 con elementos

$$\begin{aligned} \Sigma_{11}(\varepsilon) &= t_\sigma^2 g_M(\varepsilon) + \Delta_\sigma^2 \bar{g}_M(\varepsilon) = -\Sigma_{22}(-\varepsilon), \\ \Sigma_{12}(\varepsilon) &= -t_\sigma \Delta_\sigma [g_M(\varepsilon) + \bar{g}_M(\varepsilon)] = \Sigma_{21}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (7.39)$$

donde

$$g_M(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_M + i0^+}, \quad \bar{g}_M(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_M + i0^+}. \quad (7.40)$$

Lo niveles del espectro de baja energía con peso en el QD se encuentran definidos por los polos de $G_\sigma(\varepsilon)$ y son calculados a partir de

$$\text{Det} [G_\sigma^{-1}(\varepsilon)] = 0. \quad (7.41)$$

Los cruces a energía cero están definidos a partir de

$$\text{Det} [G_\sigma^{-1}(\varepsilon = 0)] = 0. \quad (7.42)$$

Esta ecuación desemboca en

$$\varepsilon_{\text{qd}} = \mp B + \frac{(\Delta_\sigma^2 - t_\sigma^2)}{\varepsilon_M}, \quad (7.43)$$

donde los dos valores corresponden a los casos $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

La inclusión en este procedimiento de los efectos de los estados por encima del gap (supragap) no modifica en esencia al mismo. El paso crucial será la adición de términos extra en la autoenergía de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \Sigma_{11,n}(\varepsilon) &= (t'_\sigma)^2 g_n(\varepsilon) + (\Delta'_\sigma)^2 \bar{g}_n(\varepsilon) = -\Sigma_{22,n}(-\varepsilon), \\ \Sigma_{12,n}(\varepsilon) &= -t'_\sigma \Delta'_\sigma [g_n(\varepsilon) + \bar{g}_n(\varepsilon)] = \Sigma_{21,n}(\varepsilon), \end{aligned} \quad (7.44)$$

con

$$g_n(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - E_n + i0^+}, \quad \bar{g}_n(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon + E_n + i0^+}. \quad (7.45)$$

A la hora de calcular propiedades de transporte a partir del modelo y los ingredientes introducidos anteriormente, se consideran valores para los parámetros que son los reportados a partir de los experimentos con cables de InAs [91, 94, 95]. En particular, se toma $\Delta = 0,2\text{meV}$, $\lambda = 0,5\text{meV}$ y $B_S = 1\text{meV}$, de manera tal de que $\mu_c \simeq -19,02\text{meV}$. Dentro de la fase topológica, se hace foco en el caso en que $\mu_S = 1,01\mu_c$. Para estos parámetros, $\xi_M \simeq 104a$. Asimismo, se puede ver que sólo los cables con longitudes significativamente mayores a $2\xi_M$ son libres de efectos de hibridización entre ambos modos de Majorana. En los resultados que se presentan a continuación, se analiza en detalle la cadena finita con $L = 250a$, el cual corresponde al caso con una longitud levemente superior a $2\xi_M$.

7.4. Resultados con Campo Magnético Perpendicular a la dirección del Acoplamiento Spin-Órbita

Fase Topológica: $\mu < \mu_c$

Por un lado, se estudia el escenario con el sistema en la fase topológica, $\mu < \mu_c$ con longitud $L = N_w a$ siendo $N_w = 250$. Para este caso, los modos de Majorana en los bordes no se encuentran completamente desacoplados, pero sí débilmente hibridizados. Como consecuencia de dicha hibridización, el espectro del cable contiene estados de partícula y agujeros de baja energía en el espectro, para energías $\pm \varepsilon_M$ los cuales pueden ser descritos por la Ecuación (7.26). Esto puede analizarse también en el contexto en que dicho cable se acopla con el QD, y se considera que a lo largo de todo este sistema, el campo de Zeeman es el mismo ($B_d = B_S = 1 \text{ meV}$). En este caso, el QD se comporta como una impureza magnética hibridizada con un superconductor. Los estados de sub-gap que surgen de este acoplamiento pueden exhibir diferentes regímenes, los cuales dependen del grado de unión entre ambas partes. En el regimen de acoplamiento débil, correspondiente a $t_{cS} \ll \Delta$, se espera comunicación entre los estados de baja energía del cable con aquellos en el QD, cuando ambos sistemas están en resonancia. Esto sucede cuando uno de los niveles de Zeeman del QD tiene una energías $\varepsilon_{d,\sigma} = \varepsilon_d \pm B_d \simeq \varepsilon_M$, con $\sigma = \uparrow, \downarrow$. Para acoplamiento fuerte, los estados de supra-gap también juegan un rol, como se discutirá más adelante.

La parte sub-gap del espectro originada por el acoplamiento de los modos topológicos y el QD polarizado se analiza en la Figura 7.4.

En (a) se presenta el caso en el cual la conexión entre el cable y el QD es pequeña, en (b) una hibridización intermedia y en (c) un acoplamiento fuerte. En las tres figuras se muestra el espectro que surge de la diagonalización exacta del Hamiltoniano del cable acoplado con el QD, así como la predicción basada en la diagonalización del Hamiltoniano efectivo de la Ecuación (7.27). En los tres espectros se pueden observar rasgos del superconductor desacoplado (ver líneas rectas a energías $\pm \varepsilon_M$) para valores lo suficientemente grandes de $|\varepsilon_d|$. Para el QD débilmente acoplado, estos valores asintóticos se alcanzan cuando ε_d se aparta levemente de los valores resonantes determinados por el campo Zeeman, correspondientes a $\varepsilon_d \pm B_d$, asociados con los estados de spin \uparrow, \downarrow del QD aislado. Cerca de estos valores, es posible identificar los cruces a energía cero. Los efectos de la hibridización entre estos dos sistemas puede identificarse en dos características de los espectros de la Figura 7.4:

I la apertura de un pequeño gap entre los dos niveles de menor energía, tanto para partículas como para agujeros, en $\varepsilon_d = \pm B_d$, y

II el cambio en el cruce a cero energía.

En el límite de acoplamiento débil (Figura 7.4(a)), el sector de baja energía del espectro puede ser reproducido de manera precisa por el Hamiltoniano efectivo de la Ecuación (7.27) y no teniendo en cuenta el acoplamiento del QD con los estados por encima del gap ($t'_{\sigma,n} = \Delta'_{\sigma,n} = 0$). Esto puede verse claramente en las curvas punteada de la Figura 7.4. Para los presentes parámetros, las excitaciones de partícula-agujero de los modos de Majorana poseen un pequeño ángulo θ_M con respecto a la orientación del campo magnético, el cual genera una asimetría significativa en el acoplamiento neto

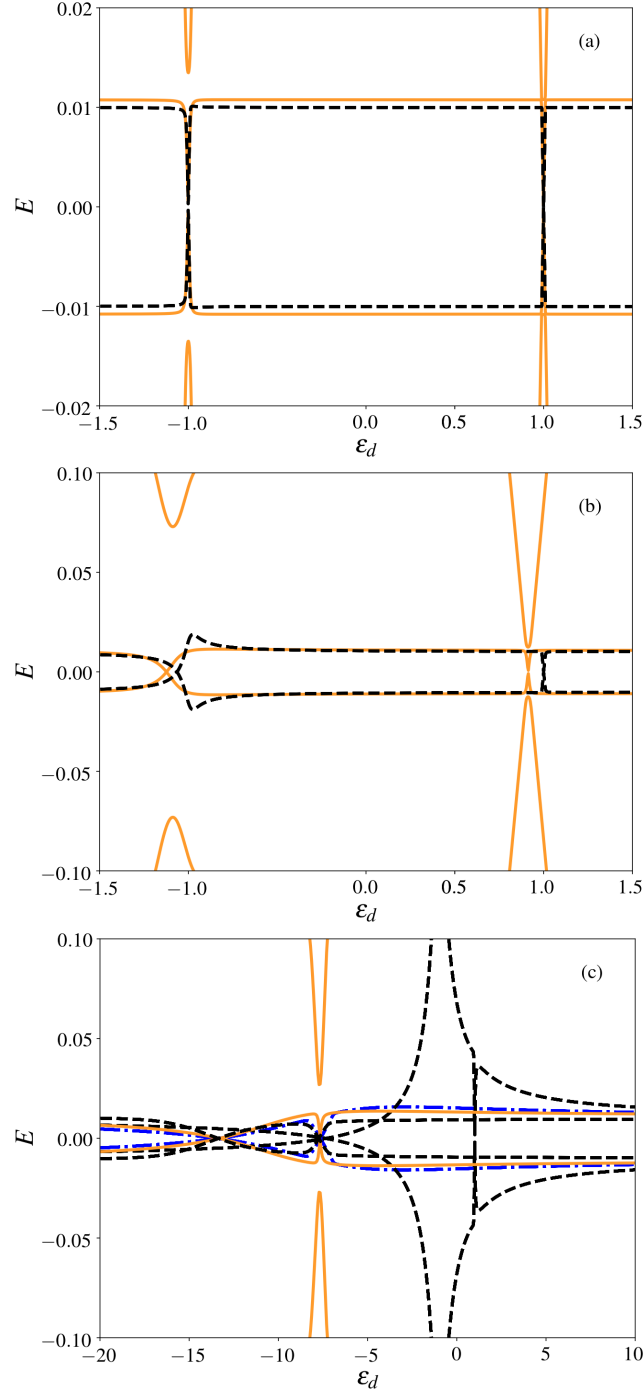


Figura 7.4: Espectro de sub-gap como función de la energía ε_d del quantum dot para un sistema con $L = 250a$. $B = 1meV$, $\lambda = 0,5meV$, $\Delta = 0,2meV$ y $\mu = 1,01\mu_c$. Las líneas sólidas y punteadas corresponden a los resultados obtenidos con el Hamiltoniano exacto y el efectivo, respectivamente. (a): $t_{cS} = 0,1meV$. Para el caso efectivo, los parámetros (Ecuación (7.29)) son: $w_r = 0,02$, $w_l = 0,008$, $\varepsilon_M = 0,01meV$, $\theta_M = 0,045\pi$. (b): $t_{cS} = 1meV$. (c): $t_{cS} = 10meV$. En (c), los resultados del Hamiltoniano efectivo que incluyen contribuciones de estados supragap se muestran en azul. Los parámetros correspondientes son: $E_1 = 0,11meV$, $E_2 = 0,14meV$, $\tilde{\alpha}_{1,\uparrow} = 1,5\tilde{\beta}_{1,\uparrow}$, $\tilde{\beta}_{1,\uparrow} = 0,073$, $\tilde{\alpha}_{2,\downarrow} = 1,7\tilde{\beta}_{2,\downarrow}$, $\tilde{\beta}_{2,\downarrow} = 0,08meV$, mientras que el resto permanece igual que en los paneles anteriores. Los resultados alcanzados con H_{eff} tomando $\tilde{\alpha}_{n,\sigma} = \tilde{\beta}_{n,\sigma} = 0$ se muestran en líneas negras punteadas.

entre dichos modos y los estados \uparrow, \downarrow del QD. Esto es fácil verlo en la Ecuación (7.33) en donde el término de acoplamiento es $\propto \cos(\theta_M)$ para la orientación de spin \uparrow , y $\propto \sin(\theta_M)$ para la \downarrow . A partir de este modelo efectivo, es simple calcular los cruces con el eje horizontal, para los cuales los modos de baja energía deben valer cero. Estos cruces suceden en $\varepsilon_d \simeq \pm B_d - \delta\varepsilon_\sigma$, con $\delta\varepsilon_\sigma = (|t_\sigma|^2 - |\Delta_\sigma|^2) / \varepsilon_M$ (Ver Ecuaciones (7.36) y (7.37)). Asimismo, teniendo en cuenta la Ecuación (7.33) resulta claro que los cruces otorgan información importante respecto de los pesos $w_{1,l}, w_{1,r}$ de los modos de Majorana localizados en los extremos del cable, más precisamente, del modo que está en contacto con el QD. En particular, el cruce a cero energía sucede en ε_d , lo cual está corrido respecto del valor determinado por la separación de Zeeman $\pm B_d$ por una cantidad $\delta\varepsilon_\sigma = (|\Delta_\sigma|^2 - |t_\sigma|^2) / \varepsilon_M$. Tras una sustitución haciendo uso de la Ecuación (7.33),

$$\begin{aligned}\delta\varepsilon_\uparrow &= \pm 4 \frac{t_{cS}^2}{\varepsilon_M} w_{1,l} w_{1,r} \cos^2(\theta_M/2), \\ \delta\varepsilon_\downarrow &= \mp 4 \frac{t_{cS}^2}{\varepsilon_M} w_{1,l} w_{1,r} \sin^2(\theta_M/2).\end{aligned}\tag{7.46}$$

En [124] el gap entre los niveles de baja energía del Hamiltoniano efectivo (ver Ecuaciones (7.36) y (7.37)) para $\varepsilon_d = \pm B_d$ es señalado como una medida de la no-localidad de los modos de Majorana hibridizados. A partir del presente análisis dicha información está codificada también en el valor de ε_d para los cuales hay cruces a energía cero. Sin embargo, la descripción precisa de los estados de baja energía del espectro, más precisamente las posiciones de los cruces, pueden verse significativamente afectados por el acoplamiento con los estados por encima del gap.

En la Figura 7.4(b) se puede ver que, a medida que el acoplamiento entre el QD y el cable superconductor aumenta, el comportamiento del espectro de baja energía se aleja de la predicción de la versión simplificada del Hamiltoniano efectivo, en la cual sólo se tiene en cuenta la hibridización del QD con los modos de Majorana. La posición de los cruces a energía cero se ve particularmente afectada, así como la dependencia funcional de los estados de baja energía con ε_d . El apartamiento respecto del caso exacto se hace más evidente a medida que se aumenta el acoplamiento, como se puede ver en la Figura 7.4(c). Resulta notable cómo los cruces a energía cero se encuentran fuertemente corridos respecto de los valores del Zeeman $\pm B_d$. Aún así, dicho comportamiento puede reproducirse con el Hamiltoniano efectivo a partir de la inclusión de los efectos de los estados de supra-gap (líneas punteadas). La definición de los parámetros efectivos en este caso, se realizó a partir de un enfoque fenomenológico: se consideraron dos estados de baja energía del supra-gap con energías cercanas a las del espectro en el caso exacto, mientras que el resto de los parámetros se seleccionan de manera tal de que se ajusten a los cruces a energía cero. Los valores correspondientes se pueden observar al pie de la Figura 7.4. En la Figura 7.4(c) puede identificarse la forma tipo diamante en el espectro efectivo (líneas negras punteadas) características de los modos de Majorana acoplados fuertemente con el QD, como se discute en [124]. Aún así, es claro que dicha descripción efectiva no logra reproducir las características que posee el espectro exacto, como por ejemplo, los cruces a energía cero. La descripción adecuada para esos estados de baja energía demanda la consideración de acoplamientos con los estados de supra-gap (líneas azules punteadas).

La correspondencia entre estas características y las que se esperan en las mediciones experimentales de la conductancia es lo que complementa el análisis anterior. A la des-

cripción hasta aquí considerada (cable superconductor acoplado a un QD) se le agrega un sistema normal. Asimismo, se acopla al cable, en su otro extremo, un superconductor ordinario (Ver sitios $j = N_w + 1, \dots$ en la Ecuación (7.10)). El sistema completo arriba mencionado se lo supone, además, inmerso en una región con campo magnético.

En la Figura 7.5 se muestran los resultados de la conductancia, Ecuación (7.21), como función del nivel de energía del QD y del voltaje. Los parámetros que se utilizan son los mismos que en la Figura 7.4(b).

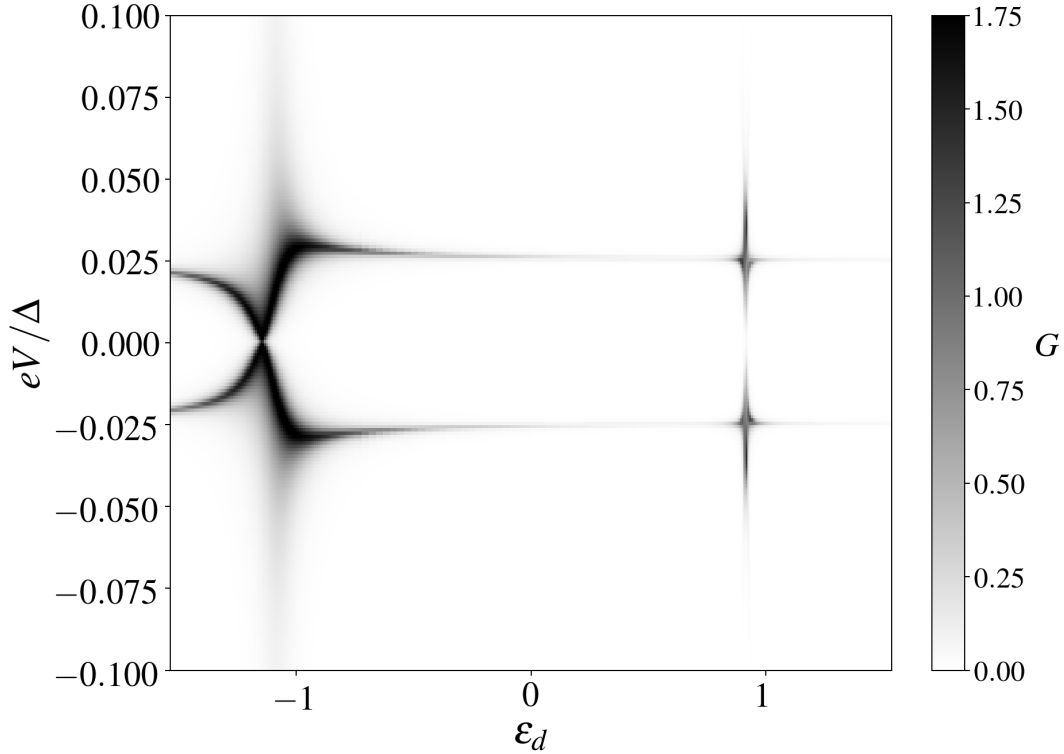


Figura 7.5: Conductancia total como función de la energía del QD, ε_d (en meV) y el voltaje aplicado V en unidades de Δ . El acoplamiento del QD con el cable normal es $t_{cN} = 1,0meV$. El resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 7.4(b).

Se puede ver fácilmente la similitud entre la conductancia y el espectro, al menos en la región dentro del gap. En particular, se puede apreciar un aumento de la conductancia a voltaje cero (y en sus alrededores) para energías ε_d . Los mismos ocurren en valores cercanos a los cruces a energía cero en el espectro. Información complementaria respecto de la respuesta a voltaje cero de la conductancia puede verse en el panel de arriba de la Figura 7.6.

Allí se muestra el comportamiento de la conductancia como función del voltaje para esos valores de ε_d en donde ocurren los cruces. También se pueden apreciar, las contribuciones de los procesos de reflexión de Andreev, Ecuación (7.17), involucrados (línea punteada). Para los valores de ε_d asociados con el estado de Zeeman \uparrow del QD, la conductancia a voltaje cero es mayor aunque no alcanza el valor cuantizado $2G_0^1$. Por otro lado, para el valor ε_d asociado a la hibridización con el estado de Zeeman \downarrow del QD, la conductancia a voltaje cero resulta muy pequeña y posee una división en dos picos

¹El mismo es el que se espera en conductancias a energía cero en presencia de modos de Majorana, pero en sistemas semi-infinitos

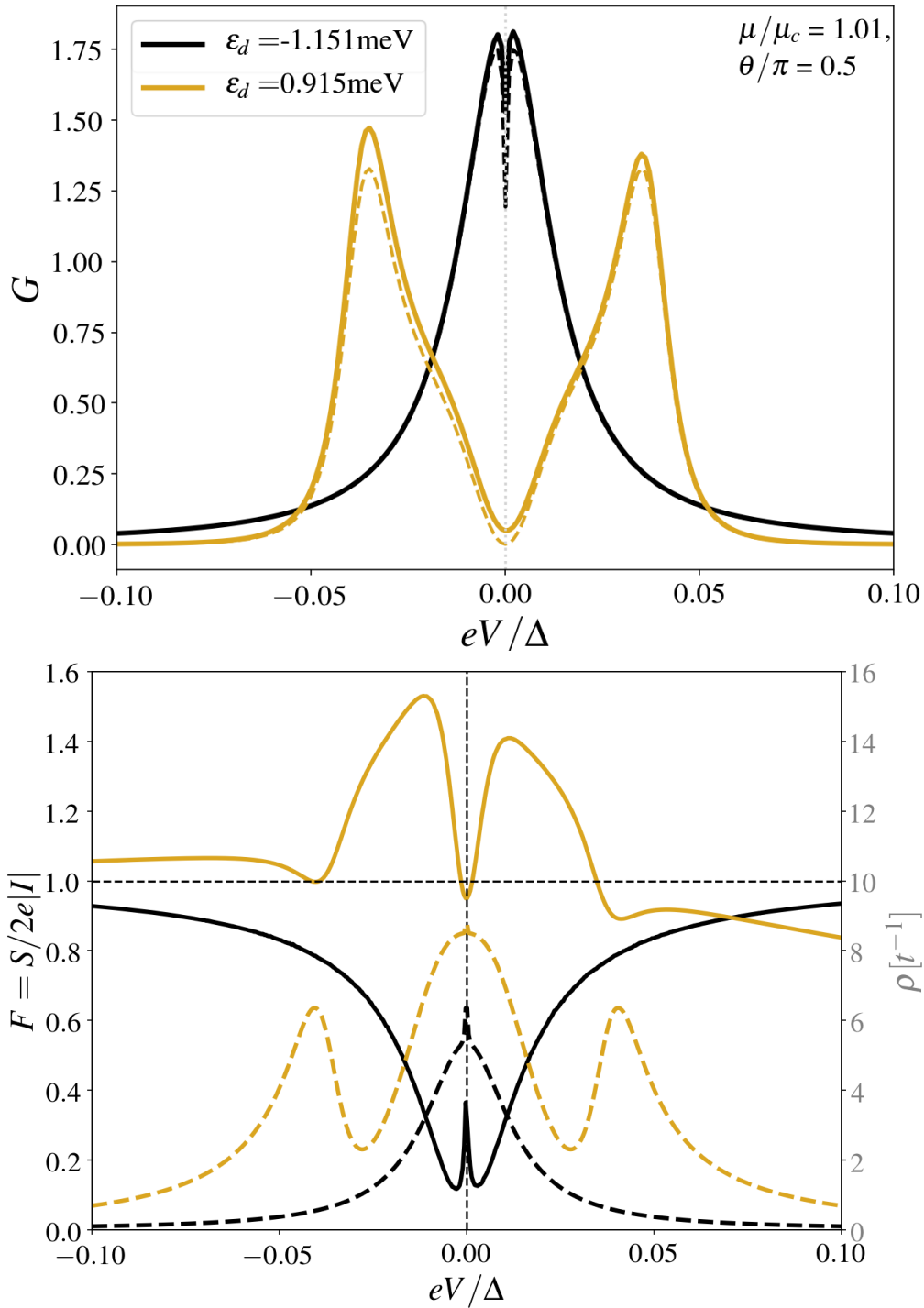


Figura 7.6: Arriba: Conductancia total, en unidades de $G_0 = e^2/h$, como función del voltaje V con las energías ϵ_d correspondientes a los cruces a energía cero. Abajo: Factor de Fano (líneas sólidas) y Densidad de Estados Lineal (líneas punteadas) del QD acoplado a ambos reservorios para los mismos parámetros que en el panel superior. El QD tiene un término de hibridización con el reservorio normal $t_{cN} = 0,5 \text{ meV}$. El resto de los parámetros son iguales al caso presentado en la Figura 7.4(b).

pronunciados alejados de $V = 0$. En ambos casos es posible ver, al menos en este rango de voltajes, que los procesos de Andreev involucrados son los responsables prácticamente

de toda la respuesta en conductancia del sistema.

Para los mismos parámetros, se puede ver en el panel de abajo de la Figura 7.6 el análisis del factor de Fano F (líneas sólidas), definido en la Ecuación (7.24), junto con la densidad de estados local (LDOS, por las siglas en inglés de *linear density of states*) del QD (líneas punteadas). En las LDOS se observa fácilmente la presencia de un pico estrecho a energía cero en el caso negro, asociado al modo resonante que resulta del estado ligado de Majorana presente en el cable y que está hibridizado con el nivel de Zeeman \uparrow del quantum dot y ligeramente ensanchado por el acoplamiento con el reservorio normal. Por otro lado, en la curva amarilla, es posible notar un ensanchamiento del pico a energía cero producto de la hibridización con el nivel de Zeeman \downarrow del QD con el reservorio normal y el poco acoplamiento con el cable. Para este caso también se puede observar un par de picos a energías más altas, los cuales se encuentran asociados a la hibridización del nivel del dot con estados por encima del gap (supra-gap) del cable. Además, es importante notar que, como consecuencia de la fuerte polarización de los modos de Majorana en la orientación opuesta al spin, el acoplamiento entre este nivel del QD y el cable resulta muy débil, y por lo tanto, la conductancia muy baja. En ambos casos, se observa un comportamiento complejo de F como función del voltaje V , pero aún así resulta importante remarcar que $F \leq 1$ en la vecindad de $V = 0$ para el valor de ε_d asociado al estado de Zeeman \uparrow (líneas sólidas en negro). Para este caso, la conductancia alcanza un valor grande a voltaje cero, y consecuentemente, el factor de Fano es bajo (pero no cero, como es esperable idealmente). Para el otro valor de ε_d , ligado al estado de Zeeman opuesto (y en líneas amarillas), el factor de Fano es significativamente más grande y cercano a $F = 1$ alrededor de $V = 0$ en concordancia con un valor bajo de la conductancia.

Como se mencionó anteriormente, el análisis de dichas propiedades de transporte se extiende para el caso en el que el QD se encuentra fuertemente ligado al cable, más precisamente, para los parámetros de la Figura 7.4(c). Allí, como ya se ha remarcado, el espectro posee una sólida contribución de los estados supra-gap. Los resultados del comportamiento de la conductancia total como función de V y ε_d se muestran en la Figura 7.7. Al igual que en el caso previamente presentado, se puede apreciar un comportamiento cualitativo muy similar al que se observa en el espectro. Los resultados correspondientes para $G(V)$ con los valores de ε_d fijados de acuerdo a los cruces a voltaje cero se pueden observar en el panel superior de la Figura 7.8. En el panel inferior de la misma, se presenta el correspondiente factor de Fano.

La conducta es cualitativamente similar al caso con acoplamiento pequeño analizado en la Figura 7.6: la conductancia para voltaje nulo posee un pico para el caso con ε_d más chico (curva negra), el cual se encuentra ligado al nivel de Zeeman \uparrow del QD, mientras que la conductancia se hace muy pequeña (en particular, la componente de Andreev) para la otra energía (y polarización) del QD. También se puede apreciar una disminución en el valor de la conductancia, así como un comportamiento mucho más irregular del factor de Fano si se lo compara con el caso previo. Aún así, se aprecia una caída conforme $|V| \rightarrow 0$ para el caso de ε_d atado al nivel de Zeeman \uparrow (curva negra).

Fase No-Topológica: $\mu > \mu_c$

A continuación, se estudia el espectro de baja energía de un cable superconductor con los mismos valores de B , λ , Δ y N_w que se utilizaron anteriormente, pero con

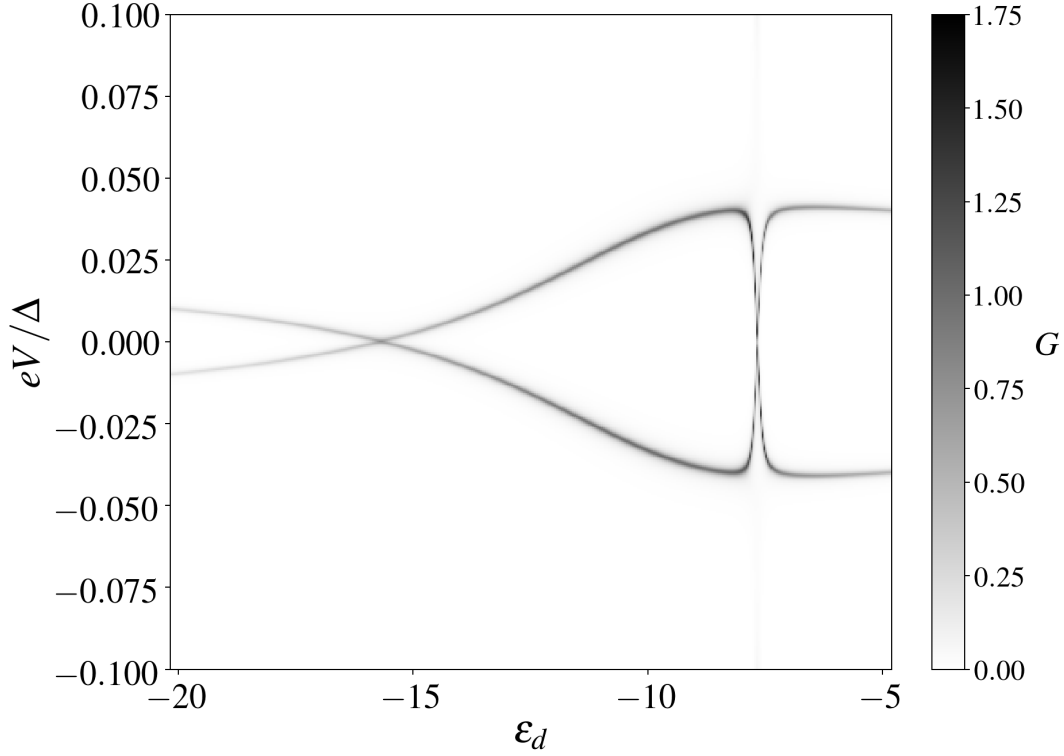


Figura 7.7: Conductancia total como función de la energía del QD, ε_d (en meV) y el voltaje aplicado V en unidades de Δ . El acoplamiento del QD con el cable normal es $t_{cN} = 1,0meV$. El resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 7.4(c).

un valor del potencial químico dentro de la fase no-topológica. Para esos parámetros, el gap superconductor efectivo es más chico pero la energía de Fermi cruzará las dos bandas del Hamiltoniano de la Ecuación (7.5) y el término dominante será $\Delta_{k_F}^S$. Como se ha mencionado anteriormente, dado que el cable es de tamaño finito, el espectro de supragap consistirá en una secuencia de niveles discretos. En este régimen, el origen de los cruces a energía cero es similar a aquellos generados por impurezas magnéticas en superconductores y se conocen como estados de Yu-Shiba-Rusinov[126–129]. De hecho, el espectro sin la impureza posee un gap, mientras que al considerar la hibridización de la impureza con los estados supragap se observan estados ligados dentro del gap. Para ciertos parámetros, estos estados ligados se cruzan a energía cero.

En la Figura 7.9 se presenta el espectro de energía para $\mu = 0,9\mu_c$ para el caso de dos acoplamientos diferentes con el quantum dot. En el panel superior el t_{cS} es el mismo que en la Figura 7.4(b).

Es posible identificar los cruces a energía cero cerca de $\varepsilon_d = \pm B_d$. A diferencia del caso topológico, el comportamiento del espectro es simétrico tanto para valores positivos como negativos. Esto refleja la naturaleza del spin de estas excitaciones que poseen el mismo peso para las componentes \uparrow y \downarrow . En contraste, en el caso topológico, es importante recordar que las excitaciones de baja energía eran combinaciones de modos de Majorana definidos por operadores fermiónicos polarizados a lo largo de una dirección con un pequeño apartamiento θ_M con respecto al campo magnético.

El efecto de un acoplamiento fuerte entre el QD y el cable se analiza en el panel de abajo de la Figura 7.9. Conforme el acoplamiento se hace más grande, el QD se

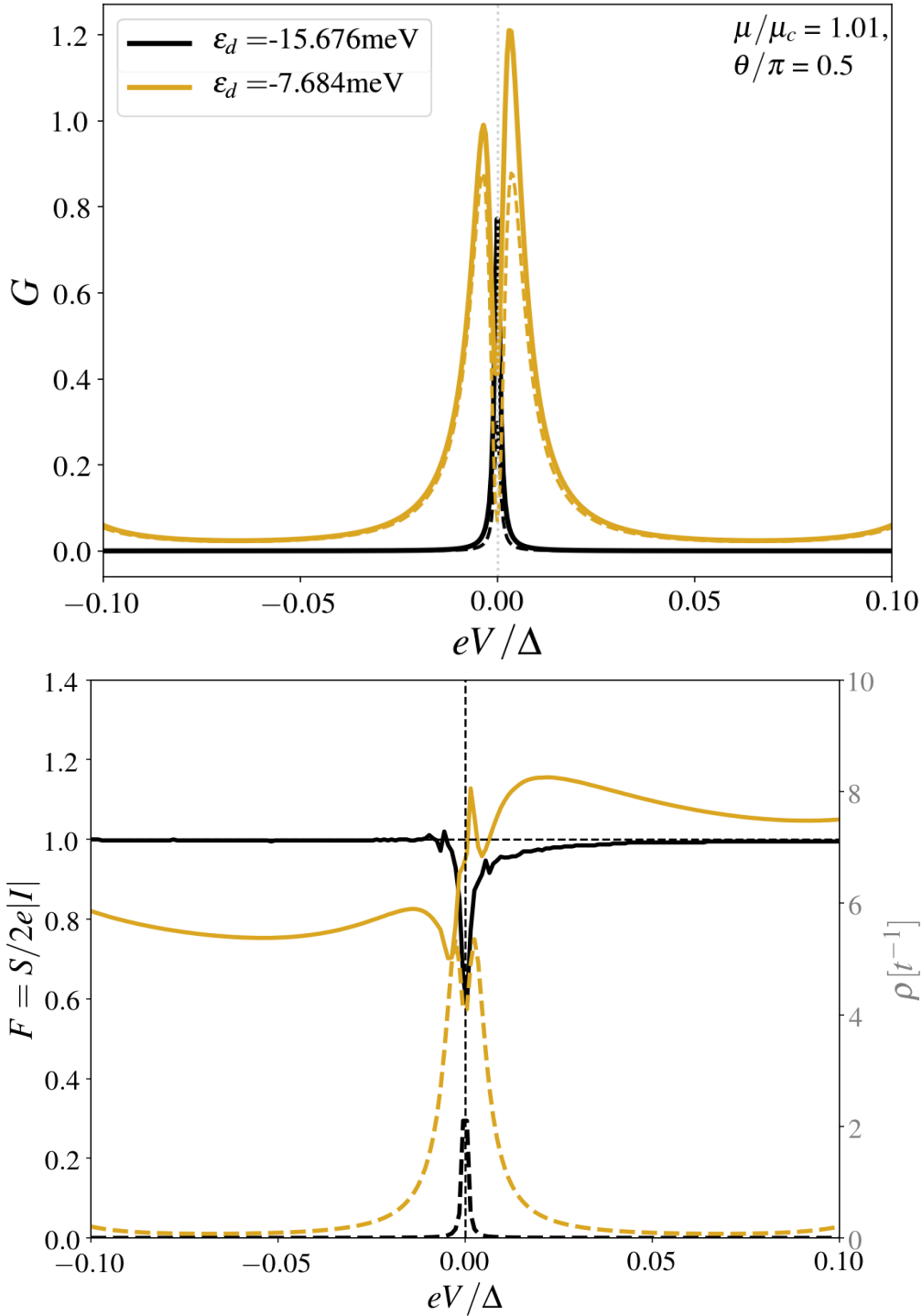


Figura 7.8: Arriba: Conductancia total, en unidades de $G_0 = e^2/h$, como función del voltaje V con las energías ϵ_d correspondientes a los cruces a energía cero. Abajo: Factor de Fano (líneas sólidas) y Densidad de Estados Lineal (líneas punteadas) del QD acoplado a ambos reservorios para los mismos parámetros que en el panel superior. El QD tiene un término de hibridización con el reservorio normal $t_{cN} = 0,5 \text{ meV}$. El resto de los parámetros son iguales al caso presentado en la Figura 7.4(c).

hibridiza con un largo número de estados de supragap. El resultado es un espectro sin cruces que se asemeja al comportamiento de los estados débilmente acoplados de Yu-

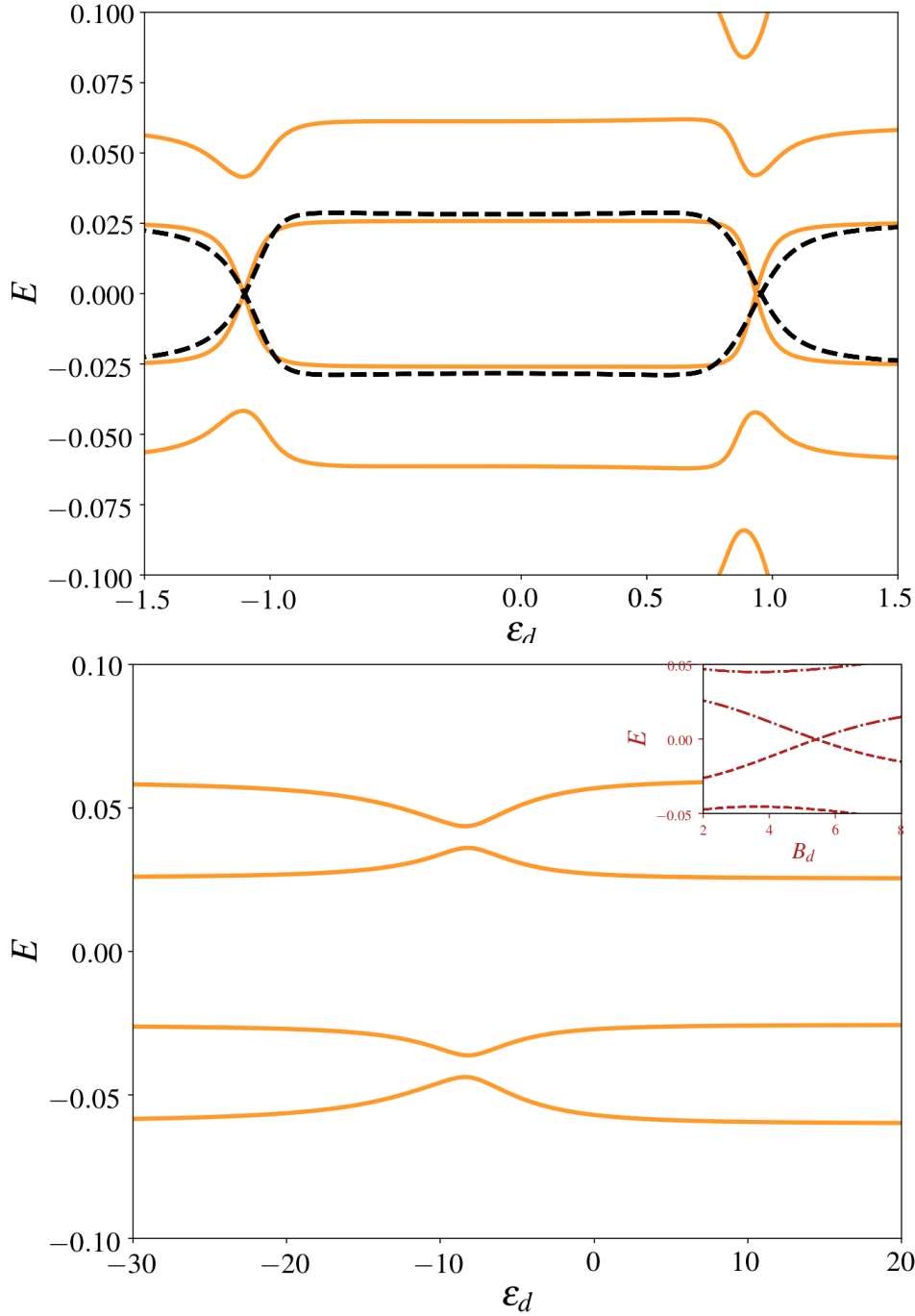


Figura 7.9: Espectro sub-gap como función de la energía ϵ_d del QD para un sistema con $N_w = 250$. Las líneas sólidas y punteadas corresponden al Hamiltoniano exaco y efectivo, respectivamente. Los parámetros son los mismos que en la Figura 7.4: $\lambda = 0,5 \text{ meV}$, $B = 1 \text{ meV}$, pero el potencial químico se considera por encima del valor crítico, siendo $\mu = 0,9 \mu_c$. El panel de arriba corresponde al caso con $t_{CS} = 1 \text{ meV}$, mientras que en el panel de abajo $t_{CS} = 10 \text{ meV}$. El Hamiltoniano efectivo utilizado es el de la Ecuación (7.27), y no se tuvieron en cuenta los términos con Γ_M y los dos modos supragap con energías $E_1 = 0,026 \text{ meV}$, $E_2 = 0,59 \text{ meV}$ y los parámetros $t'_{1,\uparrow} = \Delta'_{1,\downarrow} = 0,06 \text{ meV}$, $t'_{1,\downarrow} = \Delta'_{1,\uparrow} = 0,048 \text{ meV}$, $t'_{2,\sigma} = 1,2 t'_{1,\sigma}$, $\Delta'_{2,\sigma} = \Delta'_{1,\sigma}$. Inset: mismos parámetros que en el panel de abajo con $\epsilon_{qd} = -13 \text{ meV}$ como función de B .

Shiba-Rusinov. Para dichos estados ligados, los cruces tienen lugar para valores altos del campo magnético en el QD, B_d . Esto se ilustra en el inset en el panel inferior de la Figura 7.9. Para analizar este límite, resulta útil recordar los resultados conocidos para una impureza magnética acoplada a un superconductor singlete con una densidad de estados constante. En ese caso, los cruces a energía cero de los estados de subgap resultan de la hibridización de la impureza con el superconductor tipo-s con una densidad de estados $\nu_S \simeq \pi/4t_S$ [129] y suceden para

$$\varepsilon_d = \pm \sqrt{B_d^2 - t_{cS}^2 \nu_S}, \quad (7.47)$$

en donde se obtienen soluciones reales para $B_d \geq t_{cS} \sqrt{\nu_S}$. En el ejemplo ilustrado en el panel inferior de la Figura 7.9, esto sucede para $B_d > 2,8meV$, siendo consistente con lo obtenido en el inset de dicha Figura.

Al igual que en la sección previa, estas propiedades de los espectros se contrastan con lo observado a partir del cálculo de fenómenos de transporte. En la Figura 7.10 se muestra el comportamiento de la conductancia como función de la energía del QD y del voltaje aplicado. Se pueden identificar fácilmente los rasgos similares que comparten con los espectros de la Figura 7.9, en particular, los cruces a energía cero.

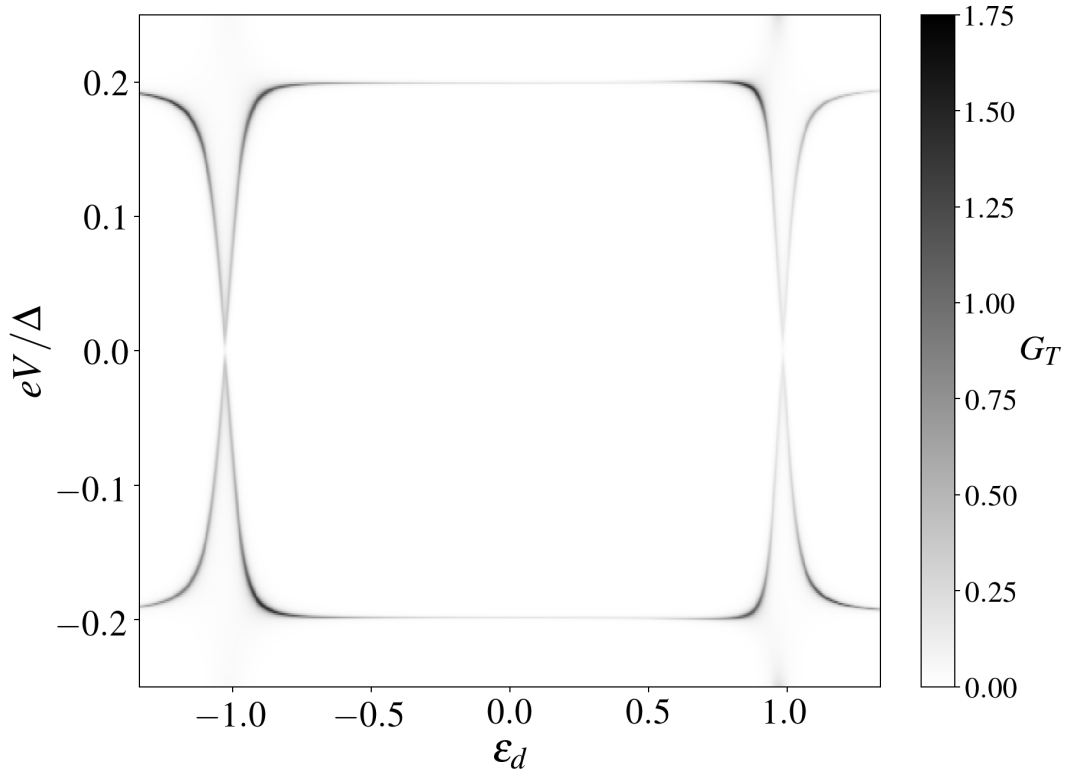


Figura 7.10: .

Finalmente, en la Figura 7.11 se presentan la conductancia (panel superior) y el ruido (panel inferior) para los valores de ε_d correspondientes a los cruces. A diferencia de la fase topológica, la conductancia posee un menor peso a voltaje cero para ambos valores de ε_d . Consecuentemente, el comportamiento del ruido en el presente caso es claramente diferente al del caso topológico mostrados en las Figuras 7.6 y 7.8. En particular, el factor de Fano F exhibe valores $F \geq 1$ dentro de todo el rango de voltajes.

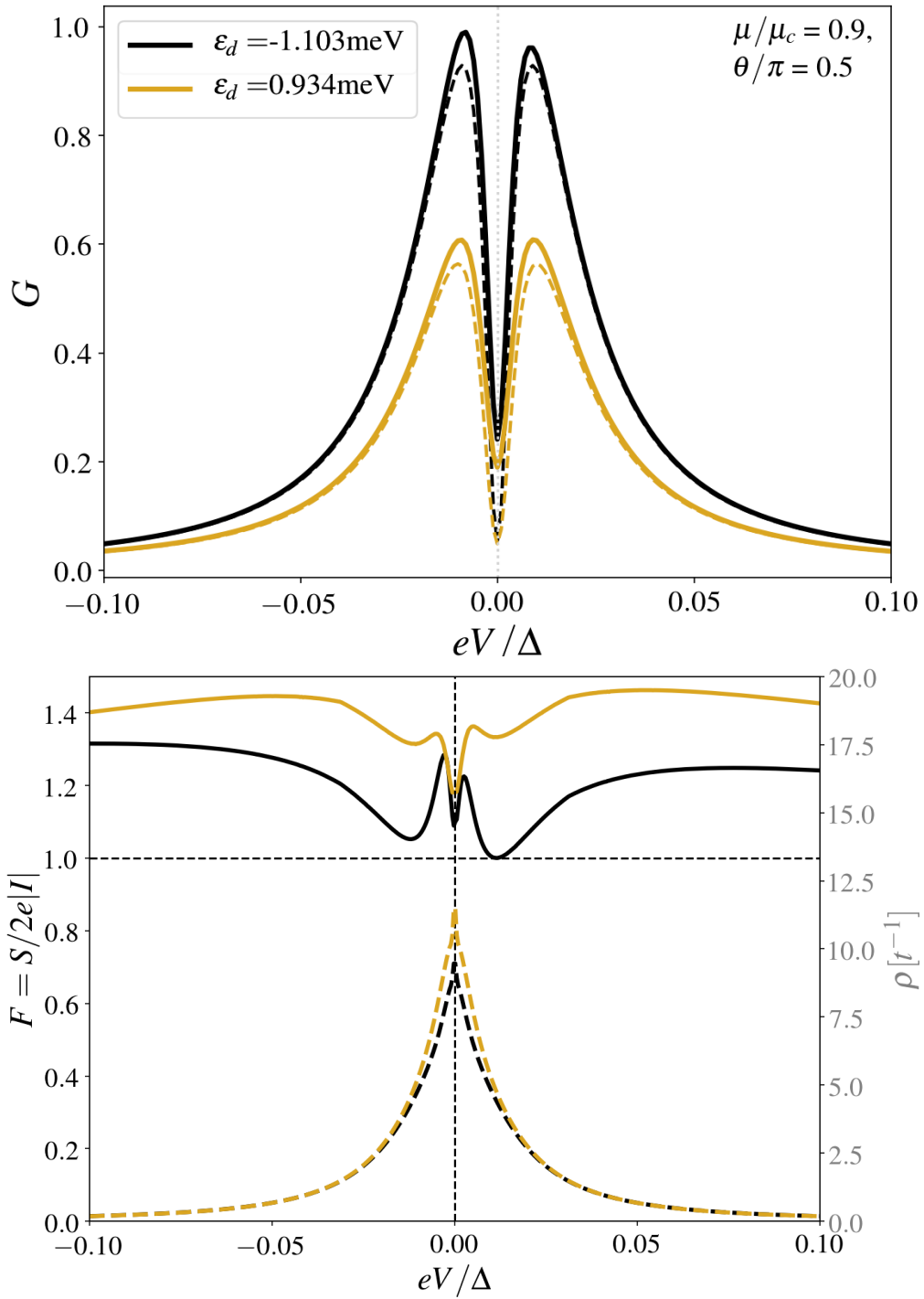


Figura 7.11: -

7.5. Resultados con Campo Magnético No Perpendicular a la dirección del Acoplamiento Spin-Órbita

A continuación, se presentan los resultados para el caso en que \vec{n}_λ y \vec{n}_B no son perpendiculares. A diferencia de lo planteado anteriormente, se deja fijo el potencial

químico dentro de la fase topológica, $\mu = 1,01\mu_c$, así como el resto de los parámetros a excepción de la hibridización con el QD y, como se mencionó, el ángulo entre el campo magnético y el SOC. Para los parámetros utilizados, el valor del ángulo crítico definido en la Ecuación (7.2) es $\theta_c \simeq 0,436\pi$, lo cual implica que un apartamiento $\delta\theta_c = 0,064\pi$ respecto de la configuración perpendicular es suficiente para que el cable esté fuera de la fase topológica. En la Figura 7.12 se observan los espectros del subgap como función de la energía ε_d del quantum dot. Para ambos ángulos, el superconductor se encuentra en la fase no-topológica. Asimismo, en cada caso se consideran acoplamientos fuerte y moderado entre el superconductor y el QD.

En todos los casos se observan rasgos de similitud con los espectros discutidos en el caso perpendicular (ver Figura 7.4). Para el caso con $\delta\theta = 0,35\pi$ existen cruces para estados excitados por encima de aquellos más cerca del cero de energía. El comportamiento para la conductancia como función del voltaje V y la energía ε_d se presenta en la Figura 7.13.

A primera vista, se pueden identificar características similares a las del caso perpendicular presentado en la Figura 7.5. Aún así, un análisis más detallado revela una fuerte asimetría en el transporte a través de cada uno de los dos niveles de Zeeman. Esto puede verse claramente en el panel superior de la Figura 7.14. Allí se puede observar el comportamiento de la conductancia como función de V para ε_d fijado en los cruces a energía cero. La conductancia para voltajes bajos a través del nivel \downarrow del quantum dot prácticamente se desvanece. Esto se debe a que el cable superconductor posee un gap y, además, las cuasi-partículas se encuentran fuertemente polarizadas. La densidad de estados finita a energía cero (curva punteada de color amarilla) se debe sólo a la hibridización del QD con el cable normal, mientras que la densidad de estados con esta misma orientación de spin desaparece en el cable. Al comparar con el caso topológico (Figura 7.6) se advierte una menor contribución de la reflexión de Andreev a la conductancia total. En el panel inferior de la Figura 7.14 se muestra el comportamiento del ruido (línea sólida). Al igual que en el caso no-topológico ilustrado en la Figura 7.11, es posible notar valores $F \geq 1$ dentro de buena parte del rango de subgap.

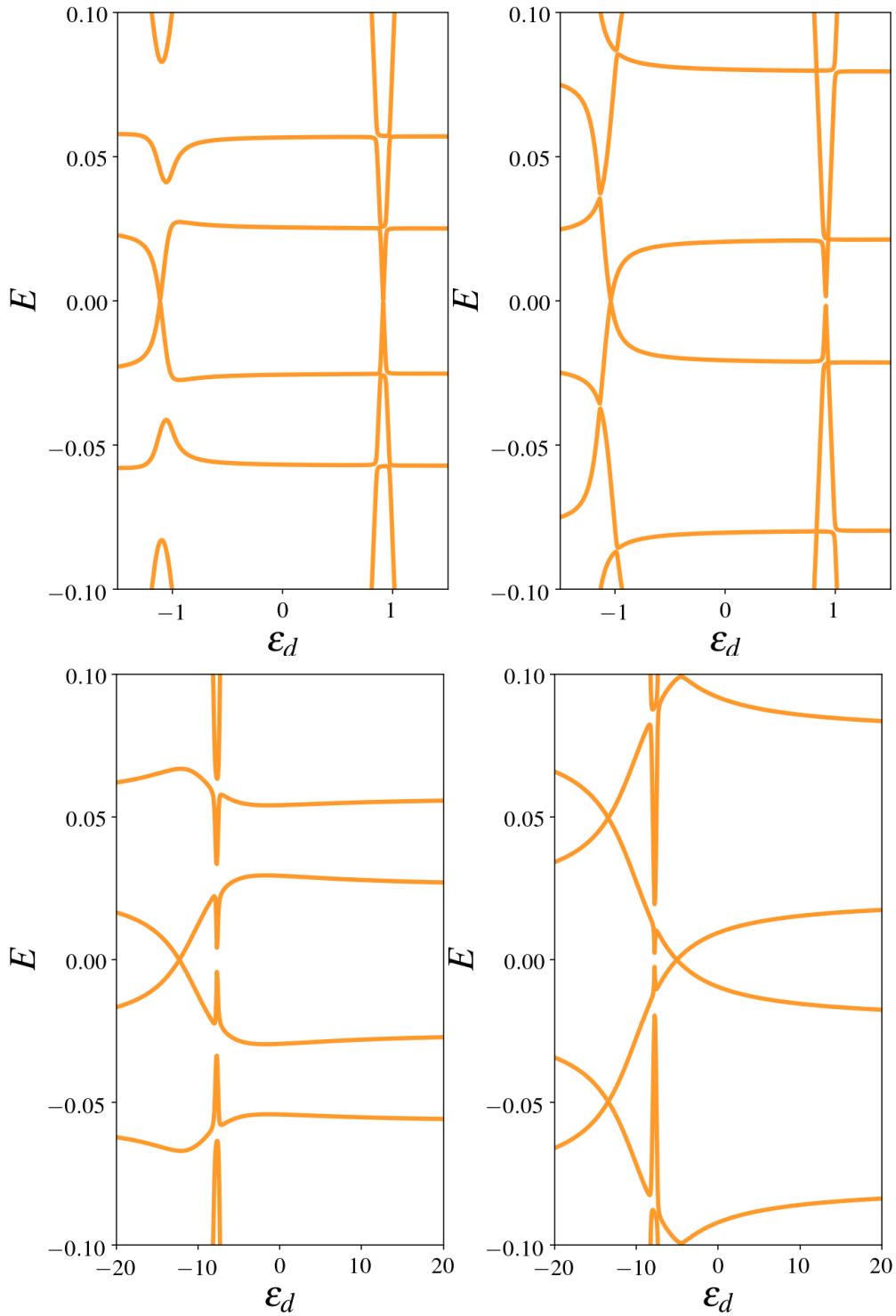


Figura 7.12: Espectro de subgap como función de la energía ε_d del QD para un sistema con $L = 250a$. Panel superior: $t_{cS} = 1,0meV$. Panel inferior: $t_{cS} = 10,0meV$. El resto de los parámetros son iguales a los de la Figura 7.4: $\lambda = 0,5meV$, $B = 1meV$, $\mu = 1,01\mu_c$. El ángulo entre \vec{n}_λ y \vec{n}_B es $\theta = \pi/2 - \delta\theta$, con $\delta\theta = 0,1\pi$ y $0,35\pi$ (paneles a la izquierda y derecha).

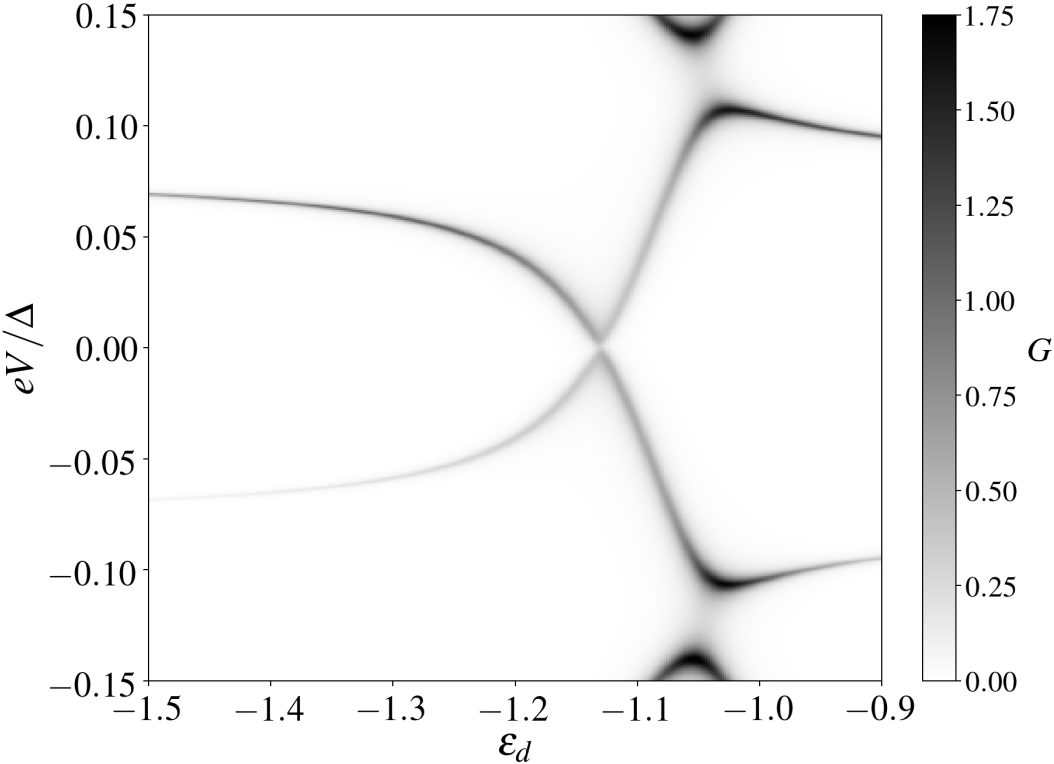


Figura 7.13: .

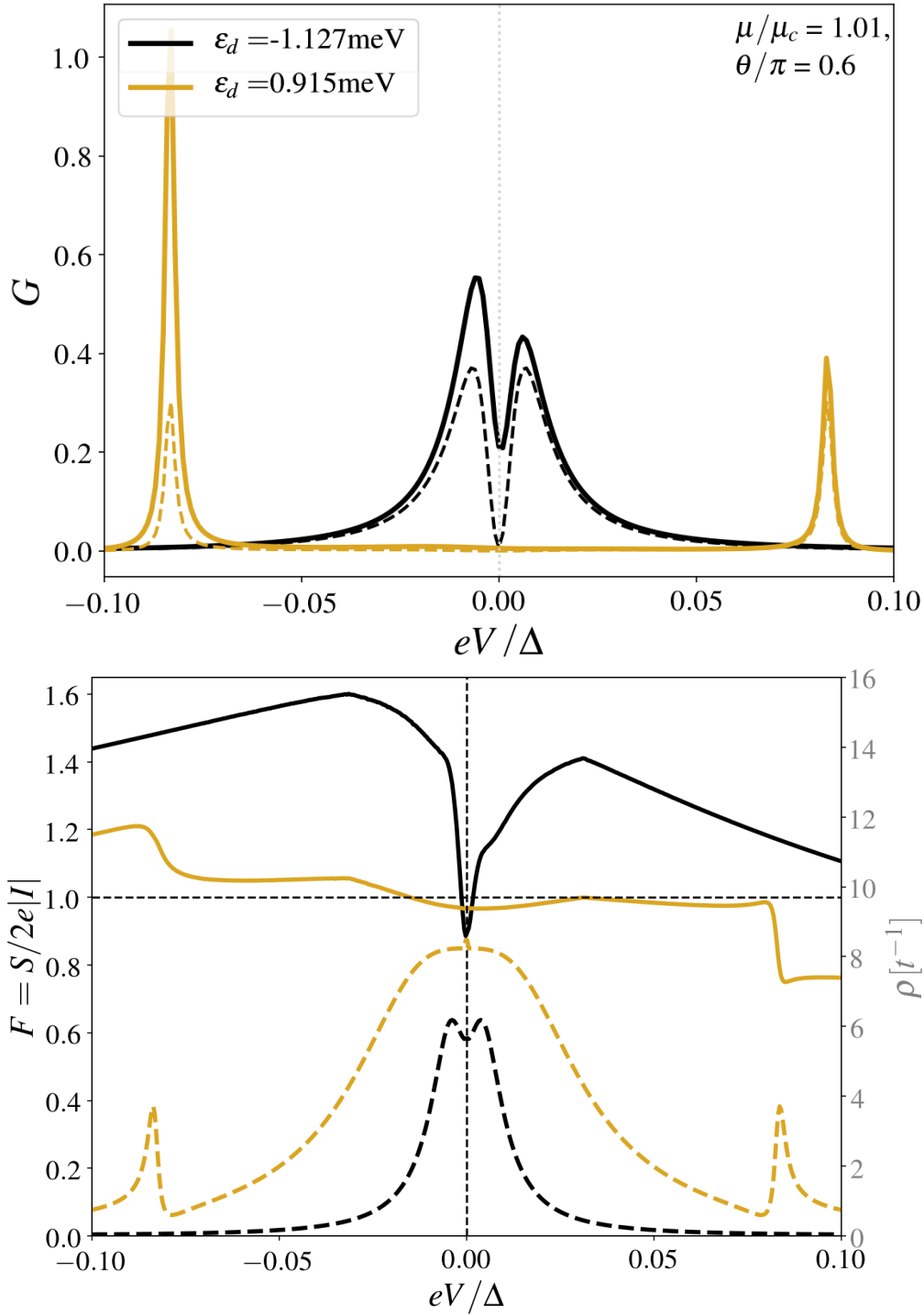


Figura 7.14: Arriba: Conductancia total, en unidades de $G_0 = e^2/h$, como función del voltaje V con las energías ϵ_d correspondientes a los cruces a energía cero. Abajo: Factor de Fano (líneas sólidas) y Densidad de Estados Lineal (líneas punteadas) del QD acoplado a ambos reservorios para los mismos parámetros que en el panel superior. El QD tiene un término de hibridación con el reservorio normal $t_{cN} = 0,5 \text{ meV}$. El resto de los parámetros son iguales al caso presentado en el panel superior de la Figura 7.12.

Conclusiones

En esta tesis se estudiaron los métodos más prometedores que tienen como objetivo medir la presencia de estados de borde en sistemas superconductores topológicos: el efecto Josephson y los picos de conductancia a voltaje cero. Luego de introducir los modelos con superconductividad topológica utilizados y de entender los mecanismos que pueden ser de ayuda en la detección de fases topológicas y no topológicas, los resultados obtenidos se presentaron en dos capítulos.

En el Capítulo 6 se analizaron los espectros de Andreev y las corrientes Josephson para diferentes configuraciones con dos terminales. En todos los casos se incluyeron uno o dos superconductores topológicos con simetría de inversión temporal (TRITOPS) con interacción spin-órbita. Si bien la fase TRITOPS aún no posee realizaciones experimentales, las propiedades estudiadas en dicho capítulo resultan muy útiles para la detección y caracterización de la misma. En particular, se estudiaron diferentes orientaciones del spin-órbita y el efecto de las interacciones de muchos cuerpos cuando se introduce un QD entre ambos cables de la junta. Como referencia, es importante tener en cuenta que la corriente Josephson en juntas con superconductores con simetría de inversión temporal en la fase no-topológica y con un QD embebido, presenta lo que se conoce como transición $0 - \pi$ [102, 104–106].

Para las configuraciones TRITOPS-TRITOPS se definió un Hamiltoniano efectivo en donde sólo fueron tenidos en cuenta los grados de libertad asociados a los modos cero. A partir de los estados de muchas partículas para dicho Hamiltoniano efectivo, se obtuvieron las autoenergías para los sub-espacios par e impar. Luego, con el cálculo de los espectros y las corrientes Josephson, se halló que la fase introducida por las orientaciones relativas entre los acoplamientos spin-órbita juegan un rol similar al que introduce un flujo magnético en la junta. En este sentido, los cruces de niveles y los consecuentes saltos en la corriente Josephson difieren respecto de los casos de superconductores no-topológicos y varían de $\phi = \pi$ para orientaciones paralelas a $\phi = 0$ para orientaciones anti-paralelas.

Para el caso de las juntas TRITOPS-Superconductor también se obtuvo un Hamiltoniano efectivo a partir del cual se calcularon el espectro y la corriente Josephson. En este caso, la configuración resulta independiente de la orientación del vector acoplamiento spin-órbita. Se obtuvo una discontinuidad con un salto en la corriente Josephson

a $\phi = 0$, es decir, a flujo cero. El motivo se encuentra en una fase $\pi/2$ en el acoplamiento efectivo que se obtuvo en la deducción del Hamiltoniano y que puede ser rastreada a las relaciones entre los operadores de Bogoliubov con los cuales se representan a los modos cero. También se observó un cruce para $\phi = \pi$ el cual, al igual que el cruce en $\phi = 0$, se encuentra protegido por la paridad fermiónica. Finalmente, otra característica importante es la que respecta a la periodicidad de la corriente Josephson: la misma posee una periodicidad π en lugar de 2π , lo cual se puede también observar a partir del Hamiltoniano efectivo de baja energía.

Para las dos configuraciones arriba mencionadas también se calcularon las corrientes Josephson a partir de la diagonalización exacta para los casos en que los cables poseen longitud finita. Lo que se pudo observar al respecto es que si bien la descripción del sistema en términos de un Hamiltoniano efectivo resulta altamente precisa en el caso de cadenas largas, posee limitaciones para el caso de cadenas cortas dado que se necesita incluir en el modelado el acoplamiento entre los estados de borde.

Al incluir un QD interactuante en la juntura nuevamente se definieron Hamiltonianos efectivos de baja energía, en donde sólo se tuvieron en cuenta las hibridaciones con los estados a energía cero. En primer lugar se alcanzaron los resultados ya conocidos [102] para junturas con dos superconductores y un QD interactuante embebido, al observarse el cambio en el comportamiento del estado fundamental y el consecuente cambio en el comportamiento del signo de la corriente Josephson (transición $0 - \pi$).

En el caso de la configuración TRITOPS-QD-TRITOPS se observó un cruce con cuádruple degeneración en $\phi = \pi$ con su consecuente discontinuidad en la corriente Josephson para el caso en el que la orientación relativa de los términos de spin-órbita era nula, es decir, $\theta = 0$. Al considerar los casos en que $\theta \neq 0$, se observó que la corriente Josephson no se ve afectada por la interacción de muchos cuerpos. Al igual que lo analizado en [81], no se encuentran señales de transición $0 - \pi$ como función de U y la ocupación del QD. El origen de este comportamiento está en el hecho de que el espectro de baja energía se encuentra dominado por modos de energía cero, los cuales se hibridizan con el QD para formar un estado similar a un singlete de Kondo, independientemente del valor de U . A continuación, de manera similar a lo comentado anteriormente, se estudió una juntura TRITOPS-QD-Superconductor. Se observaron similitudes con respecto a la configuración con tuneo directo (es decir, sin el QD interactuante). Más precisamente, se manifestó nuevamente una discontinuidad con un salto en la corriente Josephson para flujo cero (consecuencia, una vez más, de la fase $\pi/2$ en los cálculos efectivos). Además, se volvió a revelar una ausencia de la transición $0 - \pi$ característica, como se mencionara anteriormente, de las junturas con dos superconductores. Nuevamente, esto se debe a la hibridación de los estados localizados en el QD con los modos cero del TRITOPS, que dan lugar a estados singletes de baja energía. Se demostró, de esta forma, que la presencia de los modos cero de un solo cable son suficientes para apantallar el estado localizado y de esta manera evitar la transición hacia la fase π . Es importante remarcar, que en estos casos también se alcanzaron resultados que explican la física de estas configuraciones a partir de Hamiltonianos efectivos de baja energía.

En el Capítulo 7 se analizaron las propiedades de transporte en cables superconductores de longitud finita con acoplamiento spin-órbita y campo magnético, tanto en la fase topológica, como en la fase no-topológica (o trivial). Se puso el foco en los parámetros que son relevantes en los experimentos, y se incluyó en la juntura un QD al ser este tipo de plataformas una de las más prometedoras en la búsqueda y caracterización de lo que

se conoce como picos de conductancia a voltaje cero [77, 95, 130].

Se comenzó el análisis a partir del estudio del espectro del cable conectado al QD. Por un lado, se resolvió el Hamiltoniano del sistema a partir de la diagonalización exacta y por otro lado se derivó un Hamiltoniano efectivo. El análisis de los espectros se llevó a cabo con el objetivo de contar con información complementaria que permita establecer una correspondencia con las características que se pueden llegar a observar en experimentos que midan la conductancia en este tipo de configuraciones. Se puso el foco en dos aspectos no estudiados hasta el momento: el efecto de los estados de supra-gap y el efecto de las orientaciones relativas entre el campo magnético y el acoplamiento spin-órbita.

Primero se consideró el caso donde los vectores campo magnético y spin-órbita son perpendiculares. En ese contexto, se pudo observar que en la fase topológica los modos de Majorana en sistemas finitos se combinan para formar excitaciones fermiónicas con energías no nulas. Estas se hibridizan con el QD dando lugar a estados que, para ciertos parámetros, cruzan los niveles a energía cero. Al calcular la conductancia, como función del nivel del dot y el voltaje, se identificó un comportamiento similar al obtenido en el espectro. En particular, se observaron picos de conductancia a voltaje cero para energías en el QD cercanas a los cruces que aparecen en el espectro. Para obtener más información de la respuesta a voltaje cero, se examinó también el comportamiento de la conductancia y las contribuciones de la reflexión de Andreev en función del voltaje, para aquellas energías en el QD en donde se observaron previamente los cruces. Un resultado importante al respecto mostró que si la hibridización con el QD es pequeña, los estados del QD acoplado respetan la estructura de spin de los modos topológicos. Bajo esas circunstancias, los cruces a energía cero contienen información importante de la estructura de los modos de Majorana y su grado de localización.

Sin embargo, al aumentar la hibridización con el QD, el comportamiento del espectro de baja energía obtenido de la diagonalización exacta se aparta respecto de la versión más simple del Hamiltoniano efectivo, basada en la hibridización del QD con la combinación de los modos de Majorana. Las posiciones de los cruces a energía cero se ven particularmente afectadas así como la dependencia de los estados de baja energía con respecto a la energía del QD, ε_d . Conforme se aumentó la hibridización, esos corrimientos se hicieron cada vez mayores. Recién al incluir en el Hamiltoniano efectivo a los términos de supra-gap, se obtuvo un comportamiento que reproducía los resultados alcanzados con la diagonalización exacta. La conductancia calculada en este caso también posee un comportamiento cualitativamente similar al espectro, pudiéndose observar una mayor conductancia para uno de los niveles polarizados del QD.

En ambos límites mencionados anteriormente para la fase topológica (hibridización pequeña y grande), se estudió el factor de Fano y la densidad de estados del QD acoplado a todo el sistema. Para el acoplamiento débil, el Fano toma valores consistentes con respecto a lo observado en la conductancia para cada nivel polarizado. En el caso de acoplamiento fuerte entre el QD y el cable, el Fano posee una respuesta mucho más irregular enmascarada por los estados de supra-gap.

A continuación se presentaron los resultados para la fase no-topológica. Se observó que en este régimen, el origen de los cruces a energía cero es similar al de aquellos generados por impurezas magnéticas en superconductores (estados de Yu-Shiba-Rusinov). Asimismo, a diferencia del caso topológico, el espectro y la conductancia se comportan de manera simétrica para las componentes positivas y negativas de la energía del dot. Esto refleja que los pesos en las componentes \uparrow y \downarrow de spin son similares, a diferencia del

caso topológico en donde las excitaciones de baja energía resultan de la combinación de modos de Majorana definidos por operadores fermiónicos polarizados a lo largo de una dirección con una pequeña inclinación θ_M con respecto al campo magnético. Por otro lado, al aumentar la hibridización entre el QD y el cable, los cruces en el espectro requieren de campos magnéticos más grandes. Al igual que para el caso topológico, las propiedades del espectro fueron contrastadas con lo obtenido de las propiedades de transporte. Allí se detectaron conductancias muy bajas para el caso a voltaje cero, obteniendo de esta manera, un Fano claramente diferente respecto del caso topológico.

En segundo lugar, se realizó un análisis análogo pero para el caso en el que el vector spin-órbita y el campo magnético no son perpendiculares. En particular, se analizó el comportamiento de las propiedades de transporte para el caso en el que el ángulo se encontraba apenas por encima del valor crítico de manera tal de que el cable se encuentra en la fase no-topológica. Si bien a primera vista se pueden identificar rasgos similares con el caso perpendicular, un análisis más detallado demuestra una fuerte asimetría en el transporte a través de los dos niveles de Zeeman. Esto se observó claramente en el comportamiento de la conductancia como función del voltaje para una energía del QD, ε_d fijada en uno de los valores para los cuales se observaron los cruces. Esto se debe a que el cable superconductor se encuentra gappedo y las cuasi-partículas están fuertemente polarizadas.

Finalmente, si bien resulta difícil identificar rasgos que distingan de manera inequívoca las dos fases para el caso no-perpendicular, los resultados presentados remarcan la importancia del grado de acoplamiento entre el QD y el cable. En particular, los mismos pueden servir de guía en el diseño de futuros experimentos.

Acoplamiento Spin-Órbita de Rashba

El acoplamiento spin-órbita vincula la velocidad de una partícula con su spin. Dicho efecto se encuentra presente en numerosos fenómenos de la materia, incluidos los aislantes topológicos y los fermiones de Majorana. En la física del estado sólido, el acoplamiento spin-órbita tiene su origen en el movimiento de los electrones en presencia del campo eléctrico intrínseco del cristal. En el campo de los sistemas atómicos ultrafríos, es posible manipular parámetros del material de manera tal de que el acoplamiento spin-órbita puede utilizarse a demanda de los láseres intervinientes en los experimentos.

La utilidad práctica de los materiales se encuentra determinada no sólo por su comportamiento funcional intrínseco, sino también por la escala de energía y/o temperatura que presenta. En ese sentido, el acoplamiento spin-órbita (SOC por sus siglas en inglés) resulta vital al influir en la primera.

Su nombre proviene de su presencia en la física atómica tradicional. El campo eléctrico producido por el núcleo cargado da lugar a un campo magnético en el sistema de referencia desde donde se mida la órbita del electrón. Todo esto ocasiona, a menos de una constante, un separación (*splitting*) en la estructura fina atómica que puede observarse en una energía de Zeeman efectiva dependiente del momento. Cuando se estudia en el contexto de la física de materiales, la conexión entre el SOC y esta energía de Zeeman dependiente del momento resulta mucho más clara. Las ecuaciones de Maxwell con invariancia de Lorentz dictan que un campo eléctrico estático $E = E_0 \hat{z}$ en el sistema laboratorio (en donde se está asumiendo que $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ son los vectores unitarios cartesianos) da lugar a un campo magnético de spin-órbita de la forma

$$B_{SO} = \frac{E_0 \hbar}{mc^2} \hat{z} \times (k_x \hat{y} - k_y \hat{x}), \quad (\text{A.1})$$

en el sistema en el cual el objeto (un electrón, por ejemplo) se está moviendo con un momento $\hbar k$, donde c es la velocidad de la luz en el vacío y m la masa de la partícula. El término de interacción del Zeeman dependiente del momento que surge a partir de esto será

$$-\mu B \simeq \sigma_x k_y - \sigma_y k_x, \quad (\text{A.2})$$

y se conoce como acoplamiento de spin-órbita de Rashba [131]. Esto se puede observar en heteroestructuras bidimensionales con semiconductores en los que se incorpora un

campo eléctrico, como se observa en las Figuras A.1(a) y (b). Asimismo, en la Figura A.1(c) (similar a la Figura 3.5(b)) se puede observar una relación de dispersión típica para un sistema con un SOC. Allí los mínimos para cada uno de los estados de spin (en rojo y azul) se encuentran desplazados del cero. Para el SOC de Rashba esta dispersión resulta simétrica respecto del eje vertical, denotando la posibilidad de movimiento en cualquier dirección en el plano $\hat{x} - \hat{y}$. Debido a esta interacción de Zeeman dependiente del momento, la alineación de equilibrio del momento magnético de la partícula depende de la velocidad de la misma. En el lenguaje de la mecánica cuántica, esto implica que los autoestados son superposiciones dependientes del momento de los estados de spin iniciales $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$.

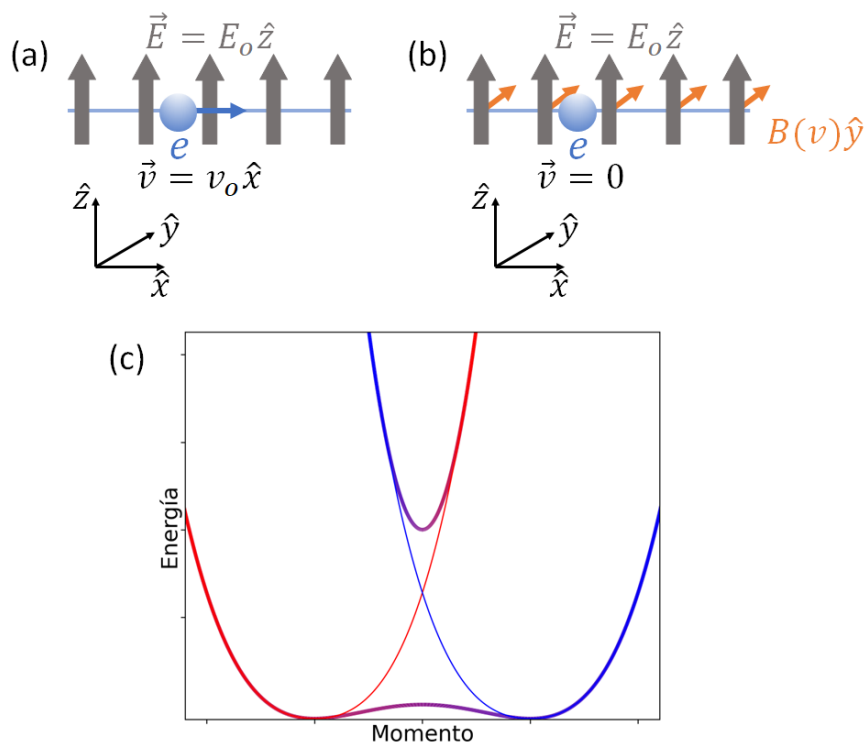


Figura A.1: Origen físico del SOC en sistemas convencionales. (a) Caso en el sistema de referencia del laboratorio. El sistema efectivo consiste en un electrón confinado en el plano xy (en este caso moviéndose sobre el eje x) en presencia de un campo eléctrico en \hat{z} . (b) Caso en el sistema de referencia del electrón. Allí, la transformación de Lorentz del campo eléctrico genera un campo magnético en la dirección \hat{y} (generando una separación Zeeman) que depende linealmente de la velocidad del electrón (en el sistema laboratorio). (c) Dispersión resultante de un acoplamiento spin-órbita de Rashba. Para dicho sistemas, el SOC es lineal y la relación de dispersión de partícula libre $mv^2/2 = p^2/2m$ se encuentra alterada por una dependencia de spin. En este caso, el SOC de Rashba cambia la relación de dispersión del caso de partícula libre para cada estado de spin (curva roja y azul). El cruce de ambas curvas puede abrirse con la aplicación de un campo magnético (curva suavemente sombreada).

Cadena de Dos Sitios

La red finita más simple posee sólo dos sitios como se puede ver en la Figura B.1(a)¹. En el presente modelo, cada átomo posee un orbital del tipo s y una energía ϵ_0 , como se puede observar en la Figura B.1(b). La proximidad entre ambos átomos da lugar a una hibridización entre los orbitales individuales representada por el parámetro t . Este sistema acoplado posee dos soluciones que corresponden a los dos orbitales moleculares con simetría par e impar respecto de la inversión espacial². Los estados asociados a estas soluciones poseen energías $\epsilon_0 \mp t$

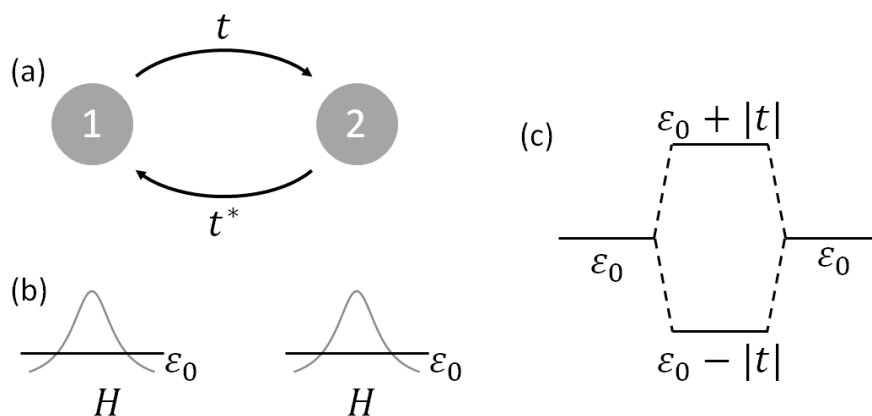


Figura B.1: (a) Cadena finita con 2 sitios y hoppings t y t^* . (b) En Química, se puede usar este sistemas como un prototipo en el cual cada sitio es un núcleo de hidrógeno con energía ϵ_0 . (c) Diagrama de los niveles de energía en los que se puede ver la formación de 2 orbitales moleculares. La presencia de una hibridización genera un *ground-state* conocido como *bonding state*. Figura reproducida a partir de tomada de [132]

¹Dicho sistema posee una relevancia fundamental en la química cuántica dado que representa el prototipo del acoplamiento molecular de dos núcleos de hidrógeno

²Por simplicidad, se descartarán las posible contribuciones de spin-órbita en el Hamiltoniano. En este problema los grados de libertad espacial están desacoplados del spin, ya que ni la energía cinética ni el potencial local se acoplan al spin de las partículas.

El hamiltoniano del sistema será

$$H = h_0 + V = \epsilon_0(n_1 + n_2) + tc_2^\dagger c_1 + t^* c_1^\dagger c_2 \quad (\text{B.1})$$

Este hamiltoniano se puede expresar matricialmente de la siguiente manera

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & 0 \\ 0 & \epsilon_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & t^* \\ t & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & t^* \\ t & \epsilon_0 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Al diagonalizar,

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 & t^* \\ t & \epsilon_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_0 - t & 0 \\ 0 & \epsilon_0 + t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

es fácil ver que las energías serán $\epsilon_0 \mp |t|$.

Ahora bien, lo que se quiere es hallar la expresión para $G_{11}^r(t, t') - i\Theta(t - t') < \{c_1(t), c_1^\dagger(t')\} >$, es decir, la función de Green local para el primer sitio. Se sabe que la misma estará acoplada (a través de la ecuación de movimiento) con la función de Green no-local $G_{21}^r(t, t') = -i\Theta(t - t') < \{c_2(t), c_1^\dagger(t')\} >$ de la siguiente manera

$$\begin{cases} (i\partial_t - \epsilon_0)G_{11}^r(t, t') = \delta(t - t') + tG_{21}^r(t, t') \\ (i\partial_t - \epsilon_0)G_{21}^r(t, t') = +t^*G_{11}^r(t, t') \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Tomando la transformada de Fourier,

$$\begin{cases} (\omega - \epsilon_0 + i\eta)G_{11}^r(\omega) = 1 + tG_{21}^r(\omega) \\ (\omega - \epsilon_0 + i\eta)G_{21}^r(\omega) = t^*G_{11}^r(\omega) \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

A continuación, se define para $t = 0$ la función de Green libre (*undressed*)

$$g^r(\omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_0 + i\eta} = g_1^r(\omega) = g_2^r(\omega). \quad (\text{B.6})$$

Reemplazando esta expresión en el sistema de Ecuaciones (B.5),

$$\begin{cases} G_{11}^r(\omega) = g^r(\omega) + g^r(\omega)tG_{21}^r(\omega) \\ G_{21}^r(\omega) = g^r(\omega)t^*G_{11}^r(\omega) \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

Esta expresión puede ser generalizada y escribirse de manera matricial

$$\hat{G}^r = \hat{g}^r + \hat{g}^r \hat{V} \hat{G}^r \quad (\text{B.8})$$

Para resolver el sistema de Ecuaciones (B.5), necesitamos sacarnos de encima la parte no-diagonal. Para eso, reemplazamos la Ecuación para $G_{21}^r(\omega)$ en la de $G_{11}^r(\omega)$ ³

³De acá en adelante dejo de usar el supraíndice r de las expresiones por simplicidad, pero recordar que estamos trabajando con la función de Green retardada.

$$G_{11} = g^r + g^r t g^r t^* G_{11} \quad (\text{B.9})$$

$$G_{11} = \frac{g^r}{1 - |t|^2 (g^r)^2} \quad (\text{B.10})$$

Si reemplazamos la expresión de la función de Green *undressed*, Ecuación (??),

$$G_{11} = \frac{1}{\omega - \epsilon_0 + i\eta - |t|^2 g^r} \quad (\text{B.11})$$

Es importante detenernos en esta última expresión para remarcar algunos detalles que se pueden extraer de la misma. En primer lugar, tengamos en cuenta que el último término del denominador posee una parte imaginaria y una parte real. Esto es lo que influye en el corrimiento en la posición de la resonancia y en el ensanchamiento del pico (a la hora de calcular la densidad de estados). Por otro lado, re-escribiendo la Ecuación (B.11)

$$G_{11} = \frac{1/2}{\omega - (\epsilon_0 - |t|) + i\eta} + \frac{1/2}{\omega - (\epsilon_0 + |t|) + i\eta} \quad (\text{B.12})$$

se puede obtener una expresión en la que se pueden ver claramente las autoenergías para este caso. Como ya sabemos (REFERENCIA), los polos de la función de Green no-interactuante se corresponden con los valores de las autoenergías y su parte imaginaria, permite obtener la **densidad de estados** para la configuración, dado que

$$\rho_i = -\frac{1}{\pi} \text{Im}\{G_{ii}\} \quad (\text{B.13})$$

Funciones de Green de tiempo imaginario (Matsubara)

Muchos observables físicos pueden ser descriptos o derivarse a partir de las funciones de Green. Las funciones de Green de tiempo imaginario, también llamadas funciones de Green de Matsubara, se definen de la siguiente manera

$$\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') \equiv \langle T_\tau(A(\tau)B(\tau')) \rangle \quad (\text{C.1})$$

donde T_τ es el símbolo para el tiempo ordenado, el cual se define como

$$T_\tau(A(\tau)B(\tau')) = \theta(\tau - \tau')A(\tau)B(\tau') \pm \theta(\tau' - \tau)B(\tau')A(\tau). \quad (\text{C.2})$$

El $+$ corresponderá al caso bosónico y el $-$ al caso fermiónico.

La pregunta inmediata será cuáles seran los valores posibles de τ . A partir de la Ecuación (C.1) hay tres cosas claras: en primer lugar, $\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') = \mathcal{C}_{AB}(\tau - \tau')$. Esto es un resultado de la propiedad cíclica de la traza. Para $\tau > \tau'$

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') &= \frac{-1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} e^{\tau H} A e^{-\tau H} e^{\tau' H} B e^{-\tau' H} \right\} \\ &= \frac{-1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} e^{-\tau' H} e^{\tau H} A e^{-\tau H} e^{\tau' H} B \right\} \\ &= \frac{-1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} e^{(\tau - \tau') H} A e^{-(\tau - \tau') H} B \right\} \\ &= \mathcal{C}_{AB}(\tau - \tau') \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Es fácil ver que la cuenta se puede hacer, de manera análoga, para $\tau' > \tau$. En segundo lugar, la convergencia de $\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau')$ está garantizada si $-\beta < \tau - \tau' < \beta$. Para $\tau > \tau'$ el caso $\tau - \tau' < \beta$ es fácil ver si se usa la representación de Lehmann [41] para obtener el factor $e^{-(\beta - \tau + \tau')E_n}$. En tercer lugar, se tiene la propiedad

$$\mathcal{C}_{AB}(\tau) = \pm \mathcal{C}_{AB}(\tau + \beta), \quad \text{para } \tau < 0, \quad (\text{C.4})$$

que se desprende, nuevamente, de la propiedad cíclica de la traza.

La función de Green de Matsubara transformada al espacio de frecuencias, posee la característica de ser la misma función analítica que las funciones de Green reales conocidas. En otras palabras, usando la representación de Lehmann es posible hallar una función en el plano complejo no enteramente real, que gracias a la continuación analítica permite obtener la función de Green retardada. Los detalles de dichas demostraciones se pueden encontrar en [41].

*La vida es un vino amargo,
dulce en jarra compartida.*
Volver en vino. Horacio Guarany

Agradecimientos

Hay un montón de gente a la que le quiero agradecer por haberme ayudado y acompañado en estos años. Posiblemente me olvide de algunos y algunas, así que comienzo pidiéndoles disculpas a quienes no estén entre estas líneas.

Primero que nada, quiero agradecerle a Lili. Estos años trabajando junto a ella me permitieron aprender un montón en lo profesional y en lo personal. Quiero agradecerle también a los colegas con quienes tuve el privilegio de colaborar: Armando, Alberto, Miguel y Alfredo. Es un honor haber compartido esta parte de mi formación con ellos. A Pablo y Daniel, mis compañeros de grupo (y amigos), también les debo un montón. Dos personajes hermosos de los que aprendí muchísimo y que sin duda además, ayudaron para que hoy esté acá.

Al Estado Argentino que a través de su compromiso con el desarrollo de la Ciencia y Tecnología, financió mi formación.

A mis amigos del club, a los que quiero muchísimo y que sin dudas son uno de los pilares en mi vida: Juli, Lucho, Terra, Tomi, Tato, Pola y Ale. A Mauro y Rodrigo, que si bien los veo poco, adoro un montón y siempre van a tener un lugar en mi corazón.

A mis amigos de la facultad: Mono, Marito, Villalba, Franco, Matías. Todos ellos han sido importantes en estos años y no quiero dejar de agradecerles por todo.

A mi vieja que con todo lo que me enseñó, también colaboró para que hoy esté acá. A Ulises, que también contribuyó en ese proceso de (no-)aprendizaje. Al tío Luis, siempre.

A los RH+, tres personajes espectaculares a los que quiero mucho y espero poder retribuirles todo el amor que me han dado en estos años.

Finalmente, a Yamila; la persona más importante que tengo en la vida y sin quien nada de esto podría ser posible. Su amor, su acompañamiento y su ayuda han sido, son y serán otro de los pilares en mi vida.

Bibliografía

- [1] J. B. y W. H. Brattain, “The transistor, a semi-conductor triode,” *Phys. Rev.*, vol. 74, no. 230, 1948.
- [2] P. C. Lauterbur, “Image formation by induced local interactions: Examples employing nuclear magnetic resonance,” *Nature*, vol. 242, pp. 190–191, 1973.
- [3] N. Zheludev, “The life and times of the led — a 100-year history,” *Nature Photonics*, vol. 1, pp. 189–192, 2007.
- [4] A. A. y B. Simons, “Condensed matter field theory,” *Cambridge University Press*, vol. 2nd ed., pp. 189–192, 2010.
- [5] L. D. Landau, “On the theory of phase transitions. I,” *Phys. Z. Sowjet.*, vol. 11, 1937.
- [6] L. D. L. y E. Lifshitz, “Statistical physics,” *Elsevier*, vol. 3rd ed., 1980.
- [7] P. Dirac, “Quantised singularities in the electromagnetic field,” *Proc. Roy. Soc. of London*, vol. A, no. 117, 1931.
- [8] M. P. K. v. Klitzing, G. Dorda, “New method for high accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance,” *Phys. Rev. Lett.* 45 (1980), pp. 494–497, 1980.
- [9] H. L. S. y A. C. G. D. C. Tsui, “Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit,” *Phys. Rev. Lett.* 48, no. 1559, 1982.
- [10] R. B. Laughlin, “Quantized hall conductivity in two dimensions,” *Phys. Rev. B* 23 (1981), p. 5632–5633, 1980.
- [11] D. Thouless, M. Kohmoto, M. Nightingale, and M. den Nijs, “Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential,” *Phys. Rev. B*, vol. 23, p. 5632–5633, 1981.
- [12] Q. Niu, D. Thouless, and Y. Wu, “Quantized hall conductance as a topological invariant,” *Phys. Rev. B*, vol. 23, 1985.

- [13] M. Kohmoto, “Topological invariant and the quantization of the hall conductance,” *Annals of Physics*, vol. 160, pp. 343–354, 1985.
- [14] X. Wen, “Topological orders in rigid states,” *International Journal of Modern Physics B*, vol. 04, no. 02, pp. 239–271, 1990.
- [15] B. Halperin, “Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential,” *Phys. Rev. Lett*, vol. 25, no. 2185, 1982.
- [16] F. Haldane, “Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the ”parity anomaly”,” *Phys. Rev. Lett*, vol. 61, 1988.
- [17] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger, “Experimental realisation of the topological Haldane model,” *Nature*, vol. 515, pp. 237–240, 2014.
- [18] C. Kane and E. Mele, “ Z_2 topological order and the Quantum Spin Hall Effect,” *Phys Rev Lett*, vol. 95, no. 146802, 2005.
- [19] C. Kane and E. Mele, “Quantum Spin Hall Effect in graphene,” *Phys Rev Lett*, vol. 95, no. 226801, 2005.
- [20] B. Bernevig, T. Hughes, and S. Zhang, “Quantum Spin Hall Effect and topological phase transition in HgTe quantum wells,” *Science*, vol. 314, no. 5806, pp. 1757–1761, 2006.
- [21] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. Molenkamp, X. Qi, and S. Zhang, “Quantum Spin Hall insulator state in HgTe quantum wells,” *Science*, vol. 318, no. 5851, pp. 766–770, 2007.
- [22] L. Fu, C. Kane, and E. Mele, “Topological insulators in three dimensions,” *Phys Rev Lett*, vol. 98, no. 106803, 2007.
- [23] J. Moore and L. Balents, “Topological invariants of time-reversal-invariant band structures,” *Phys Rev B*, vol. 75, no. 121306, 2007.
- [24] R. Roy, “Topological phases and the quantum spin hall effect in three dimensions,” *Phys Rev B*, vol. 79, no. 195322, 2009.
- [25] A. Y. Kitaev, “Unpaired Majorana fermions in quantum wires,” *Physics-Uspekhi*, vol. 44, no. 10S, p. 131, 2001.
- [26] C. Nayak, S. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Sarma, “Non-Abelian anyons and topological quantum computation,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 80, no. 3, p. 1083, 2008.
- [27] J. Alicea, “New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems,” *Prog. Phys.*, vol. 75, no. 7, p. 076501, 2012.
- [28] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. Plissard, E. P. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, “Signatures of Majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices,” *Science*, vol. 336, no. 6084, pp. 1003–1007, 2012.

- [29] M. Deng, C. Yu, G. Huang, P. Larsson, M. Caroff, and H. Xu, “Anomalous zero-bias conductance peak in a Nb–InSb nanowire–Nb hybrid device,” *Nano Lett*, vol. 12, no. 12, pp. 6414–6419, 2012.
- [30] A. Das, Y. Ronen, Y. Most, Y. Oreg, M. Heiblum, and H. Shtrikman, “Evidence of Majorana fermions in an Al - InAs nanowire topological superconductor,” *Nature Physics*, vol. 8, pp. 887–895, 2012.
- [31] A. Altland and M. Zirnbauer, “Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures,” *Phys. Rev B*, vol. 55, no. 1142, 1997.
- [32] A. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. Ludwig, “Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential,” *Phys. Rev. B*, vol. 78, no. 195125, 2008.
- [33] A. Kitaev, “Periodic table for topological insulators and superconductors,” *AIP Conf. Proc.*, vol. 1134, p. 22, 2009.
- [34] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. Ludwig, “Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy,” *New Journal of Physics*, vol. 12, no. 6, p. 065010, 2010.
- [35] M. Z. H. y C. L. Kane, “Colloquium: Topological insulators,” *Rev. Mod. Phys*, vol. 82, no. 3045, 2010.
- [36] A. Akhmerov, J. Sau, B. van Heck, R. Skolasinski, and S. Rubbert, “Topology in condensed matter: Tying quantum knots,” 2015.
- [37] T. Stanescu, “Topological quantum matter and quantum computation,” *CRC Press*, vol. 1st ed., 2017.
- [38] B. Bernevig and T. Hughes, “Topological insulators and topological superconductors,” 2013.
- [39] J. Sakurai and J. Napolitano, “Modern quantum mechanics,” 2011.
- [40] A. F. A. P. Schnyder, S. Ryu and A. W. W. Ludwig, “Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions,” *Physical Review B*, vol. 78, no. 78, p. 195125, 2008.
- [41] H. B. y K. Flensberg, “Many-body quantum theory in condensed matter physics,” *Oxford Graduate Texts*, vol. 2nd ed., pp. 157–165, 2004.
- [42] A. Y. Kitaev, “Fault-tolerant quantum computation by anyons,” *Annals of Physics*, vol. 303, no. 1, pp. 2–30, 2003.
- [43] P. Meijer, “Kamerlingh Onnes and the discovery of superconductivity,” *American Journal of Physical*, vol. 62, no. 12, pp. 1105–1108, 1994.
- [44] V. Guinzburg and L. Landau, “On the Theory of Superconductivity,” *Zh. Eksp Teor Fiz*, vol. 20, pp. 1064–1085, 1950.
- [45] L. Bardeen, L. Cooper, and J. Schrieffer, “Theory of Superconductivity,” *Phys. Rev*, vol. 108:1175, 1957.

- [46] L. Bardeen, L. Cooper, and J. Schrieffer, “Microscopic Theory of Superconductivity,” *Phys. Rev.*, vol. 106:162, 1957.
- [47] J. Schrieffer, “Theory of Superconductivity,” 1999.
- [48] C. Timm, “Theory of Superconductivity,” <https://tu-dresden.de/mn/physik/itp/cmt/ressourcen/dateien/skripte/Skriptsupra.pdf?lang=en>, 2023.
- [49] P. Dirac, “The quantum theory of the electron,” *Proc. Roy. Soc. of London*, vol. 117, no. 778, 1928.
- [50] A. Eddington, “A symmetrical treatment of the wave equation,” *Proc. Roy. Soc. of London*, vol. 121, no. 778, 1928.
- [51] E. Majorana, “Teoria simmetrica dell’elettrone e del positrone,” *Il Nuovo Cimento*, no. 14, pp. 171–184, 1937.
- [52] T. Senthil and M. Fisher, “Quasiparticle localization in superconductors with spin-orbit scattering,” *Phys rev B*, vol. 61, no. 9690, 2000.
- [53] C. Chamon, R. Jackiw, Y. Nishida, S. Pi, and L. Santos, “Quantizing Majorana fermions in a superconductor,” *Phys rev B*, vol. 81, no. 224515, 2010.
- [54] S. Elliot and M. Franz, “Colloquium: Majorana fermions in nuclear, particle, and solid-state physics,” *Rev Mod Phys*, vol. 87, no. 137, 2015.
- [55] C. Caroli, P. De Gennes, and J. Matricon, “Bound fermion states on a vortex line in a type II superconductor,” *Phys Lett*, vol. 9, no. 4, pp. 307–309, 1964.
- [56] N. Read and D. Green, “Paired states of fermions in two dimensions with breaking of parity and time-reversal symmetries and the fractional quantum Hall effect,” *Phys Rev B*, vol. 61, no. 10267, 2000.
- [57] C. Fu, L Kane, “Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator,” *Physical review Lett*, vol. 100, p. 096407, 2008.
- [58] C. Fu, L Kane, “Josephson current and noise at a superconductor/quantum-spin-hall-insulator/superconductor junction,” *Physical review B*, vol. 79, no. 9, p. 161408, 2009.
- [59] T. Choy, J. Edge, A. Akhmerov, and C. Beenakker, “Majorana fermions emerging from magnetic nanoparticles on a superconductor without spin-orbit coupling,” *Phys. Rev B*, vol. 84, no. 195442, 2011.
- [60] S. Nadj-Perge, B. Drozdov, A. Bernevig, and A. Yazdani, “Proposal for realizing Majorana fermions in chains of magnetic atoms on a superconductor,” *Phys. Rev B*, vol. 88, no. 020407, 2013.
- [61] S. Nadj-Perge, B. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. MacDonald, A. Bernevig, and A. Yazdani, “Observation of Majorana fermions in ferromagnetic atomic chains on a superconductor,” *Science*, vol. 346, no. 6209, 2014.

- [62] F. Pientka, L. Glazman, and F. von Oppen, “Unconventional topological phase transitions in helical shiba chains,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, no. 180505, 2014.
- [63] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. D. Sarma, “Majorana fermions and a topological phase transition in semiconductor-superconductor heterostructures,” *Physical review letters*, vol. 105, no. 7, p. 077001, 2010.
- [64] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, “Helical liquids and Majorana bound states in quantum wires,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 177002, Oct 2010.
- [65] X.-L. Qi, T. L. Hughes, S. Raghu, and S.-C. Zhang, “Time-reversal-invariant topological superconductors and superfluids in two and three dimensions,” *Physical review letters*, vol. 102, no. 18, p. 187001, 2009.
- [66] L. Fu and E. Berg, “Odd-parity topological superconductors: theory and application to $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$,” *Physical review letters*, vol. 105, no. 9, p. 097001, 2010.
- [67] L. Santos, T. Neupert, C. Chamon, and C. Mudry, “Superconductivity on the surface of topological insulators and in two-dimensional noncentrosymmetric materials,” *Physical Review B*, vol. 81, no. 18, p. 184502, 2010.
- [68] C. L. Wong and K. T. Law, “Majorana kramers doublets in $d \times 2 - y 2$ -wave superconductors with rashba spin-orbit coupling,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 18, p. 184516, 2012.
- [69] E. Dumitrescu and S. Tewari, “Topological properties of the time-reversal-symmetric kitaev chain and applications to organic superconductors,” *Physical Review B*, vol. 88, no. 22, p. 220505, 2013.
- [70] F. Zhang, C. Kane, and E. Mele, “Time-reversal-invariant topological superconductivity and Majorana Kramers pairs,” *Physical review letters*, vol. 111, no. 5, p. 056402, 2013.
- [71] A. Keselman, L. Fu, A. Stern, and E. Berg, “Inducing time-reversal-invariant topological superconductivity and fermion parity pumping in quantum wires,” *Physical review letters*, vol. 111, no. 11, p. 116402, 2013.
- [72] A. Haim, A. Keselman, E. Berg, and Y. Oreg, “Time-reversal-invariant topological superconductivity induced by repulsive interactions in quantum wires,” *Physical Review B*, vol. 89, no. 22, p. 220504, 2014.
- [73] A. Haim and Y. Oreg, “Time-reversal-invariant topological superconductivity in one and two dimensions,” *Physics Reports*, vol. 825, pp. 1–48, 2019.
- [74] C. Reeg, C. Schrade, J. Klinovaja, and D. Loss, “Diii topological superconductivity with emergent time-reversal symmetry,” *Physical Review B*, vol. 96, no. 16, p. 161407, 2017.
- [75] C. Schrade, A. Zyuzin, J. Klinovaja, and D. Loss, “Proximity-induced π josephson junctions in topological insulators and kramers pairs of majorana fermions,” *Physical review letters*, vol. 115, no. 23, p. 237001, 2015.

- [76] S. Nakosai, J. C. Budich, Y. Tanaka, B. Trauzettel, and N. Nagaosa, “Majorana bound states and nonlocal spin correlations in a quantum wire on an unconventional superconductor,” *Physical review letters*, vol. 110, no. 11, p. 117002, 2013.
- [77] S. Deng, L. Viola, and G. Ortiz, “Majorana modes in time-reversal invariant s-wave topological superconductors,” *Physical review letters*, vol. 108, no. 3, p. 036803, 2012.
- [78] S. B. Chung, J. Horowitz, and X.-L. Qi, “Time-reversal anomaly and josephson effect in time-reversal-invariant topological superconductors,” *Physical Review B*, vol. 88, no. 21, p. 214514, 2013.
- [79] J. Klinovaja, A. Yacoby, and D. Loss, “Kramers pairs of majorana fermions and parafermions in fractional topological insulators,” *Physical Review B*, vol. 90, no. 15, p. 155447, 2014.
- [80] J. Li, W. Pan, B. A. Bernevig, and R. M. Lutchyn, “Detection of majorana kramers pairs using a quantum point contact,” *Physical review letters*, vol. 117, no. 4, p. 046804, 2016.
- [81] A. Camjayi, L. Arrachea, A. Aligia, and F. Von Oppen, “Fractional spin and Josephson effect in time-reversal-invariant topological superconductors,” *Physical review letters*, vol. 119, no. 4, p. 046801, 2017.
- [82] A. A. Aligia and L. Arrachea, “Entangled end states with fractionalized spin projection in a time-reversal-invariant topological superconducting wire,” *Physical Review B*, vol. 98, no. 17, p. 174507, 2018.
- [83] C. Schrade and L. Fu, “Parity-controlled 2π josephson effect mediated by majorana kramers pairs,” *Physical review letters*, vol. 120, no. 26, p. 267002, 2018.
- [84] X. Qi, T. Hughes, and S. Zhang, “Topological invariants for the Fermi surface of a time-reversal-invariant superconductor,” *Physical Review B*, vol. 81, no. 134508, 2010.
- [85] A. Andreev, “Thermal conductivity of the intermediate state of superconductors,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, p. 1823, 1964.
- [86] Y. Lai, J. Sau, and S. Das Sarma, “Presence versus absence of end-to-end nonlocal conductance correlations in Majorana nanowires: Majorana bound states versus Andreev bound states,” *Phys. Rev B*, vol. 100, p. 045302, 2019.
- [87] H. Pan and S. Das Sarma, “Physical mechanisms for zero-bias conductance peaks in Majorana nanowires,” *Phys. Rev Res*, vol. 2, p. 013377, 2020.
- [88] H. Pan and S. D. Sarma, “Physical mechanisms for zero-bias conductance peaks in Majorana nanowires,” *Physical Review Research*, vol. 2, no. 1, p. 013377, 2020.
- [89] F. Nichele, A. C. Drachmann, A. M. Whiticar, E. C. O’Farrell, H. J. Suominen, A. Fornieri, T. Wang, G. C. Gardner, C. Thomas, A. T. Hatke, *et al.*, “Scaling of Majorana zero-bias conductance peaks,” *Physical review letters*, vol. 119, no. 13, p. 136803, 2017.

- [90] S. Rex and A. Sudbø, “Tilting of the magnetic field in Majorana nanowires: Critical angle and zero-energy differential conductance,” *Physical Review B*, vol. 90, no. 11, p. 115429, 2014.
- [91] Z. Wang, H. Song, D. Pan, Z. Zhang, W. Miao, R. Li, Z. Cao, G. Zhang, L. Liu, L. Wen, *et al.*, “Observation of plateau regions for zero bias peaks within 5% of the quantized conductance value $2e^2/h$,” *arXiv preprint arXiv:2205.06736*, 2022.
- [92] Y.-H. Lai, S. D. Sarma, and J. D. Sau, “Quality factor for zero-bias conductance peaks in Majorana nanowire,” *arXiv preprint arXiv:2111.01178*, 2021.
- [93] C.-X. Liu, J. D. Sau, T. D. Stanescu, and S. D. Sarma, “Andreev bound states versus Majorana bound states in quantum dot-nanowire-superconductor hybrid structures: Trivial versus topological zero-bias conductance peaks,” *Physical Review B*, vol. 96, no. 7, p. 075161, 2017.
- [94] J. Chen, P. Yu, J. Stenger, M. Hocevar, D. Car, S. R. Plissard, E. P. Bakkers, T. D. Stanescu, and S. M. Frolov, “Experimental phase diagram of zero-bias conductance peaks in superconductor/semiconductor nanowire devices,” *Science advances*, vol. 3, no. 9, p. e1701476, 2017.
- [95] M. Deng, S. Vaitiekėnas, E. B. Hansen, J. Danon, M. Leijnse, K. Flensberg, J. Nygård, P. Krogstrup, and C. M. Marcus, “Majorana bound state in a coupled quantum-dot hybrid-nanowire system,” *Science*, vol. 354, no. 6319, pp. 1557–1562, 2016.
- [96] L. Glazman and M. Pustilnik, “Lectures notes of the Les Houches Summer School 2004,” *arXiv:cond-mat/0501007*, 2005.
- [97] M. Grobis, I. Rau, R. Potok, and D. Goldhaber-Gordon, “Kondo Effect in mesoscopic quantum dots,” *arXiv:cond-mat/0611480*, 2006.
- [98] J. Kondo, “Resistance minimum in dilute magnetic alloys,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 32, pp. 37–49, 1964.
- [99] P. Anderson, “Localized magnetic states in metals,” *Phys. Rev.*, vol. 124, no. 41, 1961.
- [100] L. Glazman and M. Raikh, “Resonant Kondo transparency of a barrier with quasilocal impurity states,” *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, vol. 74, p. 452, 1988.
- [101] A. Zazunov, R. Egger, and A. L. Yeyati, “Low-energy theory of transport in Majorana wire junctions,” *Physical Review B*, vol. 94, no. 1, p. 014502, 2016.
- [102] E. Vecino, A. Martin-Rodero, and A. Levy Yeyati, “Josephson current through a correlated quantum level: Andreev states and π junction behavior,” *Phys. Rev. B*, vol. 68, p. 035105, 2003.
- [103] A. Zazunov, R. Egger, M. Alvarado, and A. L. Yeyati, “Josephson effect in multi-terminal topological junctions,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 024516, Jul 2017.

- [104] F. S. y R. Egger, “Josephson current through a nanoscale magnetic quantum dot,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 93, p. 047002, 2004.
- [105] M. Chi, M. Lee, and W. Kang, K and Belzig, “Kondo effect and Josephson current through a quantum dot between two superconductors,” *Phys. Rev. B*, vol. 70, p. 020502(R), 2004.
- [106] P. S. y S. F. T. Meng, “Self-consistent description of Andreev bound states in Josephson quantum dot devices,” *Phys. Rev. B*, vol. 79, p. 224521, 2009.
- [107] R. Delagrangé, R. Weil, A. Kasumov, M. Ferrier, H. Bouchiat, and R. Deblock, “ $0-\pi$ quantum transition in a carbon nanotube Josephson junction: Universal phase dependence and orbital degeneracy,” *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 2017.
- [108] J. Maciejko, “An introduction to nonequilibrium many-body theory,” 2007.
- [109] A. Jauho, “Introduction to the Keldysh nonequilibrium Green function technique,” 2006.
- [110] M. Gell-Mann and F. Low, “Bound states in quantum field theory,” *Physical Review Journal Archive*, vol. 84, no. 350, 1951.
- [111] H. Pan and S. Das Sarma, “Many particle physics,” *Third Edition*.
- [112] Y. Aharonov and D. Bohm, “Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory,” *Phys. Rev.*, vol. 15, p. 485, 1959.
- [113] M. López Sancho, J. López Sancho, and J. Rubio, “Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions,” *Journal of Physics F*, vol. 15, pp. 851–858, 1985.
- [114] E. Mellars and B. Béri, “Signatures of time-reversal-invariant topological superconductivity in the Josephson effect,” *Physical Review B*, vol. 94, no. 17, p. 174508, 2016.
- [115] A. Zazunov, R. Egger, T. Jonckheere, and T. Martin, “Anomalous Josephson current through a spin-orbit coupled Quantum Dot,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 103, 2009.
- [116] R. Allub and C. Proetto, “Hybrid quantum dot–superconducting systems: Josephson current and Kondo effect in the narrow-band limit,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 045442, 2015.
- [117] J. Schrieffer and P. Wolff, “Relation between the Anderson model and Kondo Hamiltonians,” *Physical Review Journals Archive*, vol. 149, no. 491, 1966.
- [118] S. Tewari and J. D. Sau, “Topological invariants for spin-orbit coupled superconductor nanowires,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 109, p. 150408, Oct 2012.
- [119] J. C. Budich and E. Ardonne, “Equivalent topological invariants for one-dimensional Majorana wires in symmetry class d ,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 075419, Aug 2013.

- [120] A. A. Aligia, D. P. Daroca, and L. Arrachea, “Tomography of zero-energy end modes in topological superconducting wires,” *Physical Review Letters*, vol. 125, no. 25, p. 256801, 2020.
- [121] D. P. Daroca and A. A. Aligia, “Phase diagram of a model for topological superconducting wires,” *Physical Review B*, vol. 104, no. 11, p. 115125, 2021.
- [122] J. Klinovaja and D. Loss, “Composite Majorana fermion wave functions in nanowires,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 8, p. 085408, 2012.
- [123] Y. Blanter and M. Büttiker, “Shot noise in mesoscopic conductors,” *Physics Report*, vol. 336, pp. 1–166, 2000.
- [124] E. Prada, R. Aguado, and P. San-Jose, “Measuring Majorana nonlocality and spin structure with a quantum dot,” *Physical Review B*, vol. 96, no. 8, p. 085418, 2017.
- [125] A. Schuray, M. Rammler, and P. Recher, “Signatures of the Majorana spin in electrical transport through a Majorana nanowire,” *Physical Review B*, vol. 102, no. 4, p. 045303, 2020.
- [126] L. Yu, “Bound state in superconductors with paramagnetic impurities,” 2005.
- [127] H. Shiba, “Classical spins in superconductors,” *Progress of theoretical Physics*, vol. 40, no. 3, pp. 435–451, 1968.
- [128] A. Rusinov, “Theory of gapless superconductivity in alloys containing paramagnetic impurities,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 29, no. 6, pp. 1101–1106, 1969.
- [129] A. V. Balatsky, I. Vekhter, and J.-X. Zhu, “Impurity-induced states in conventional and unconventional superconductors,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 78, no. 2, p. 373, 2006.
- [130] M.-T. Deng, S. Vaitiekėnas, E. Prada, P. San-Jose, J. Nygård, P. Krogstrup, R. Aguado, and C. M. Marcus, “Nonlocality of majorana modes in hybrid nanowires,” *Phys. Rev. B*, vol. 98, p. 085125, Aug 2018.
- [131] Y. Bychkov and E. Rashba, “Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers,” *J. Phys. Chem.*, vol. 17, pp. 6039–6045, 1984.
- [132] M. Odashima, B. Prado, and E. Vernek, “Pedagogical introduction to equilibrium Green’s function: condensed-matter examples with numerical implementations,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 39, no. 1, p. e1303, 2017.