乘法型马约拉纳零模

Adipta Pal，[1,2] Joe H. Winter，[1,2,3] 和 Ashley M. Cook[1,2]

[1]马克斯·普朗克固体化学物理研究所，*N¨othnitzer Strasse 40，01187* 德累斯顿，德国[2]马克斯·普朗克复杂系统物理研究所，*N¨othnitzer Strasse 38，01187* 德累斯顿，德国[3]*SUPA*，圣安德鲁斯大学物理与天文学学院，*North Haugh*，圣安德鲁斯 *KY16 9SS*，英国

由未配对马约拉纳零模构成的拓扑量子比特，正受到实验和理论领域的密切关注，人们正努力实现实用的量子计算方案。在这项工作中，我们表明，根据编织方案和量子门操作中的纠缠控制，拓扑量子比特所需的最少四个未配对马约拉纳零模，是乘法拓扑相所固有的；这类相实现了未配对马约拉纳零模的受对称性保护的张量积以及最大纠缠贝尔态，这些零模被称为乘性马约拉纳零模。我们将乘性马约拉纳零模引入为一维和二维乘法拓扑相的拓扑保护边界态，并采用依托乘法型拓扑的方法，从基塔耶夫链模型构造相关哈密顿量。此外，我们运用成熟的方法刻画体态和边界上的拓扑，同时引入克服乘法型拓扑刻画难题的技术。在此过程中，我们探讨这些乘法拓扑相能否成为基于编织的拓扑量子计算方案的替代选择；在这种方案中，量子门操作通过拓扑相变实现。

arXiv:2301.02765v1 [quant-ph] 7 Jan 2023

拓扑量子计算方案是拓扑凝聚态研究的核心内容，也被视为其最重要、最具实用价值的应用之一。尤其是，这类方案有望克服可扩展量子计算方案中与退相干相关的挑战[1]。这些方案依赖于实现拓扑量子比特，其由具有非阿贝尔交换统计的准粒子构成；其中最简单、研究最广泛的准粒子是未配对马约拉纳零模（MZM）[2]。过去二十年间，这一研究领域迅速发展，近期许多实验工作报告了与未配对马约拉纳零模相关的迹象[3,4], ，同时也涌现出大量关于实验实现及实际应用的理论方案[5,6]。

为了利用未配对马约拉纳零模构造拓扑量子比特，基于编织的方案至少需要两对 未配对马约拉纳零模[7,8]；而拓扑量子计算所需的一些量子门操作会利用受控纠缠[9]。近期提出的乘法拓扑相（MTP）[10]——即对应于一种对称性保护的张量积结构的物质拓扑相，在这种结构中，多个母拓扑相可以通过乘法方式组合，以实现新颖的拓扑——为优雅地满足这些要求提供了契机。若将两个各自实现未配对马约拉纳零模的母拓扑相以这种方式组合，便可能得到由未配对马约拉纳零模的张量积构成的态。正如介绍 MTP 的研究所示[10], ，还可以在遵守保护体态中乘法拓扑相的对称性的同时，有选择地使拓扑保护边界模纠缠；这有望用于以受控方式引入纠缠，从而实现量子门操作。

基于这些原因，本文引入由具有未配对马约拉纳零模的母体相构建的乘法拓扑相，并提出乘法马约拉纳零模（MMZM）的概念，即一种由两个或更多马约拉纳零模态在张量积态——或最大纠缠态——中组合而成的单一准粒子。我们选择基塔耶夫链模型[11]的典型实例作为母哈密顿量。我们发现，对于所研究的模型，MMZM 在相图的不同区域中实现了多种双量子比特态。这表明，MMZM 有望成为编织方案之外的另一种拓扑量子计算平台：在该平台中，乘法相的每个母体都提供一个量子比特，而实现一个量子比特所需的马约拉纳零模最少数量实际上为两个。

在这项研究中，我们还探讨了乘法型拓扑在量子计算方案之外实现新奇物理的潜力：基塔耶夫链实现一维拓扑相，而由两条母体基塔耶夫链构造的乘法型拓扑相实际上可以是一维或二维的。我们在本研究中采用基塔耶夫链母体相，考察了这两种构造，分别实现一维和二维乘法基塔耶夫链（MKC）构造，并研究了各情形下产生的乘性马约拉纳零模。为刻画由此产生的乘性相，我们研究了 MKC 的万尼尔中心谱，发现其本征值是母体万尼尔中心谱本征值之和。因此，在某些情况下，威尔逊环可能无法刻画乘法型拓扑。不过，我们证明 MKC 可以分解为若干部分，并可利用这些分量的绕数来刻画 MKC 所实现的拓扑相。

我们首先在第 I 节回顾基塔耶夫链及其拓扑分类。在第 II 节，我们介绍一维 MKC，并展示其谱和束缚态。最后，在第 III 节，我们介绍二维 MKC，并描述其谱性质以及体态—边界对应关系。

I 母哈密顿量

为实现类似于乘法拓扑相中未配对马约拉纳零模的拓扑保护态，

我们利用两个母哈密顿量来构造这些态。后者由一种哈密顿量描述，它是许多旨在实现未配对马约拉纳零模和拓扑量子比特的领先实验方案的核心；这种模型称为基塔耶夫链[19,20]。鉴于基塔耶夫链在拓扑量子计算[11,21]中的基础地位，我们的结果与研究乘性相中、与拓扑量子计算相关的准粒子密切相关。我们还表明，实现乘性马约拉纳零模的相具有若干独特特征，这些特征在物质拓扑相的研究中具有相当重要的基础意义，也为拓扑量子计算方案带来希望。

首先，我们回顾基塔耶夫链模型，以及它对拓扑量子计算平台的重要意义。一维基塔耶夫链模型是一种基础的紧束缚模型，用于描述无自旋复费米子在最近邻格点之间跃迁，并包含额外的 $p+ip$ 超导配对[19]。更具体地说，基塔耶夫链（KC）的实空间哈密顿量形式为[11]，

$$\begin{aligned} H_{KC} =& \sum_{j=1}^{N} -\mu c_j^\dagger c_j - t(c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.) \\ &+ \Delta(c_j c_{j+1} + h.c.), \end{aligned} \tag{1}$$

其中，$c_j^\dagger$ 表示在格点 j处产生一个电子，μ 是化学势，t 是最近邻跃迁积分，而 Δ 是超导配对强度。

超导体中的费米子数宇称守恒将希尔伯特空间划分为两个扇区：一个具有偶数基态宇称，另一个具有奇数基态宇称[11]。对于奇数宇称且链满足开放边界条件（OBC）的情况，基态流形是简并的，由强烈局域在链两端的态组成。此外，在基态流形中，还可以构造波函数仅强烈局域在链的一端或另一端的态，这些态具有马约拉纳特征[11]。这两个马约拉纳束缚态构成一个物理费米子，使信息能够以非局域方式编码，从而为量子计算提供稳健的平台。

该模型的单粒子扇区在开放边界条件下，也会在链的两端呈现所需的未配对马约拉纳零模；这一模型版本已得到广泛研究，且与实验相关[22]。这一版本足以用于介绍基于基塔耶夫链的乘法拓扑相，因此本文余下部分将仅讨论这种情况。

我们首先考虑单粒子区域内具有周期性边界条件的无限长链。对哈密顿量进行傅里叶变换，并通过冗余关系施加粒子-空穴对称性（PHS），我们将模型表示为博戈留波夫-德热讷哈密顿量 $H_{BdG}(k)$，

$$H_{KC} = \frac{1}{2}\sum_k \Psi_k^\dagger H_{BdG}(k)\Psi_k, \tag{2}$$

$$H_{BdG}(k) = -(2t\cos k + \mu)\tau^z + 2\Delta \sin k \tau^y. \tag{3}$$

这里，$\Psi_k = (c_k, c_{-k}^\dagger)^T$，其中 c_k 湮灭动量为 k 的无自旋复费米子，体现了显式纳入哈密顿量的粒子-空穴自由度；τ^j 满足 $j \in \{x,y,z\}$，是一个泡利矩阵。

对于超导体的这种有效平均场描述，可将布洛赫哈密顿量对角化，以计算体能谱 $\epsilon_\pm(k) = \pm\sqrt{(2t\cos k + \mu)^2 + 4\Delta^2 \sin^2 k}$。由此可见，当 $|\mu| < 2t$ 且$|\mu| > 2t$时，布洛赫哈密顿量有能隙；在 $\mu = 2t$ ($\mu = -2t$)时，能隙则于 $k = \pi$ ($k = 0$)处闭合。前一种情形实现了拓扑非平庸相，可通过多种体态方法加以表征[23]，也可通过明确验证未配对马约拉纳零模来确认。后一种方法可借助有限基塔耶夫链的马约拉纳表示来实现[11]。现在，我们考虑后一种方法，并按照约定$c_j = \frac{1}{2}(\gamma_{+,j} + i\gamma_{-,j})$，用马约拉纳算符表示博戈留波夫-德热纳哈密顿量，其中 $\{\gamma_\alpha, \gamma_\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta}$且$\gamma_\alpha^\dagger = \gamma_\alpha$，从而得到以下哈密顿量表达式：

$$\begin{aligned} H_{KC} =& \sum_{j=1}^{N} -\frac{\mu}{2}(1 + i\gamma_{j,+}\gamma_{j,-}) \\ &- \frac{t}{2}(i\gamma_{j,+}\gamma_{j+1,-} + i\gamma_{j+1,+}\gamma_{j,-}) \\ &+ \frac{\Delta}{2}(i\gamma_{j,+}\gamma_{j+1,-} - i\gamma_{j+1,+}\gamma_{j,-}). \end{aligned} \tag{4}$$

注意，对于 $t = \Delta$ 和 $\mu = 0$，我们有 $[H_{KC}, \gamma_{1,-}] = [H_{KC}, \gamma_{N,+}] = 0$，这意味着我们有两个马约拉纳零模，它们的能量均为零，且分别局域在链的一端。

现在，我们将利用两个母体基塔耶夫链哈密顿量 $H_{p,1}(k_i)$ 和 $H_{p,2}(k_j)$ 构造乘法拓扑相（MTP），其中 k_i 和 k_j 分别是沿 i和 j方向的动量。我们令 i 和 j 彼此平行（例如，分别取 i 和 j 为 x，而 $k_i = k_j = k_x$ 对应于 x 方向的动量），或彼此垂直（例如，取 i 和 j 为 x 和 y，其中 $H_{p,1}(k_x)$ 描述一条平行于 x 轴的基塔耶夫链，而 $H_{p,2}(k_y)$ 描述一条位于 x-y 平面内、平行于 y 轴的基塔耶夫链）。这样，我们便可实现一维（$i = j$）或二维（$i \neq j$）乘法拓扑相。对于母体1，我们用一个由动量相关参数构成的矢量 $\boldsymbol{d}(k)_\alpha = (d(k)_{1\alpha}, d(k)_{2\alpha}, d(k)_{3\alpha})$ 与泡利矩阵矢量 $\boldsymbol{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$ 的点积表示母哈密顿量 α（其中 $\alpha \in \{1,2\}$）；对于母体2，则使用 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$，

$$H_{p,1}(k_i) = \boldsymbol{d}(k_i)_1 \cdot \boldsymbol{\tau}, \tag{5a}$$

$$H_{p,2}(k_j) = \boldsymbol{d}(k_j)_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{5b}$$

$$H_{12}^c(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{d}(k_i)_1 \cdot \boldsymbol{\tau} \otimes (-d(k_j)_{12}, d(k_j)_{22}, -d(k_j)_{32}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{5c}$$

ˆ ˆ ˆ 而动量矢量 $\boldsymbol{k} = k_i i + k_j j$ 对于 $i = j$ 简单地就是 $\boldsymbol{k} = k_i i$。张量积结构受到施加于子哈密顿量的对称性与施加于母哈密顿量的对称性的共同保护，详情见 Cook and Moore[10]。按照仅在子系统层面进行的标准分析，子哈密顿量因此具有以下对称性[24,25]:

$$\mathcal{T} = \mathcal{K}, \tag{6a}$$

$$\mathcal{P}_1 = \mathcal{I} \otimes \sigma^x \mathcal{K}, \tag{6b}$$

$$\mathcal{C}_1 = \mathcal{I} \otimes \sigma^x, \tag{6c}$$

$$\mathcal{P}_2 = \tau^x \mathcal{K} \otimes \mathcal{I}, \tag{6d}$$

$$\mathcal{C}_2 = \tau^x \otimes \mathcal{I}, \tag{6e}$$

其中， $\mathcal{T}$、 $\mathcal{P}$ 和 $\mathcal{C}$ 分别对应时间反演、粒子-空穴和手征对称性。除了离散对称性，子乘法 Kitaev 链还具有一种幺正对称性，由 $\mathcal{U} = \tau^x \sigma^x$给出。由于子哈密顿量具有由母哈密顿量构成的张量积形式，且每个母哈密顿量都具有手征对称性，因此子哈密顿量自然呈现这种幺正对称性。正如本文所示，这使得子哈密顿量可以进行分块对角化。这也推动了对称性分析方法的进一步发展：结合子系统与母体层面的分析，而非仅在子系统层面进行分析，能够揭示系统的不同信息；鉴于乘法型拓扑的可能性，这些信息有助于表征拓扑系统。

我们简要讨论子哈密顿量的基底该如何理解，因为有两种可能的解释。一种解释是，将所得哈密顿量视为二次型，描述一个有效的非相互作用系统。不过，我们也可以将此处讨论的子哈密顿量的基底理解为由母体单粒子基底构成的张量积，这对应于子系统的纯四次型基底。因此，在第二种解释下，该哈密顿量刻画的是一个强关联系统。本文着重采用第一种解释，第二种解释则留待后续工作深入探讨。

II 平行母体链的子哈密顿量

我们首先考虑由两条平行母体 Kitaev 链构成的 MKC，对应上文的 $i = j$。因此，我们取$k_i = k_j = k$ 以简化记号。母体和子哈密顿量于是具有以下形式，

$$\begin{aligned} H_{KC,1}(k) =& -(2t_1 \cos k + \mu_1)\tau^z + 2\Delta_1 \sin k \tau^y, \\ H_{KC,2}(k) =& -(2t_2 \cos k + \mu_2)\sigma^z + 2\Delta_2 \sin k \sigma^y, \\ H^c_{MKC,||}(k) =& [-(2t_1 \cos k + \mu_1)\tau^z + 2\Delta_1 \sin k \tau^y] \\ & \otimes [(2t_2 \cos k + \mu_2)\sigma^z + 2\Delta_2 \sin k \sigma^y]. \end{aligned} \tag{7}$$

在此情形下，我们首先通过研究体能谱，然后通过解析和数值研究体态—边界对应关系。

乘法基塔耶夫链的体态谱

子哈密顿量 $H^c_{MKC,||}(k)$ 的谱由以下二重简并本征值组成:

$$\begin{aligned} E(k) = \pm & \sqrt{(2t_1 \cos(k) + \mu_1)^2 + (2\Delta_1 \sin(k))^2} \\ & \sqrt{(2t_2 \cos(k) + \mu_2)^2 + (2\Delta_2 \sin(k))^2}. \end{aligned} \tag{8}$$

这对应于以下条件下的体能隙闭合:

$$\mu_{1,2} = \begin{cases} -2t_{1,2}, & \text{if } k = 0 \\ +2t_{1,2}, & \text{if } k = \pi \\ -2\cos(k)t_{1,2}, & \text{if } \Delta_{1,2} = 0. \end{cases} \tag{9}$$

我们在图 1 中展示了这些结果，其中给出了 MKC 谱随 k 变化的情况；图中选取了相图中的一组代表性点，该相图通过固定 $t_1 = t_2 = 1$ 并改变μ_1 和 μ_2生成。图 1（a-d）表明，体能隙闭合点继承自母体，因为 MKC 的本征值对应于两条 Kitaev 链在不同构型下的本征值之积。

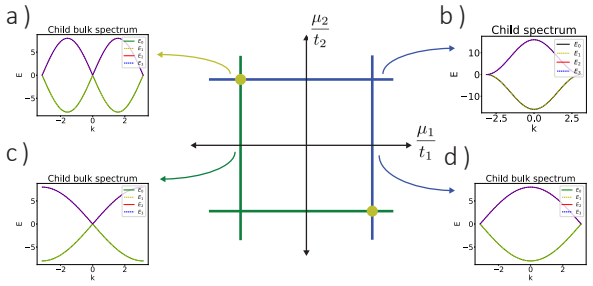


图1：子哈密顿量 $H^c_{MKC,||}(k)$（式7）的体色散关系随其母哈密顿量$H_{KC,1}(k)$和$H_{KC,2}(k)$参数变化的情况。图(a)、(b)、(c)和(d)展示了$H^c_{MKC,||}(k)$的体色散示例，其参数值分别为 $\left(\frac{\mu_1}{t_1}, \frac{\mu_2}{t_2}\right)$=(−2，2)、(2，2)、(−2，0)和(2，0)。子体能隙在绿色线上 $k = 0$处、蓝色线上 $k = \pi$ 处以及黄色点上的$k = 0$，π 处闭合；这与$\Delta_1 \neq 0$，$\Delta_2 \neq 0$时的式9一致。

母体基塔耶夫链的体拓扑不变量的计算方法已为人所知，但 MKC 的拓扑不变量则不然。尽管乘法相的拓扑可以用其母体的拓扑不变量来理解，但在不了解这些哈密顿量如何分解为母哈密顿量的情况下，尚无用于刻画它们的方法。

表征拓扑的一种较为稳健的方法是分析威尔逊环谱。威尔逊环[26] 是定义在闭合路径上的幺正算符:

$$\mathcal{W} = \overrightarrow{\exp}\left[i \int_{BZ} d\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})\right], \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 是非阿贝尔贝里联络:

$$\boldsymbol{A}_{mn}(\boldsymbol{k}) = i \langle u_m(\boldsymbol{k}) | \nabla_{\boldsymbol{k}} | u_n(\boldsymbol{k}) \rangle . \tag{11}$$

这里，$|u_n(\boldsymbol{k})\rangle$ 是占据子空间中的布洛赫态，$\boldsymbol{A}$ 定义为一个厄米算符。因此，$\mathcal{W}$ 是一个幺正算符，其本征值为 $e^{i2\pi\nu_j}$，其中 ν_j 是电荷的 Wannier 中心。

我们计算由母体拓扑不变量确定的相图中拓扑性质不同区域的瓦尼尔中心。每个母哈密顿量都有一个 $\mathbb{Z}_2$拓扑分类，因此子哈密顿量具有 $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ 分类，其不变量 ν_C 可用母体不变量 $\nu^{(1)}$ 和 $\nu^{(2)}$ 表示为 $\nu_C = (\nu^{(1)},\ \nu^{(2)})$，其中$\nu^{(1,2)} \in \{0, 0.5\}$ 模 1 表示各母体的拓扑相。

在平庸相中，占据能带的瓦尼尔中心位于原胞中心（$\nu = 0$）；在拓扑相中则位于边缘（$\nu = 0.5$）。因此，我们计算了具有单一动量分量的 MKC 平行情形，发现当且仅当一个母体相是拓扑相时，两个本征值都显示瓦尼尔中心向边缘移动。这种威尔逊环方法无法检测某些乘性相的局限性，源于子系统威尔逊环对母体威尔逊环的乘性依赖。

图 2 展示了 MKC 在半填充时的电荷沃尼尔中心（$M = 2$ 是占据轨道的数量）。如图 2 (a) 和 (b) 所示，二重简并的占据态对应两个等价的沃尼尔中心 ν_1 和 ν_2。出乎意料的是，无论是具有 $|\mu_1| = |\mu_2| < 2$的 MKC，还是具有 $|\mu_1| = |\mu_2| > 2$ 的 MKC，沃尼尔中心都局域于原胞中心（$\nu_1 = \nu_2 = 0$）；然而，对于前一组参数，有限链具有束缚态，而对于后一组参数，有限链则没有束缚态。只有当母哈密顿量具有不同的拓扑时，半填充 MKC 的沃尼尔中心才局域于边缘（$\nu_1 = \nu_2 = 0.5$），这表明 MKC 威尔逊环的本征值与母体的沃尼尔中心所给出的本征值相对应。附录 S2 对此进行了解析证明。

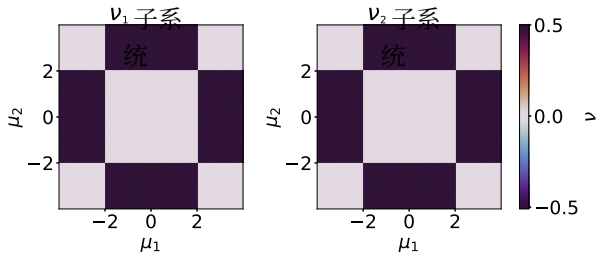


图 2：具有参数为 $t_1 = t_2$ 和$\Delta_1 = \Delta_2$的母体的子哈密顿量在半填充时的瓦尼尔中心。这些对应于沿 k_x积分后得到的威尔逊环本征值。

B 临界点附近的准粒子速度

对于平行乘法 Kitaev 链的情况，我们考察每个无能隙点附近的狄拉克哈密顿量。对于 $\mu_1 \sim -2t_1$ 和 $\mu_2 \sim -2t_2$，当 $k = 0$时能隙闭合，因此我们得到其邻域内的以下狄拉克哈密顿量，

$$\begin{aligned} H^c_{Dirac}(k) = &-(2t_1 + \mu_1)(2t_2 + \mu_2)\Gamma^{zz} \\ &+ 2\Delta_1(2t_2 + \mu_2)k\Gamma^{yz} - 2\Delta_2(2t_1 + \mu_1)k\Gamma^{zy} \end{aligned} \tag{12}$$

其中 $\Gamma^{ij} = \tau^i\sigma^j$。记作 $m_j = 2t_j + \mu_j$，$(j = 1,\ 2)$。能量是二重简并的，表示为:

$$E(k) = \pm\sqrt{4(\Delta_2 m_1 - \Delta_1 m_2)^2 k^2 + m_1^2 m_2^2}. \tag{13}$$

注意，对于无能隙点 $\mu_1 = -2t_1$或 $m_1 = 0$，我们得到$E(k) = \pm 2\Delta_1 m_2 k$；而对于无能隙点 $\mu_2 = -2t_1$或$m_2 = 0$，则有 $E(k) = \pm 2\Delta_2 m_1 k$。需要注意的是，如果 $m_1 = 0 = m_2$ 同时成立，就必须展开到二阶项，才能得到对 k的依赖关系，

$$\begin{aligned} H^c_2(k) = &-[m_1 m_2 - (t_1 m_2 + t_2 m_1)k^2]\Gamma^{zz} + 2\Delta_1 m_2 k\Gamma^{yz} \\ &- 2\Delta_2 m_1 k\Gamma^{zy} + \Delta_1\Delta_2 k^2\Gamma^{yy}. \end{aligned} \tag{14}$$

记为 $t_1 m_2 + t_2 m_1 = M$。谱由 4 个本征值给出，

$$\begin{aligned} E(k) = \pm\big[&[(M \mp \Delta_1\Delta_2)k^2 - m_1 m_2]^2 \\ &+ 4k^2(\Delta_2 m_1 \mp \Delta_1 m_2)^2 k^2\big]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \tag{15}$$

于是，对于 $m_1 = m_2 = 0$ 的情形，我们得到二次型色散关系，$E = \pm\Delta_1\Delta_2 k^2$。注意，谱是二重简并的。

C 具有开放边界条件的有限长度 MKC 平行系统

在介绍了乘性基塔耶夫链的体能谱后，我们现在研究该系统的体边对应。为此，对于平行母体 Kitaev 链的情形，我们解析地刻画相图拓扑非平庸区域中实现的束缚态。随后，我们数值研究低能谱随链长 L、化学势 μ_1 和 μ_2 的变化，以及束缚态的局域化。

1 边界模的解析形式

求解 MKC 平行情形零能模的过程与基塔耶夫链类似，需要在局域化 $k \to iq$后求哈密顿量的零向量。详细推导见补充章节S1，其中得到如下恒等式，

$$\begin{aligned} &[(2t_1\cosh q + \mu_1)^2 - 4\Delta_1^2\sinh^2 q] \\ &\times [(2t_2\cosh q + \mu_2)^2 - 4\Delta_2^2\sinh^2 q] = 0 \end{aligned} \tag{16}$$

这里必须谨慎，因为边界模表达式取决于 μ_1 与 μ_2的参数区间，尤其是当 $t_1 \neq t_2$时。这与我们为方程 16 选择哪些解有关

我们为方程 16 选择。对于半无限边界条件 $\Psi(0) = \Psi(x \to \infty) = 0$，如果只有一个母体是拓扑的，而另一个是平庸的，则一般的边缘模表达式形式如下，

$$\Psi(x) \sim \left[\left(\frac{\mp\mu_i + \sqrt{\mu_i^2 - 4(t_i^2 - \Delta_i^2)}}{2(\Delta_i \pm t_i)}\right)^x - \left(\frac{\mp\mu_i - \sqrt{\mu_i^2 - 4(t_i^2 - \Delta_i^2)}}{2(\Delta_i \pm t_i)}\right)^x\right] \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}. \tag{17}$$

其中（$i = 1$，2）对应的母体具有拓扑性，并且取决于参数区间。在假设$\Delta_i > 0$的情况下，$\mp\mu_i$ 符号函数对应于满足 $\mathrm{sgn}(t_i) = \pm\mathrm{sgn}(\Delta_i)$ 的区域，这基本上就是两组可能的马约拉纳边缘模。在讨论第 D 节中的实空间 MKC 平行哈密顿量之前，我们暂且不列出所有可能情况的完整表达式及其特征向量。

2 谱对链长的依赖性

当这些束缚态彼此不重叠、也不发生杂化时，有限基塔耶夫链会实现未配对的马约拉纳零模；但一般而言，由于波函数重叠，拓扑保护束缚态之间会存在有限的能量劈裂。因此，通常通过研究开放边界条件下有限基塔耶夫链的谱，来展示这种劈裂会随着系统尺寸的增大而呈指数级减小。为便于直接比较，我们因此研究开放边界条件下 MKC 的谱随链长的变化。

对于由方程 3 中给出的 H_{BdG} 描述、满足开放边界条件的有限长度基塔耶夫链，其边界上局域的拓扑保护低能模对要处于 $E = 0$，参数 t、μ 和 Δ 必须经过精细调节[27]。否则，如图 3a) 所示，这些边界模能量会随链长 L 振荡，周期由 μ/Δ[27] 决定，同时整体呈指数衰减。

当至少一个母体处于拓扑相时，有限乘法链的基态能量也会随链长呈现振荡依赖性。图 3 展示了方程 7 中有限乘法 Kitaev 链$H^c_{MKC,\,||}(k)$ 在两种关键情形下的谱依赖性：

1. 母体 1 的参数组 $\{t_1, \Delta_1, \mu_1\}$ 与母体 2 的参数组 $\{t_2, \Delta_2, \mu_2\}$ 相同，即 $t_1 = t_2$、$\Delta_1 = \Delta_2$ 和 $\mu_1 = \mu_2$，且每个母体都具有拓扑非平庸性。此情形下母体的低能谱如图 3(a) 所示，对应的子哈密顿量低能谱则如图 3(c) 和 (e) 所示。

2. 母体1是拓扑非平庸的，而母体2是拓扑平庸的。此情形下母体1和母体2的低能谱分别如图3(a)和(b)所示。子哈密顿量对应的低能谱如图3(d)和(f)所示。

在每种情形下，子哈密顿量的两个最低能量模都会出现振荡 $E_{2L+1} - E_{2L}$，这表明基态简并因有限尺寸效应而分裂。一个关键区别是，如图 3(c) 所示，在情形 1 中，子系统相对于零能量的弗里德尔振荡可以忽略不计，尽管如图 3(e) 所示，这两个最低能量态之间的能量劈裂存在弗里德尔振荡的迹象。情形 2 的低能子谱中，弗里德尔振荡明显得多，如图 3(d) 所示；不过，这两个最低能量态之间的能量劈裂与情形 1 非常相似，如图 3(f) 所示。

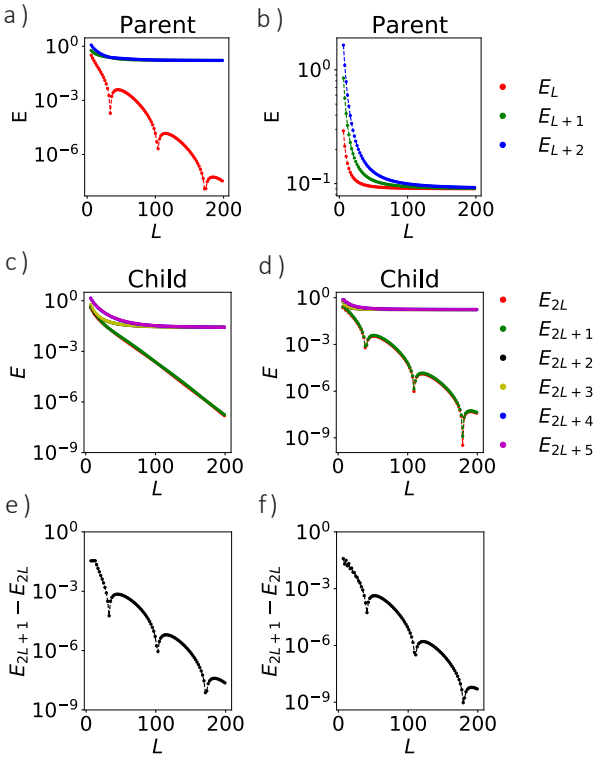


图3：所示基塔耶夫链的低能谱随链长 L 的变化，见(a)和(b)；平行 MKC 哈密顿量$H^c_{MKC,\,||}(k)$的低能谱见(c–f)。每幅图仅显示 L为偶数时的谱。(a) 拓扑相中具有开放边界条件的基塔耶夫链哈密顿量的三个最低能模式，对应于 $t = 1$、$\Delta = 0.08$、$\mu = 0.09$，其随链长 L变化。(b) 平庸相中基塔耶夫链哈密顿量的三个最低能模式，对应于 $t = 1$、$\Delta = 0.08$、$\mu = 2.09$。(c) 含有两条母体基塔耶夫链的 MKC 哈密顿量的六个最低能模式，两条链的参数组均与(a)对应。(d) MKC 哈密顿量的六个最低能模式，其中一条母体基塔耶夫链的参数组与子图(a)对应，第二条母体基塔耶夫链的参数组与子图(b)对应。(e–f) 子图(c–d)中两个最低能量之间的能量差，表明它们是非简并的。

3 有限长度 *MKC* 的谱对化学势的依赖性

调节化学势是研究母体基塔耶夫链相图的一种具有实际意义的机制，因此对于理解 MKC 的行为也很重要。特别是，通过研究母体基塔耶夫链和 MKC 的谱随化学势的变化，可以获得许多信息。图 4(a) 和 (b) 分别展示了母体和子系统在链长为 $L = 80$ 时的结果。值得注意的是，正如预期的那样，当 $\mu_1 = \pm|2t_1|$ 时，母体中会发生拓扑相变，这是由于体能隙闭合所致；当调节 μ_1 远离这些临界值时，态会呈线性色散。对于 $-2t_1 < \mu_1 < 2t_1$，我们在体能隙内观察到低能模，它们对应于局域在链两端的未配对马约拉纳零模。将其与 MKC 的谱比较后，我们发现，当 μ_2 固定为 μ_1 时，两者明显相似：系统发生拓扑相变时，体能隙也会在 $\mu_1 = \pm|2t_1|$ 处闭合；而 $-2t_1 < \mu_1 < 2t_1$ 同样对应于拓扑非平庸相，并伴有拓扑保护边界模的存在。相反，当 μ_1 和 μ_2 远离临界值时，谱呈二次型色散，且最大体能隙更大，是各母体最大体能隙的乘积。这种乘积结构还使隙内态具有四重简并，而母体的隙内态为二重简并。更一般地，子系统的态简并度是每个母体的两倍。

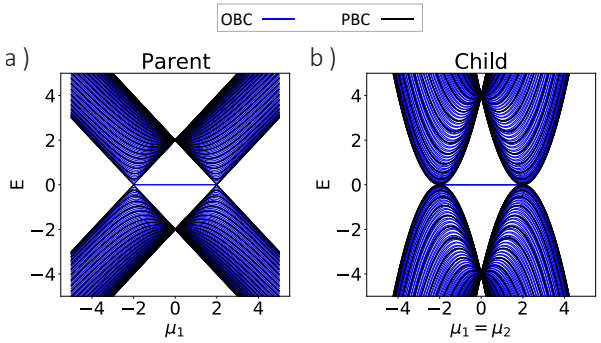


图 4：较长链长$L = 80$时，母体和子系统哈密顿量的谱随化学势的变化；周期性边界条件下的谱以黑色表示，开放边界条件下的谱以蓝色表示。由于母体1和母体2的参数集相同，它们的谱也相同，因此 (a) 中展示的是母体1的谱，适用于$t_1 = t_2 = 1$、 $\Delta_1 = \Delta_2 = 1$、 $\mu_1 = \mu_2$。对应的子 MKC 谱见 (b)，其随 μ_1的变化如图所示，其中 $\mu_2 = \mu_1$。

我们还探究了链长相对较短时，乘法谱对化学势的依赖性，此时有限尺寸拓扑[28] 更加显著。结果如图 5 所示。对于周期性边界条件，谱在相同的 μ_1 值处表现出体能隙闭合；当 μ_1 从这些临界值在 $L = 80$ 情形与 $L = 6$情形之间变化时，态呈线性色散。然而，对于开放边界条件，我们观察到了显著差异。具体而言，如图 5(a) 所示，能隙闭合发生在母体中的 $\mu_1 = \pm|2t_1|$ 而非 $\mu_1 = 0$ 处，这完全是由于体边对应所产生的态之间发生了相消干涉。此外，如图 5(b) 所示，子系统的隙内态四重简并在偏离 $\mu_1 = 0$时发生分裂，两者之间的能隙

态随 $|\mu_1|$ 增加而增长的速度比另外两种态更快。

众所周知，对于离散的化学势取值[27]（由 $\mu_n = 2\sqrt{t^2 - \Delta^2}\cos\left(\frac{n\pi}{L+1}\right)$ 给出，其中 $n \in \{1, \ldots, L\}$），有限卡塔耶夫链具有精确的零能模，我们将其称为马约拉纳点。然而，对于参数集相同的相同母哈密顿量，乘法有限链并不具有精确的零能模，条件是$t_1 = t_2$、 $\Delta_1 = \Delta_2$和 $\mu_1 = \mu_2$，除非$\frac{t_1}{\Delta_1} = \frac{t_2}{\Delta_2} = 1$。图 5 展示了后一种情形，其中乘法链的精确零能量随化学势的变化，在定性上与其两个相同母系统的行为相似。有限尺寸效应可能导致母系统与子系统的谱出现更显著的差异，然而

始终如此。如图 6 所示，对于 $\left|\frac{t_1}{\Delta_1}\right| = \left|\frac{t_2}{\Delta_2}\right| = 2$，尽管两个相同母体中都存在精确零模（不同链长的情形见图 6(a,b)），但这并不意味着有限乘法链也具有精确零模。事实上，从图 6(c-f) 可以看出，若 $t_i \neq \Delta_i$，则子系统要具有精确零模，其母体必须不同；这里考虑的例子满足 $\text{sign}(\frac{t_1}{\mu_1}) = -\text{sign}(\frac{t_2}{\mu_2})$。图 6(c-d) 展示子链长不同的相同母系统。在这些情况下，有限链中不会出现精确零能量。

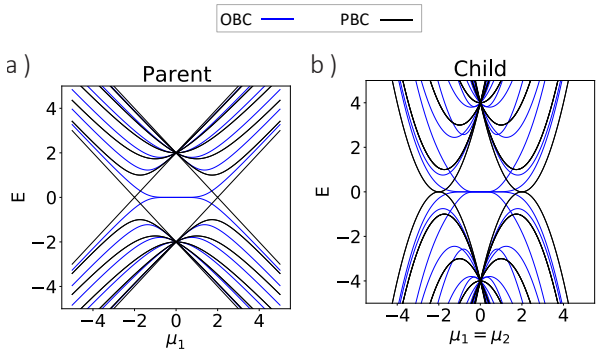


图 5：较短链长 $L = 6$时，母体和子系统哈密顿量的谱随化学势的变化；黑色线表示周期性边界条件下的谱，蓝色线表示开放边界条件下的谱。由于母体1和母体2的参数集相同，它们的谱也相同，因此 (a) 中展示的是母体1的谱，适用于 $t_1 = t_2 = 1$、$\Delta_1 = \Delta_2 = 1$、 $\mu_1 = \mu_2$。对应的子 MKC 谱见 (b)，其随 μ_1的变化如图所示，其中 $\mu_2 = \mu_1$。

谱依赖性对化学势的依赖揭示了

乘法链与其母体之间存在一些有趣的差异。对于后者，零模的数量由链长 L 决定（见图 6a-b）；而对于前者，当满足不同母体存在精确零模的必要条件 $\frac{t_1}{\Delta_1} \neq 1$ 和 $\frac{t_2}{\Delta_2} \neq 1$ 时，零模数量的宇称始终为偶数，与链长的宇称无关（见图 6(e-f)）。此外，子体谱对自由参数的依赖呈现出比预期更丰富的变化：例如，图 6(c) 和 (d) 所示的谱呈现二次色散子体谱，这自然源于子系统的张量积组合——两个具有线性色散的 Kitaev 哈密顿量。这是乘法模型相当普遍的特征。不过，如图 6(e) 和图 6(f) 所示，当 sign($\frac{t_1}{\mu_1}$) = –sign($\frac{t_2}{\mu_2}$) 时，也可以得到线性色散。补充材料 S4 节的公式 (S82) 和公式 (S84) 对二次色散和线性色散均作了解释。这些结果表明，有限尺寸拓扑与乘法拓扑相之间存在丰富的相互作用。

4 MKC 拓扑保护边界模的局域化

基塔耶夫链的谱性质通常与未配对马约拉纳零模态的其他特征结合起来研究，以更全面地刻画该模型的拓扑非平庸相。特别是，带隙内态波函数的概率密度是衡量拓扑非平庸相中马约拉纳零模局域化和鲁棒性的重要指标。因此，我们还比较了基塔耶夫链与 MKC 中拓扑保护的带隙内态的概率密度分布。这些结果如图 7 所示。与基塔耶夫链类似，我们发现 MKC 的零模在空间上可以彼此分离，其概率密度峰值位于链的两端附近，且分别位于宇称不同的格点上。当 MKC 中存在四个简并零模时，链的每一端各局域化两个零模；而在基塔耶夫链中，链的每一端各局域化一个零模。

有趣的是，两个具有中隙态、且这些中隙态向体态方向呈指数衰减的母哈密顿量，在乘法链中并不会产生相同的行为。如图 7 所示，子哈密顿量的边界模峰值出现在链端以外的概率密度处，但仍主要分布在一端或另一端附近。衰减特性取决于体能隙的大小；对于较小的能隙，乘积模型的体能隙自然小于母体的体能隙。

5 MKC 平行系统中马约拉纳零模的鲁棒性 ：

继续讨论之前，必须检验 MKC 平行系统中的马约拉纳零模对局域无序的鲁棒性。我们知道，对于双带基塔耶夫链，当受到粒子-空穴基中与 σ^z 和 σ^y 成正比的局域无序作用时，马约拉纳零模仍然存在。只有当局域无序与粒子-空穴基中的 σ^x 成正比时，马约拉纳零模才会偏离零能量。我们同样研究了 MKC 平行系统中各种无序项的影响。我们同样

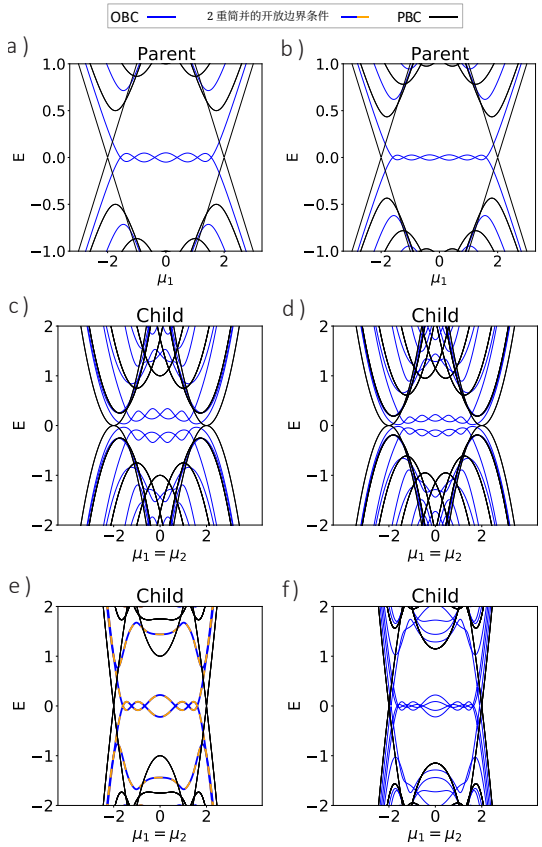


图 6：子系统和母体的谱对化学势的依赖关系。参数为 $|t| = 1$、$\Delta = 0.5$ 的基塔耶夫链谱，其中偶数链和奇数链（$L = 6,\ 7$）分别显示在 (a) 和 (b) 中。两个相同母体的乘积链谱，如 (a) 和 (b) 所示，分别显示在 (c) 和 (d) 中。参数为 $t_1 = -t_2 = 1$、$\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$ 的两个不同母体的乘积链谱，其中偶数链和奇数链（$L = 6,\ 7$）分别显示在 (e) 和 (f) 中。

黑色曲线对应周期性边界条件下的解，对于子链而言均为二重简并。蓝色曲线对应开放边界条件，双重简并以蓝橙相间的虚线表示。

研究 MKC 并联系统中各种无序项的影响。在这种情况下，我们同时具有粒子-空穴基底和自旋基，因此必须检查所有可能的局域无序张量积组合。我们发现，只要至少一个母体具有拓扑性，对于正比于 $\tau^i\sigma^j$ 的任意组合的局域无序，马约拉纳零模都保持在零能量处，其中 $i,\ j \in \{0, y, z\}$。如果两个母体都具有拓扑性，那么对于正比于 $\tau^z\sigma^x$、$\tau^x\sigma^z$、$\tau^y\sigma^x$ 和 $\tau^x\sigma^x$ 的局域无序，马约拉纳零模也具有鲁棒性。即使其中一个母体具有拓扑性，只有当局域无序正比于 $\tau^x\sigma^x$ 时，与马约拉纳零模对应的平带才会消失。这表明 MKC 并联子系统的马约拉纳零模比其母体中的马约拉纳零模更加鲁棒。

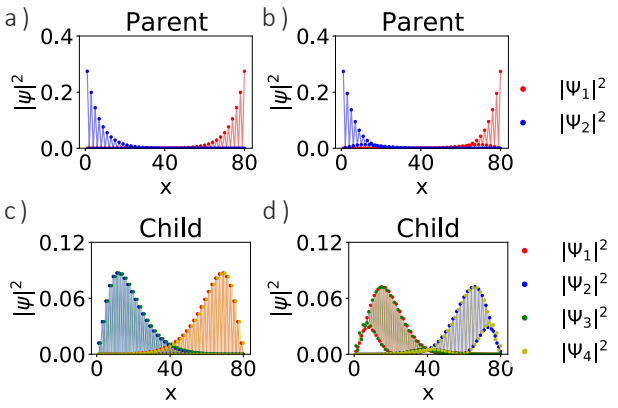


图 7：a）拓扑区域中基塔耶夫链的束缚态，参数为 $t = 1$、$\Delta = 0.08$ 和 $\mu = 0$。b）基塔耶夫链的基态，参数为 $t = 1$、$\Delta = 0.08$ 和 $\mu = 0.09$。c）具有两个相同母体的乘法链在拓扑相中的束缚态，每个母体如子图 (a) 所示。这里 $\Psi_{1,2} = \Psi'_1 \pm \Psi'_3$ 和 $\Psi_{3,4} = \Psi'_2 \pm \Psi'_4$，其中 Ψ' 是有限哈密顿量的一个特征向量。d）具有两个相同母体的乘法链在拓扑相中的束缚态，每个母体如子图 (b) 所示。这里 $\Psi_{1,2} = \Psi'_1 \pm \Psi'_4$ 和 $\Psi_{3,4} = \Psi'_2 \pm \Psi'_3$，其中 Ψ' 是有限哈密顿量的一个特征向量。

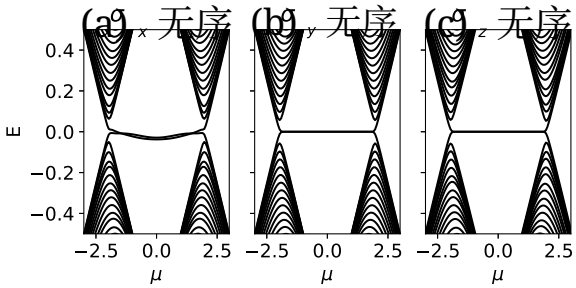


图 8：检验基塔耶夫链对正比于 (a)σ^x、(b)σ^y 和 (c)σ^z 的无序的鲁棒性。对于σ^y 和 σ^z 无序，马约拉纳零模具有鲁棒性；而对于σ^x 无序，它们则偏离零能量。

D 平行 MKC 哈密顿量的实空间形式

马约拉纳表示下的晶格哈密顿量展示了基塔耶夫链的不同相，以及改写为不同 SSH 模型的 MKC。我们在图 10 中采用图示方法，清晰描述马约拉纳零模的位置，并对我们通过数值计算展示的特征给出解析解释。

我们通过数值计算观察到，MKC 存在数量为偶数的未配对马约拉纳束缚态。我们利用这一事实，通过以下表达式定义自旋马约拉纳算符，从而解析地刻画 MKC：$c_{j,\sigma} = \frac{1}{2}(\gamma_{j,+,\sigma} + i\gamma_{j,-,\sigma})$。随后，对于给定的晶格位置，我们可以将两个自旋相反的马约拉纳算符分组成两个二分量向量：$\gamma_{j,+} = (\gamma_{j,+,\uparrow}, \gamma_{j,+,\downarrow})$ 和 $\gamma_{j,-} = (\gamma_{j,-,\uparrow}, \gamma_{j,-,\downarrow})^T$，

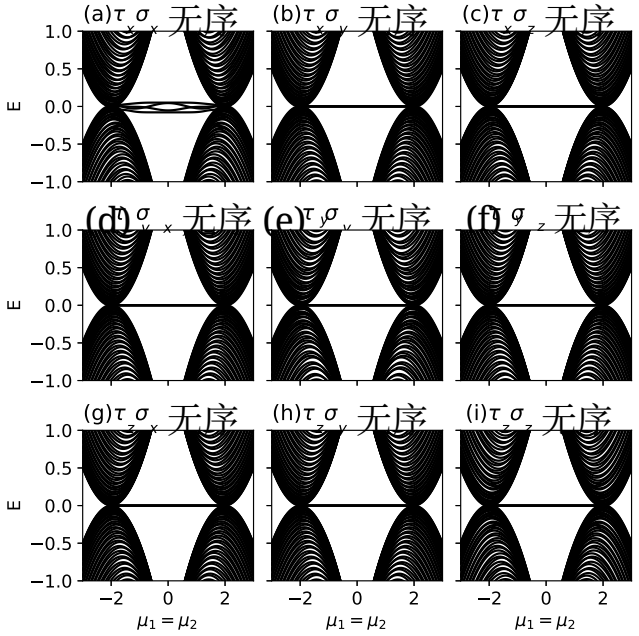


图 9：检验存在幅度为$0.2t$的各种位点无序时，MKC 中平行马约拉纳零模的鲁棒性。在 $\mu_1 = \mu_2$的情况下，只有正比于 $\tau^x\sigma^x$ 的位点无序会使马约拉纳零模偏离零能量，这表明平行 MKC 系统中的马约拉纳零模天生比其组成母体更具鲁棒性。

这样我们就能直观地分析可能存在的各种相。MKC 平行哈密顿量如下所示，

$$
\begin{aligned}
H^c_{\mathrm{MKC},||} = \frac{i}{2}\sum_j & -\gamma_{j,+}[(\mu_1\mu_2 + 2t_1t_2)\sigma^z - 2i\Delta_1\Delta_2\sigma^y]\gamma_{j,-} \\
& - \gamma_{j,+}[((t_2\mu_1 + t_1\mu_2) - \mu_2\Delta_1)\sigma^z - i\mu_1\Delta_2\sigma^y]\gamma_{j+1,-} \\
& - \gamma_{j+1,+}[((t_2\mu_1 + t_1\mu_2) + \mu_2\Delta_1)\sigma^z + i\mu_1\Delta_2\sigma^y]\gamma_{j,-} \\
& - (t_1 - \Delta_1)\gamma_{j,+}(t_2\sigma^z - i\Delta_2\sigma^y)\gamma_{j+2,-} \\
& - (t_1 + \Delta_1)\gamma_{j+2,+}(t_2\sigma^z + i\Delta_2\sigma^y)\gamma_{j,-}.
\end{aligned}
\tag{18}
$$

这种形式可以区分出三种相互作用项：位点相互作用、最近邻相互作用和次近邻相互作用。系数的矩阵结构表明存在自旋间相互作用。

为了直观地呈现马约拉纳束缚态，我们进行相似变换，$h \to UhU^\dagger$, $\gamma_{j,+} \to \tilde{\gamma}_{j,+} = \gamma_{j,+}U^\dagger$和 $\gamma_{j,-} \to \tilde{\gamma}_{j,-} = U\gamma_{j,-}$其中，$U = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma^0 - i\sigma^y)$，变换后，$\tilde{\gamma}_{j,\pm}$ 的两个分量仍满足马约拉纳反对易关系，$\{\tilde{\gamma}_j, \tilde{\gamma}_k\} = 2\delta_{jk}$。变换 U 将 σ^z 变为 σ^x，使得所得哈密顿量呈非对角形式，并可分解为两个独立的

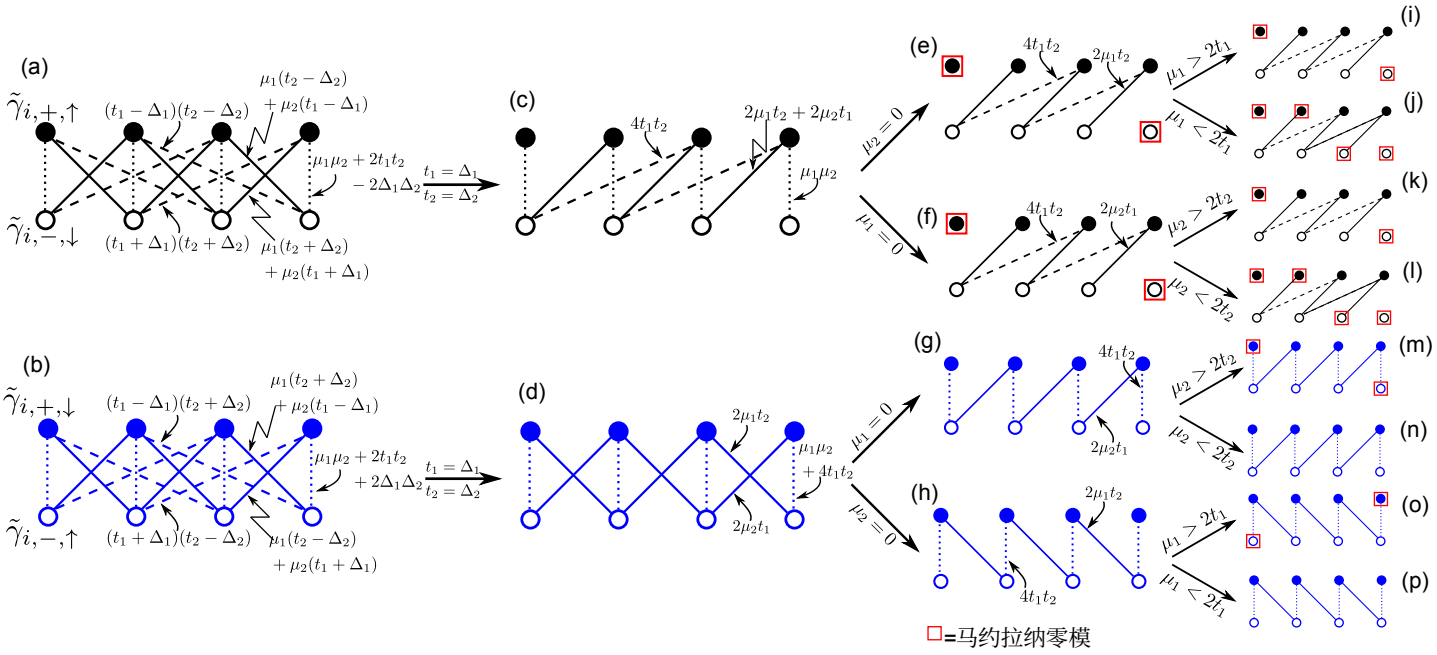


图10：马约拉纳基中的 MKC 平行哈密顿量。示意图展示了一个母体为拓扑态、另一个为平庸态，以及两个母体均为拓扑态时的精确马约拉纳零模。哈密顿量 $H_{1,\,||}$ 和 $H_{2,\,||}$ 分别以 (a) 和 (b) 中的（黑色）和（蓝色）表示。(c) 和 (d) 表示施加条件 $t_i = \Delta_i$、$(i = \{1, 2\})$ 后的修正系统。(f) 和 (g) 展示第一母体在 $\mu_1 = 0$ 条件下为拓扑态时相应的系统。(e) 和 (h) 展示第二个母体在 $\mu_2 = 0$条件下为拓扑态时相应的系统。最后一列展示了仅一个母体为拓扑态或两个母体均为拓扑态时，马约拉纳零模位置的不同结果。（红色）方块表示马约拉纳零模的位置。

自旋耦合部分，

$$
\begin{aligned}
H^{c}_{\mathrm{MKC},||} =& \frac{i}{2}\sum_j[-(\mu_1\mu_2 + 2t_1t_2 - 2\Delta_1\Delta_2)\tilde{\gamma}_{j,\uparrow,+}\tilde{\gamma}_{j,\downarrow,-} \\
&- (\mu_1(t_2 - \Delta_2) + \mu_2(t_1 - \Delta_1))\tilde{\gamma}_{j,\uparrow,+}\tilde{\gamma}_{j+1,\downarrow,-} \\
&- (\mu_1(t_2 + \Delta_2) + \mu_2(t_1 + \Delta_1))\tilde{\gamma}_{j+1,\uparrow,+}\tilde{\gamma}_{j,\downarrow,-} \\
&- (t_1 - \Delta_1)(t_2 - \Delta_2)\tilde{\gamma}_{j,\uparrow,+}\tilde{\gamma}_{j+2,\downarrow,-} \\
&- (t_1 + \Delta_1)(t_2 + \Delta_2)\tilde{\gamma}_{j+2,\uparrow,+}\tilde{\gamma}_{j,\downarrow,-}] \\
&+ \frac{i}{2}\sum_j[-(\mu_1\mu_2 + 2t_1t_2 + 2\Delta_1\Delta_2)\tilde{\gamma}_{j,\downarrow,+}\tilde{\gamma}_{j,\uparrow,-} \\
&- (\mu_1(t_2 + \Delta_2) + \mu_2(t_1 - \Delta_1))\tilde{\gamma}_{j,\downarrow,+}\tilde{\gamma}_{j+1,\uparrow,-} \\
&- (\mu_1(t_2 - \Delta_2) + \mu_2(t_1 + \Delta_1))\tilde{\gamma}_{j+1,\downarrow,+}\tilde{\gamma}_{j,\uparrow,-} \\
&- (t_1 - \Delta_1)(t_2 + \Delta_2)\tilde{\gamma}_{j,\downarrow,+}\tilde{\gamma}_{j+2,\uparrow,-} \\
&- (t_1 + \Delta_1)(t_2 - \Delta_2)\tilde{\gamma}_{j+2,\downarrow,+}\tilde{\gamma}_{j,\uparrow,-}], \\
=& H_{||,1} + H_{||,2}.
\end{aligned}
\tag{19}
$$

因此，我们可以将该问题视为图 10(a) 和 (b) 所示的两个独立系统，并逐一进行分析。我们将这两个对易部分，即分量哈密顿量，分别记为$H_{||,\,1}$ 和 $H_{||,\,2}$。我们假设 $t_i = \Delta_i$，$i \in \{1, 2\}$，并探究由图 10(c) 和 (d) 得出的不同相，它们分别对应于母哈密顿量的各个相。

情形 *1*：第一母体具有拓扑性质，满足 $\mu_1 = 0$，而第二个母体是平庸的，满足 $\mu_2 > 2t_2$。图 10(f)、(k) 和 (g)、(m) 分别展示了分量 $H_{||,\,1}$ 和 $H_{||,\,2}$的情况。条件 $\mu_2 > 2t_2$ 意味着 (g) 中的基塔耶夫链具有拓扑性质，且有两个马约拉纳零模；而 $\mu = 0$ 已在 (f) 中提供了两个马约拉纳零模。因此，我们有四个马约拉纳边缘模，它们都位于 MKC 平行系统的第一个和最后一个格点。

情况 *2*：第二个母体具有拓扑性质，满足 $\mu_2 = 0$，而第一母体是平庸的，满足 $\mu_1 > 2t_1$。关于马约拉纳零模的位置，这与情形 1 类似；图 10(e)、(i) 和 (h)、(o) 分别展示了分量$H_{||,\,1}$ 和 $H_{||,\,2}$ 的情况。我们同样有四个马约拉纳零模，每个分量各提供两个，分别位于 MKC 平行系统的第一个和最后一个格点。不过需要注意的是，第一个格点和最后一个格点上的自旋构型彼此平行；而在情形 1 中，自旋则是反平行的。

情形 *3*：两个母体均为拓扑态，即 $\mu_1 = 0$,$\mu_2 < 2t_2$ 和 $\mu_1 < 2t_1$, $\mu_2 = 0$。图 10(k)、(m) 和 (n)、(p) 分别展示了分量$H_{||,\,1}$ 和$H_{||,\,2}$ 的这一情形。注意，$H_{||,\,2}$ 中没有马约拉纳零模；而对于 $H_{||,\,1}$，我们在位置 1、2 和

格点 L 处有马约拉纳零模。

1 MKC 平行链的拓扑与分量哈密顿量：

可以从分量哈密顿量推导出布洛赫哈密顿量，其形式应与常见的双能带基塔耶夫链相似，但包含次近邻耦合。我们定义 $\tilde{c}_{j,\sigma,-} = \frac{1}{2}(\tilde{\gamma}_{j,\sigma,+} + i\tilde{\gamma}_{j,\sigma,-})$，然后根据方程 (19)，写作：

$$H^{c}_{\mathrm{MKC},||} = \frac{1}{2}\sum_{k}\tilde{\mathbf{c}}^{\dagger}_{k,1}\mathcal{H}_{||,1}(k)\tilde{\mathbf{c}}_{k,1} + \frac{1}{2}\sum_{k}\tilde{\mathbf{c}}^{\dagger}_{k,2}\mathcal{H}_{||,2}(k)\tilde{\mathbf{c}}_{k,2}, \tag{20}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{||,1}(k) =& -[2(\mu_1 t_2 + \mu_2 t_1)\cos k + 2(t_1 t_2 + \Delta_1\Delta_2)\cos 2k \\ &+ \mu_1\mu_2 + 2t_1 t_2 - 2\Delta_1\Delta_2]\sigma^z \\ &+ [2(\mu_2\Delta_1 + \mu_1\Delta_2)\sin k \\ &+ 2(t_2\Delta_1 + t_1\Delta_2)\sin 2k]\sigma^y = \mathbf{d}_1(k)\cdot\boldsymbol{\sigma},\end{aligned} \tag{21a}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{||,2}(k) =& -[2(\mu_1 t_2 + \mu_2 t_1)\cos k + 2(t_1 t_2 - \Delta_1\Delta_2)\cos 2k \\ &+ \mu_1\mu_2 + 2t_1 t_2 + 2\Delta_1\Delta_2]\sigma^z \\ &+ [2(\mu_2\Delta_1 - \mu_1\Delta_2)\sin k \\ &+ 2(t_2\Delta_1 - t_1\Delta_2)\sin 2k]\sigma^y = \mathbf{d}_2(k)\cdot\boldsymbol{\sigma},\end{aligned} \tag{21b}$$

其中，$\tilde{c}_{k,1} = (\tilde{c}_{k,\uparrow}, \tilde{c}^{\dagger}_{-k,\downarrow})^T$ 以及 $\tilde{c}_{k,2} = (\tilde{c}_{k,\downarrow}, \tilde{c}^{\dagger}_{-k,\uparrow})^T$。这里，方程 21a 和方程 21b 中的每个分量哈密顿量都会产生方程 (8) 所示的非简并能量色散 $E(k)$，它们与 MKC 平行链的色散关系等效。接下来，我们通过构造方程 (21a) 和方程 (21b) 中的参数曲线 $\mathbf{d}_1(k)$ 和 $\mathbf{d}_2(k)$，研究这两个分量布洛赫哈密顿量的绕数，其中k 在区间 $[0, 2\pi)$ 内变化。对于每条母体基塔耶夫链，如果参数曲线绕原点一周，则系统处于绕数为 $\mathcal{W} = \pm 1$ 的拓扑相。在临界点，参数曲线与原点相交；而在平庸相中，它完全不绕原点。基于类似的观点，我们尝试推断分量哈密顿量所对应的参数曲线。

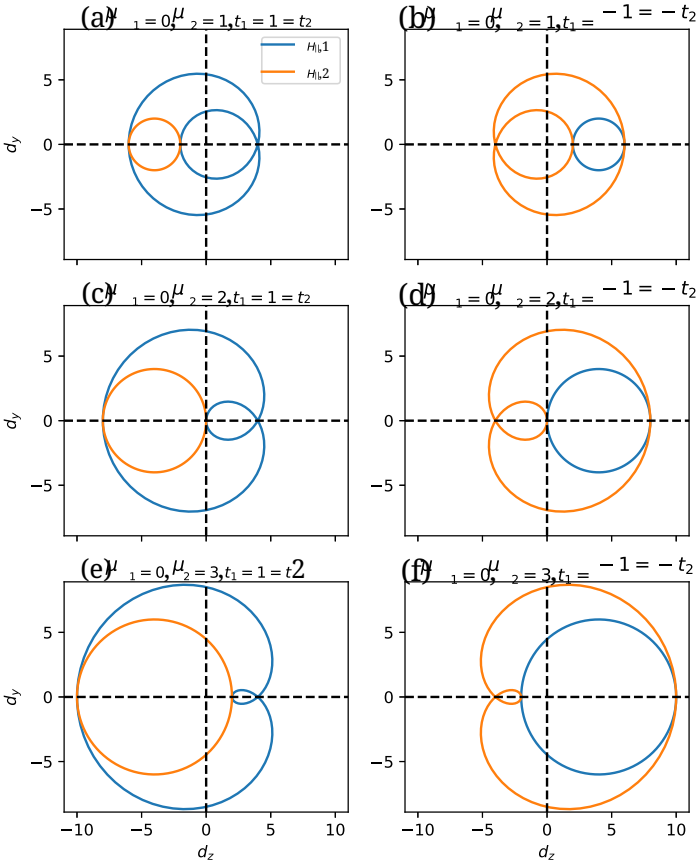


图11：当 k 在区间 $[0, 2\pi)$ 内变化时，哈密顿量分量 $H_{||,1}$（蓝色）和$H_{||,2}$（橙色）对应的参数曲线$\mathbf{d}_1(k)$和 $\mathbf{d}_2(k)$。曲线绕原点的情况展示了 μ_2 取不同值时的不同拓扑特征，其中$\mu_1 = 0$，对于 $t_1 = 1 = t_2$的情况（第一列，(a)、(c)、(e)）和 $t_1 = -1 = t_2$的情况（第二列，(b)、(d)、(f)），所有情况下$\Delta_1 = \Delta_2 = 1$。

从图11(a)和(b)中可以看出，对于 $t_1 = t_2 = 1 = \Delta_1 = \Delta_2$，当两个母体基塔耶夫链均具有拓扑属性，即 $\mu_i < 2t_i$, $i \in \{1, 2\}$时，由$\mathbf{d}_1(k)$形成的曲线绕原点两圈，而$\mathbf{d}_2(k)$形成的曲线完全没有绕原点，因此总绕数为 $\mathcal{W} = 2$ 。这与我们此前根据图 10 得出的分析完全一致：图 10 表明，$H_{||,1}$ 包含两对马约拉纳零模，而$H_{||,2}$不包含马约拉纳零模。我们还考察了所有三个临界点——其中一个母体处于临界状态，或两个母体均处于临界状态；在后一种情况下，两条参数曲线都与原点相交，但交点构型不同。对于例如，图 11(c) 和 (d) 展示了一个母体为拓扑态、另一个处于临界态的情况。最后，我们考虑一个母体为拓扑态、另一个为平庸态（$\mu_1 < 2t_1$ 和 $\mu_2 > 2t_2$，或反之）的情况。此时各分量哈密顿量的绕数如图 11(e) 和 (f) 所示。可以看到，由$\mathbf{d}_1(k)$和$\mathbf{d}_2(k)$得到的两条曲线都各自绕原点一周，因此绕数为 $\mathcal{W} = 1 \oplus 1$。这也与我们对图 10 的讨论一致，因为其中每个分量哈密顿量都分别携带一对马约拉纳零模。

在这里，人们可能会认为，在拓扑-平庸情形下，MKC 同一格点上的马约拉纳零模应该发生杂化。但是，

在第一节中，我们已经发现存在一种涌现的幺正对称性。可以在该对称性的贝尔态基底中进行分块对角化，$\mathcal{U} = \tau^x\sigma^x$ 从而得到本节所述的精确分量哈密顿量。因此，正是这种幺正对称性的存在保护了 MKC 同一格点上的两个马约拉纳零模，使其免于杂化，并由此产生彼此独立的绕数描述。

2 对 $t_i \neq \Delta_i$ 情形下马约拉纳点的解释：

采用这种图解方法，我们可以更深入地理解有限尺寸 MKC 中显著的精确零模。在图6(e)和(f)中，我们观察到，对于参数 $|t_i| = 2|\Delta_i|$、$i \in \{1,2\}$ 和 $t_1 = -t_2$，两个接近零能量的能级会随 $\mu_1 = \mu_2$ 变化而形成气泡。值得注意的是，在有限尺寸 MKC 平行系统中，格点数为偶数和奇数的系统，其零能量或马约拉纳点的位置有所不同。如图 6 (e) 所示，格点数为偶数的系统在谱中呈现二重简并，这里用蓝色和橙色虚线标出；而格点数为奇数的系统在开放边界条件下的低能态则呈现更复杂的结构，如图 6 (f) 所示。这种情况下出现丰富结构，是因为整条链实际上由两个解耦的子系统链组成；如图 12 的示意图所示，这两个子系统链源自图 10(b)，对应于 $H_{||,\ 2}$。如图 6(a)和(b)所示，马约拉纳点的数量随链长变化，因此在这种情况下，两个子系统链的谱不会重合。

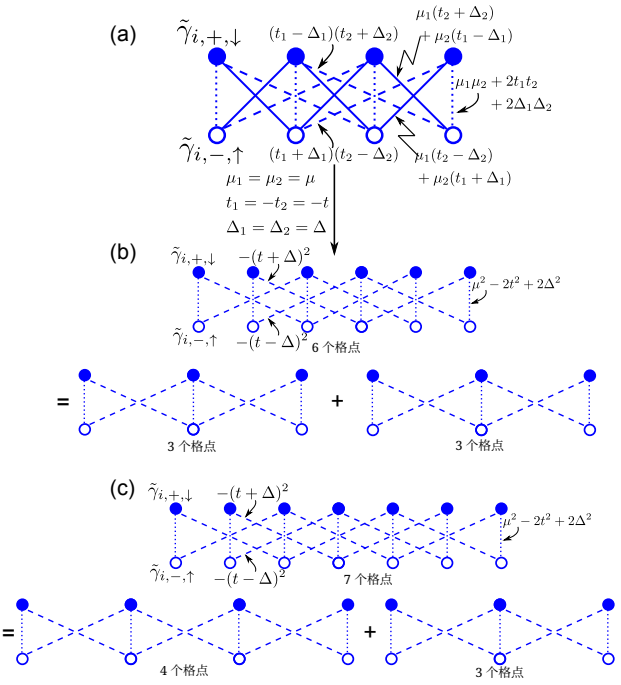


图12：特定情况下的示意图$H_{||,\ 2}$(a)，$\mu_1 = \mu_2 = \mu$、$t_1 = -t_2 = -t$ 和 $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$以及$t \neq \Delta$。对于情况(b)$L = 6$和(c)$L = 7$，系统现在可以分解为两个3位点基塔耶夫链，或一个4位点基塔耶夫链和另一个3位点基塔耶夫链。零能量马约拉纳点可以由此得到解释。

如我们所见，当 $\mu_1 = \mu_2 = \mu$, $t_1 = -t_2 = -t$, $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ 时，式（21b）中的分量哈密顿量 $H_{||,\ 2}$ 仅包含次近邻相互作用，因此可拆分为两条基塔耶夫链，使其格点数之和等于原系统的格点数。于是，对于具有 $2L$ 个晶格点的系统，我们得到两条长度为L的基塔耶夫链；而对于具有 $2L+1$ 个格点的系统，我们分别得到长度为 L 和 $L+1$ 的两条基塔耶夫链。我们知道，对于参数为 μ', t' 和 Δ' 的 L 格点基塔耶夫链，其零能量马约拉纳点位于 $\mu' = 2\sqrt{t'^2 - \Delta'^2}\cos\frac{n\pi}{L+1}$ 处，其中 $n \in \{1,...,L\}$，即共有 L 个马约拉纳点。我们对基塔耶夫链进行类似计算，并采用图12导出的映射 $\mu' = \mu^2 - 2t^2 + 2\Delta^2, t' + \Delta' = -(t+\Delta)^2, t' - \Delta' = -(t-\Delta)^2$。由此得到以下恒等式，

$$\begin{aligned} &\mu = \pm\sqrt{2(t^2-\Delta^2)\left(1+\cos\frac{n\pi}{L+1}\right)}, \quad n \in \{1,...,L\}, \\ \Longrightarrow\ &\mu = 2\sqrt{t^2-\Delta^2}\cos\frac{n\pi}{2L+2}, \quad n \in \{1,...,2L+2\}. \end{aligned} \tag{22}$$

对于长度为 L 的每个拆分后的基塔耶夫链中的精确零模。平方根解释了为何观测到的马约拉纳点数量只能是偶数，以及为何大小为 L 的基塔耶夫链会产生 $2L$ 个马约拉纳点。根据这一计算，我们推断 $H_{||,\ 2}$ 个格点对应 $2L$ 个马约拉纳点，且这些点二重简并。同理，$H_{||,\ 2}$ 个格点对应 $2L+1$ 由于两个子系统KC各自的贡献，产生 $2L \oplus 2(L+1)$ 个马约拉纳点。根据公式（22）得出的与马约拉纳点对应的 μ 值，即 $\{\mu_i\}$，与图 6(e)和(f)的数值模拟中显示的马约拉纳点一致。

3 由分量哈密顿量和纠缠得到的*MKC*平行系统的边缘态：

由于由 MKC 平行系统得到的拓扑保护束缚态，在参数空间中的存在条件和纠缠结构上都不同于组成母体的拓扑保护束缚态，因此我们将其单独定义为乘性马约拉纳零模，简称马约拉纳零模。现在我们终于可以讨论马约拉纳零模的完整解析表达式。由 MKC 平行系统导出的分量哈密顿量 $H_{||,1}$ 和 $H_{||,2}$ 各自满足零特征值的条件，因此第一节 IIC 1 中列出的四个条件可分别拆分为适用于各分量系统的两个条件。如 S1 A 中所推导，局域化后，$k \to iq$、$H_{||,1}$ 和 $H_{||,2}$ 可表示为：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{||,1}(iq) = &-[(\mu_1 + 2t_1\cosh q)(\mu_2 + 2t_2\cosh q) \\ &+ 4\Delta_1\Delta_2\sinh^2 q]\sigma^z \\ &+ i[2\Delta_1\sinh q(\mu_2 + 2t_2\cosh q) \\ &+ 2\Delta_2\sinh q(\mu_1 + 2t_1\cosh q)]\sigma^y \end{aligned} \tag{23a}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{||,2}(iq) =& -[(\mu_1+2t_1\cosh q)(\mu_2+2t_2\cosh q)\\ &-4\Delta_1\Delta_2\sinh^2 q]\sigma^z\\ &+i[2\Delta_1\sinh q(\mu_2+2t_2\cosh q)\\ &-2\Delta_2\sinh q(\mu_1+2t_1\cosh q)]\sigma^y\end{aligned} \tag{23b}$$

由上述表达式得到零特征值的条件为:

$$\begin{aligned}&[(2t_1\cosh q+\mu_1)\mp 2\Delta_1\sinh q]\\ &\times[(2t_2\cosh q+\mu_2)\mp 2\Delta_2\sinh q]=0.\end{aligned} \tag{24}$$

对于分量$H_{||,\ 1}$以及,

$$\begin{aligned}&[(2t_1\cosh q+\mu_1)\mp 2\Delta_1\sinh q]\\ &\times[(2t_2\cosh q+\mu_2)\pm 2\Delta_2\sinh q]=0.\end{aligned} \tag{25}$$

对于分量 $H_{||,\ 2}$。从示意图 Fig.10 可以看出，根据两个母体的拓扑性质，马约拉纳零模以不同方式局域化。我们考虑 $\mathrm{sgn}(t_i)\ =\mathrm{sgn}(\Delta_i)$,$i\in\{1,2\}$ 的条件式 24,

$$\begin{aligned}&[(2t_1\cosh q+\mu_1)-2\Delta_1\sinh q]\\ &\times[(2t_2\cosh q+\mu_2)-2\Delta_2\sinh q]=0.\end{aligned} \tag{26}$$

如果两个母体都是拓扑的，则有 $2t_1\cosh q+\mu_1=2\Delta_1\sinh q$ 和 $2t_2\cosh\ q+\mu_2=2\Delta_2\sinh\ q$；将其代入式 23a 和 23b 可知，$\mathcal{H}_{||,\ 2}$ 消失。MKC 平行系统的完整基底由四个自由度构成，即 $(\tilde{c}_{k,\uparrow},\ \tilde{c}_{k,\downarrow},\ \tilde{c}^{\dagger}_{-k,\uparrow},\ \tilde{c}^{\dagger}_{-k,\downarrow})^T$，这是将两个分量的自由度组合而成的。在此基底中，从$\mathcal{H}_{||,\ 1}(iq)$ 得到的零特征向量如下:

$$|\Psi\rangle_{MMZM}=\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle-|11\rangle),|01\rangle,|10\rangle\}, \tag{27}$$

其中 $|0\rangle=(1,\ 0)^T$，$|1\rangle=(0,\ 1)^T$。

同样地，设只有母体*1*是拓扑的，而母体*2*是平庸的，即我们只需满足条件 $2t_1\cosh\ q+\mu_1=2\Delta_1\sinh q$。代入方程23a和23b，可得完整基底中具有四个自由度的零特征向量为:

$$|\Psi\rangle_{MMZM}=\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle-|11\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle-|10\rangle)\}. \tag{28}$$

如果只有母体2具有拓扑属性，我们也会得到相同的零特征向量。详细计算见补充材料第S1 A节。这里值得注意的是，通过改变其中一个母体的拓扑属性，可以实现从乘积态到最大纠缠贝尔态的转变。我们在表 I 中列出了母体拓扑属性的不同组合，以及 t_i 相对于 Δ_i 的符号函数取值对应的所有可能特征向量。这里需要记住，在每种情况下，都有四个马约拉纳零模。表中仅列出了边缘 $x=0$ 处的马约拉纳模。另一边缘处的特征向量可通过对两个母体分别将$_{\mathrm{sgn}(t_i)}$ $_{\mathrm{sgn}(\Delta_i)}$ 从 $+$ 改为 $-$，反之亦然，得到。当两个母体都具有~~拓~~拓扑属性时，我们将得到总共四个特征向量，其中有两个特征向量在两种符号函数取值下均相同。

4 个格点 *MKC* 中马约拉纳零模波函数的空间分布

现在，我们通过计算 MKC 平行晶格中含 N 个格点时的关联，进一步刻画马约拉纳零模波函数——
为这些态绘制了空间分辨的概率密度。对于特定的马约拉纳点，$\mu_1=\mu_2=0$ 对于 $t_1=\Delta_1$ 和$t_2=\Delta_2$，波函数必须是在两个边缘处的狄拉克δ函数（格点指标为 $j=1$ 和 $j=N$）。如图10的示意图所示，在格点指标为 $j=2$ 和 $j=N-1$的位置还各有一个狄拉克δ函数。我们通过数值模拟展示这一特定情形，如图13所示。对于

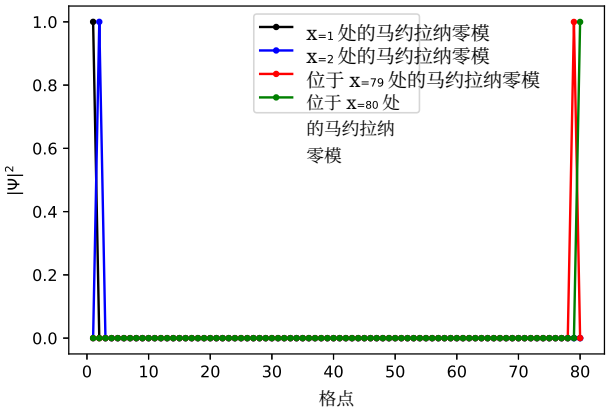


图13：对参数值为 $\mu_1=\mu_2=0$、$t_1=\Delta_1=1$ 和$t_2=\Delta_2=1$ 的含 $N=80$个格点的 MKC 平行系统进行数值计算得到的马约拉纳零模。我们观察到马约拉纳零模位于格点指标1、2、79和80处，这与此前从示意图推断的结果一致。

其中 $t_1\neq\Delta_1$ 和/或 $t_2\neq\Delta_2$，对于有限尺寸晶格，我们已经在图 6(c) 和 (d) 中通过数值计算看到，当 $t_1=t_2$ 和 $\Delta_1=\Delta_2$ 时，不存在马约拉纳零点。因此，我们构造存在马约拉纳点时的波函数，即图6(e)和(f)，其中 $t_1=-t_2$ 和 $\Delta_1=\Delta_2$。我们仅以方程 26 中强调的情况为例。在此，我们得到 e^{-q} 的四个值，即 $\frac{-\mu_1\pm\sqrt{\mu_1^2-4(t_1^2-\Delta_1^2)}}{2(t_1+\Delta_1)}$ 和 $\frac{\mu_2\pm\sqrt{\mu_2^2-4(t_2^2-\Delta_2^2)}}{2(t_2+\Delta_2)}$。我们需要有限尺寸晶格的驻波解，因此需要将四个 e^{-q} 值分别写成 $R_1e^{\pm i\theta_1}$和 $R_2e^{\pm i\theta_2}$。因此，我们提出波函数的一般形式,

$$\begin{aligned}\Psi(l)=&A_1R_1^le^{il\theta_1}+A_2R_1^le^{-il\theta_1}\\ &+B_1R_2^le^{il\theta_2}+B_2R_2^le^{-il\theta_2},\end{aligned} \tag{29}$$

其中 A_1、A_2、B_1 和 B_2 为常数，l 是格点索引。根据由式 26 推导出的递推关系（通过另一种等价的手征分解）[29],，可以在晶格外的虚拟格点处施加开放边界条件，即 $\Psi(l=0)\ =\Psi(l=-1)\ =0=\Psi(l=N+1)\ =\Psi(l=N+2)$。根据这四个边界条件，可以推导出在

母体1		母体2		MZM 本征向量
相	$\frac{\mathrm{sgn}(t_1)}{\mathrm{sgn}(\Delta_1)}$	相	$\frac{\mathrm{sgn}(t_2)}{\mathrm{sgn}(\Delta_2)}$	
topo	+	topo	+	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle-\|11\rangle)\ \|01\rangle,\ \|10\rangle\}$ 或 $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle-\|11\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle-\|10\rangle)\}$
	+		-	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle-\|10\rangle)\ \|00\rangle,\ \|11\rangle\}$ 或 $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle-\|10\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle+\|11\rangle)\}$
	-		+	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle+\|10\rangle)\ \|00\rangle,\ \|11\rangle\}$ 或 $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle+\|10\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle-\|11\rangle)\}$
	-		-	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle+\|11\rangle)\ \|01\rangle,\ \|10\rangle\}$ 或 $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle+\|11\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle+\|10\rangle)\}$
topo	+	triv		$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle-\|11\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle-\|10\rangle)\}$
	-			$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle+\|11\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle+\|10\rangle)\}$
triv		topo	+	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle-\|11\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle+\|10\rangle)\}$
			-	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle+\|11\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle-\|10\rangle)\}$

表 I：对于两个母系统的不同拓扑表征，MKC 平行系统的零本征向量，t_i 和 Δ_i、$i\in\{1,2\}$的符号函数之比，以及边界条件。

大小为 N 的有限晶格上存在任意 MMZM 驻波本征函数的量子化条件，

$$\frac{R_1^{2(N+2)}+R_2^{2(N+2)}-2R_1^{N+2}R_2^{N+2}\cos(2(N+2)\theta_+)}{R_1^2+R_2^2-2R_1R_2\cos 2\theta_+}=\frac{R_1^{2(N+2)}+R_2^{2(N+2)}-2R_1^{N+2}R_2^{N+2}\cos(2(N+2)\theta_-)}{R_1^2+R_2^2-2R_1R_2\cos 2\theta_-},\tag{30}$$

其中 $\theta_\pm=\frac{1}{2}(\theta_1\pm\theta_2)$。我们已在上一小节解释了，为何参数值为 $t_1=-t_2=-t$、$\Delta_1=\Delta_2=\Delta$ 和 $\mu_1=\mu_2=\mu$ 时会出现马约拉纳点。对于这一特定情况，$R_2e^{i\theta_2}=R_1e^{i\pi}e^{i\theta_1}$ 由分量哈密顿量 2 的条件推导得出。将其代入上文的量子化条件式（30），可得到与在 II D 2 小节中得到的相同的 μ 值，其中 $\mu=2\sqrt{t^2-\Delta^2}\cos\frac{n\pi}{N+2}$、$n\in\{1,...,N+1\}$ 对应 $N=even$，而 $\mu=2\sqrt{t^2-\Delta^2}\cos\frac{n\pi}{N+1}$ $n\in\{1,...,N\}$ 和 $\mu=2\sqrt{t^2-\Delta^2}\cos\frac{n\pi}{N+3}$ $n\in\{1,...,N+2\}$ 对应 $N=odd$。更详细的计算可参见补充材料 S1 A。基于相同的示意性基础，并结合式（29）的形式，可以证明，在马约拉纳点处，马约拉纳零模的两个本征函数具有如下形式，

$$\Psi_1(l)\sim R_1^l(1+(-1)^l)e^{il\theta_1^1}-R_1^l(1+(-1)^l)e^{-il\theta_1^1},\tag{31a}$$

$$\Psi_2(l)\sim R_1^{l+1}(1+(-1)^{l+1})e^{i(l+1)\theta_1^2}-R_1^{l+1}(1+(-1)^{l+1})e^{-i(l+1)\theta_1^2}\tag{31b}$$

其中，对于 $N=even$，有 $\theta_1^1=\theta_1^2=\frac{n\pi}{N+2}$；对于$N=odd$，有 $\theta_1^1=\frac{n\pi}{N+1}$ 和 $\theta_1^2=\frac{n\pi}{N+3}$。上述表达式仅包含局域在系统左边缘或其附近的本征函数。局域在右边缘或其附近的乘法型马约拉纳本征函数，可通过变换 $l\to N+1-l$类似地推导。这里还需指出，量子化条件比我们刚才讨论的特定情形更为一般；人们可以推导出在不同 $\theta_1^1=\theta_1^2=\frac{n\pi}{N+2}$ 下 $N=even$s的条件，而对于$N=odd$，则可在 $\theta_1^1=\frac{n\pi}{N+1}$ 时找到这些条件。我们在补充材料 S1A 中展示了 $\theta_1^2=\frac{n\pi}{N+3}$ 的情形。

讨论的情形，并且可以推导出在 $\theta_2-\theta_1=\delta$ 的不同取值下 μ s的条件；对于 $R_1=R_2$，则可在$|t_1/\Delta_1|=|t_2/\Delta_2|$时找到这些条件。我们在补充材料 S1A 中展示了$\delta=\frac{2\pi}{3}$ 的情形。

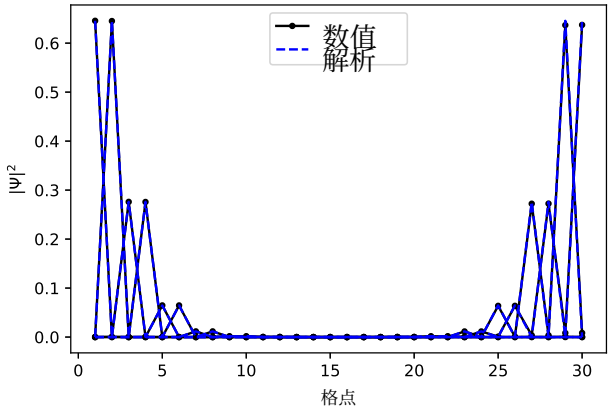


图14：我们比较了在参数范围 $t_1=-t_2=-1$、$\Delta_1=\Delta_2=0.5$和$\mu_1=\mu_2=2\sqrt{t_1^2-\Delta_1^2}\cos(\pi/(N+2))$ 内、晶格尺寸为$N=30$时数值推导和解析推导得到的马约拉纳零模波函数概率密度。我们看到，数值表达式与解析表达式相符。

5 无需编织的量子门操作

根据表 I，MKC 可实现大量可分的双量子比特态和最大纠缠双量子比特态。例如，如果每条母体 KC 都处于拓扑相，并且对于每个 i，$\frac{t_i}{\Delta_i}$ 的符号函数为 $+$，且 $i\in\{1,2\}$，则可实现贝尔态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle-|11\rangle)$，以及可分态$\{|01\rangle,\ |10\rangle\}$。将 $\frac{t_2}{\Delta_2}$ 的符号函数改为 $-$，便可轻松逆转这种情况，使贝尔态改为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle-|10\rangle)$，而可分态则变为$\{|00\rangle,\ |11\rangle\}$。还可以有其他可分态集合或最大纠缠态的组合，不过当两个母系统都处于拓扑相时，在相空间的给定点上，只有一种宇称具有纠缠。此外，如果要保留互补宇称的纠缠，同时将可分态集合变为贝尔态，则需调节其中一个母体在相空间中的参数，直至其经历拓扑相变并进入平庸相。由于 MKC 在相空间中的传

输对应于特定双量子比特态的制备，包括量子比特纠缠，因此乘法拓扑相有望成为实现拓扑保护量子计算方案的平台。首先，在基于编织的拓扑量子计算方案中，对于每个母体都处于拓扑相的情况，可以利用其简并态流形，这一点颇为有趣，尽管由此得到的 MKC 在基态中对应偶数个粒子。其次，似乎还可以通过调节系统，使其经历母体的拓扑相变，并结合某些参数比值宇称的变化，从而实现拓扑量子计算方案。这种基于“相空间”的拓扑量子计算方案将在未来的工作中进行探讨。

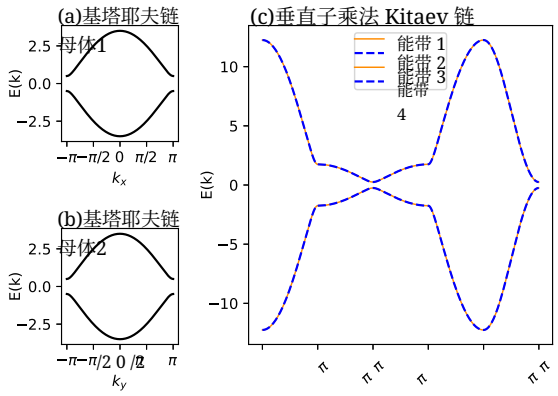


图15： (a) 母体 Kitaev 链 1 ($t_1 = 1.0$,$\mu_1 = 1.5$, $\Delta_1 = 1.0$) 沿 k_x 轴的色散关系，(b) 母体 Kitaev 链 2 ($t_2 = 1.0$, $\mu_2 = 1.5$, $\Delta_2 = 1.0$) 沿 k_y 轴的色散关系，以及 (c) 由两个母体构成的垂直子乘法 Kitaev 链哈密顿量的色散关系。

III 垂直母体链的子哈密顿量

为进一步探索乘性相实现奇异现象的潜力，我们现在对一个具有两条彼此垂直的母体 Kitaev 链的 MKC 哈密顿量进行刻画，从而构造一个二维而非一维的 MKC。也就是说，我们分别取一条母体 Kitaev 链沿 $\hat{}x$ 轴，第二条母体 Kitaev 链沿 $\hat{}y$ 轴。于是，母哈密顿量和子哈密顿量具有如下形式：

$$H_{p,1}(k_x) = -(2t_1 \cos k_x + \mu_1)\tau^z + 2\Delta_1 \sin k_x \tau^y, \quad (32a)$$

$$H_{p,2}(k_y) = -(2t_2 \cos k_y + \mu_2)\sigma^z + 2\Delta_2 \sin k_y \sigma^y, \quad (32b)$$

$$\begin{aligned} H^c_{\perp}(k_x, k_y) =& [-(2t_1 \cos k_x + \mu_1)\tau^z + 2\Delta_1 \sin k_x \tau^y] \\ & \otimes [(2t_2 \cos k_y + \mu_2)\sigma^z + 2\Delta_2 \sin k_y \sigma^y] \end{aligned} \quad (32c)$$

该系统与平行乘法 Kitaev 链有显著不同，这不仅是因为两条母体链的垂直取向会沿 ($\hat{}x \pm \hat{}y$) 和 $-(\hat{}x \pm \hat{}y)$ 方向产生次近邻（NNN）跃迁，也因为正如我们将要展示的，在边缘模的表达式中缺少两个母哈密顿量之间的关联。我们首先从体能谱入手，然后尝试通过威尔逊环方法推断垂直MKC的拓扑性质，以此对其进行具体刻画。接下来将介绍临界点附近的准粒子速度，随后我们将深入研究开放边界条件下的垂直MKC。我们开始分析在特定参数窗口中可能作为边缘模获得的马约拉纳零模，但我们必须转而研究实空间的反

.....描述了如何真正理解边缘模的局域化，并通过示意图和数值计算进一步加以说明。边缘态的解析表达式及其对应的量子化条件，随后自然地从实空间分解中得出。我们将看到，尽管此处的马约拉纳零模更契合组成母体的参数区域，但它与我们在 MKC 平行乘法 Kitaev 链情形中遇到的马约拉纳零模相似，因此

我们也可以将垂直情形下得到的马约拉纳零模称为马约拉纳零模。我们当然会将这一点留待后文，在证明其与平行情形中的马约拉纳零模相似之后再作讨论。

垂直乘法基塔耶夫链的体能谱

与平行乘法 Kitaev 链的情况类似，我们首先刻画垂直MKC体态的谱性质。这里考虑最简单的情况：两个母哈密顿量具有相同的参数集，但一个是 $\hat{}x$ 方向动量 k_x 的函数，另一个是 $\hat{}y$ 方向动量 k_y 的函数。每个母体 KC 都处于拓扑非平庸相，在布里渊区边缘（本例中为 1）处的最小直接带隙为 $2(2t_i - \mu_i)$（i=1,2），如图15(a)和(b)所示。能带在高对称点 0 和 π 附近分别呈二次型色散。垂直MKC的最小直接带隙类似地位于 (k_x，k_y) =(π，π) 处，大小为 $2(2t_1 - \mu_1)(2t_2 - \mu_2)$，本例中为 0.5。这已经表明，与平行情况相比，垂直MKC的谱呈现出更丰富的变化；在平行情况下，体态中的MKC本征值是体态中母体 Kitaev 链本征值的乘积。直接带隙在 (k_x，k_y) =(π，0) 和 (0，π) 处增大，分别近似达到各母体直接带隙在 $k_x = \pi$ 或 $k_y = \pi$ 处的数值。然而，在 (k_x，k_y) =(0，0) 处，直接带隙显著增大，超过母体的最大直接带隙。该数值体现了谱的乘法性质，即它等于每个母体最大直接带隙的平方。

B 垂直 MKC 的威尔逊环和瓦尼尔谱

与平行乘法 Kitaev 链的情况类似，我们现在刻画子哈密顿量的拓扑，而不假设我们知道子哈密顿量是如何由母体哈密顿量构造而成的，

也不假设其拓扑如何由母体的拓扑不变量决定。因此，我们计算垂直MKC不同拓扑相的威尔逊谱。对于一维系统，威尔逊环如式（10）所示；对于垂直MKC的二维布里渊区，则可推广为：固定 k_y，沿 k_x 布里渊区计算威尔逊环；固定 k_x，沿 k_y布里渊区计算威尔逊环。我们采用基于占据态投影算符的威尔逊环矩阵的另一种定义，

$$\mathcal{W}_{mn} = \langle u_m(\boldsymbol{k}_0)| \lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} P(\boldsymbol{k}_i) |u_n(\boldsymbol{k}_0)\rangle , \tag{33}$$

并计算沿 k_x BZ 的环路在给定 k_y 时的矩阵分量，如补充材料章节的方程（S75）中所示，

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_{11} &= \langle v_{1+}(k_{x0})| \lim_{R\to\infty} \left[\prod_{i=R}^{1} P_{1+}(k_{xi})\right] |v_{1+}(k_{x0})\rangle , \\
\mathcal{W}_{22} &= \langle v_{1-}(k_{x0})| \lim_{R\to\infty} \left[\prod_{i=R}^{1} P_{1-}(k_{xi})\right] |v_{1-}(k_{x0})\rangle , \\
\mathcal{W}_{12} &= \mathcal{W}_{21} = 0.
\end{aligned} \tag{34}$$

类似地，可以求出另一种情况：对于给定的 k_x，环路沿着 k_y BZ；最终的 Wannier谱为

$$\begin{aligned}
\nu_i = \nu_x &= \nu^{(1)} \bmod 1 \quad \text{for BZ along } k_x \text{ and given } k_y, \\
\nu_i = \nu_y &= \nu^{(2)} \bmod 1 \quad \text{for BZ along } k_y \text{ and given } k_x,
\end{aligned} \tag{35}$$

其中，$\nu^{(j)}, j \in \{1,2\}$ 是由第 i 个母哈密顿量产生的 Wannier谱。

随后，这些威尔逊环随 k_x 和 k_y 变化时的绕数 便刻画了二维相的拓扑。然而，我们发现这两个量分别关于 k_x 或 k_y 保持常数，因此可以完全通过 $\mathcal{W}(k_x)$ （$\mathcal{W}(k_y)$）来刻画拓扑，其中 k_x (k_y) 固定，并对 k_y (k_x) 积分。因此，我们计算了对每个 k_y (k_x) 沿 k_x (k_y) 积分得到的威尔逊环的 Wannier中心电荷谱，并将其展示在图 16 中。我们发现，当其中一个母哈密顿量处于拓扑非平庸态时，谱呈现拓扑非平庸的 Wannier电荷中心值。当两个母体都拓扑平庸时，谱是拓扑平庸的；但当两个母体都具有拓扑性质，且子系统实际上也具有拓扑非平庸性时，谱同样是拓扑平庸的。在两个母体都具有拓扑性质的区域内，我们有（ν_x，ν_y）≡(0.5，0.5)，其中 $\nu_{x/y}$ 分别指由威尔逊环算符 $\mathcal{W}_x$ 和 $\mathcal{W}_y$ 得到的 Wannier谱。

C 临界点附近的准粒子速度：

临界点附近的双能带 KC 狄拉克哈密顿量，例如 $\mu \sim -2t$，当 $k \to 0$ 时，其准粒子会以固定速度沿系统长度方向传播。另一方面，对于坐标轴互相垂直的 MKC，则有

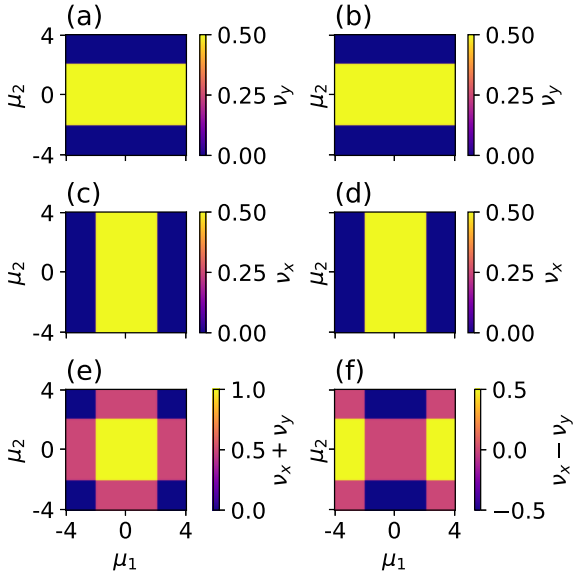


图 16：由威尔逊环算符导出的 MKC 垂直系统的 Wannier谱$\nu_{x/y}$（色条），$\mathcal{W}_x$分别对应（a）和（b），$\mathcal{W}_y$分别对应（c）和（d）。我们还在第 3 行左侧和右侧分别绘出了 $\nu_x \pm \nu_y$ （e）和（f）。

如下狄拉克哈密顿量，例如 $\mu_1 \sim -2t_1$，当 $k_x \to$ 为 0 时，

$$\begin{aligned}
H_{D,x}(k_x,k_y) = &- m_1(2t_2\cos k_y + \mu_2)\Gamma^{zz} \\
&+ 2\Delta_1(2t_2\cos k_y + \mu_2)k_x\Gamma^{yz} \\
&- 2m_1\Delta_2 \sin k_y \Gamma^{zy} + 4\Delta_1\Delta_2 k_x \sin k_y \Gamma^{yy},
\end{aligned} \tag{36}$$

其中 $m_1 = 2t_1 + \mu_1$ 和 $\Gamma^{ij} = \tau^i\sigma^j$。该临界点处的准粒子对应于母系统1。二重简并能量表示为：

$$\begin{aligned}
E(k_x,k_y) = &\pm\sqrt{4\Delta_1^2k_x^2 + m_1^2} \\
&\times \sqrt{4\Delta_2^2\sin^2 k_y + (2t_2\cos k_y + \mu_2)^2}.
\end{aligned} \tag{37}$$

同样，在由母系统2导出的临界点附近展开，设 $\mu_2 \sim -2t_2$ 且 $k_y \to 0$，狄拉克哈密顿量可表示为：

$$\begin{aligned}
H_{D,y}(k_x,k_y) = &- m_2(2t_1\cos k_x + \mu_1)\Gamma^{zz} + 2m_2\Delta_1 \sin k_x \Gamma^{yz} \\
&- 2\Delta_2(2t_1\cos k_x + \mu_1)k_y\Gamma^{zy} \\
&+ 4\Delta_1\Delta_1 k_y \sin k_x \Gamma^{yy},
\end{aligned} \tag{38}$$

其中 $m_2 = 2t_2 + \mu_2$。此时的二重简并能量为，

$$\begin{aligned}
E(k_x,k_y) = &\pm\sqrt{4\Delta_1^2\sin^2 k_x + (2t_1\cos k_x + \mu_1)^2} \\
&\times \sqrt{4\Delta_2^2k_y^2 + m_2^2}.
\end{aligned} \tag{39}$$

最后，我们在临界点附近展开 MKC 垂直哈密顿量，其中 $\mu_1 \sim -2t_1$ 和 $\mu_2 \sim -2t_2$ 均满足 $k_x, k_y \to 0$，由此得到狄拉克哈密顿量：

$$H_{D,x,y}(k_x,k_y) = -m_1 m_2 \Gamma^{zz} - 2m_1\Delta_2 k_y \Gamma^{zy} + 2\Delta_1 m_2 k_x \Gamma^{yz} + 4\Delta_1\Delta_2 k_x k_y \Gamma^{yy}. \tag{40}$$

再次由最后一个表达式可得，二重简并能量如下：

$$E(k_x,k_y) = \pm\sqrt{4\Delta_1^2 k_x^2 + m_1^2}\cdot\sqrt{4\Delta_2^2 k_y^2 + m_2^2}. \tag{41}$$

从所有狄拉克哈密顿量的能量可以明显看出，准粒子的群速度同时具有 x 和 y 分量。当两个母体都接近临界点时，群速度的形式如下：

$$\mathbf{v}(k_x,k_y) = \pm 4\Delta_1\Delta_2(k_y \mathbf{e_x} + k_x \mathbf{e_y}). \tag{42}$$

此情形下，$\boldsymbol{k}$ 空间中的速度场呈现反涡旋结构。通过沿 z 方向耦合，堆叠与 MKC 垂直系统类似的布洛赫哈密顿量结构，或许有助于构造更多奇异相；构造过程类似于利用 KC 布洛赫哈密顿量构造陈绝缘体。

D 具有开放边界条件的垂直乘法 Kitaev 链

为开始表征具有开放边界条件的垂直MKC，我们考虑一种薄板几何：在 $\hat{}x$ 方向采用开放边界条件，系统宽度 L_x 有限；在 $\hat{}y$ 方向则采用周期边界条件，且 L_y 无限。我们首先表征系统在这些边界条件下的谱性质，并发现了这些条件下存在额外拓扑保护边界模的证据。随后，我们对这些拓扑保护边界态进行更详细的表征，重点关注态的局域化。我们还通过若干极限情形下对边界模的额外解析表征，支持数值结果。

1 开放边界条件下的谱

为了与体态性质进行比较，我们还研究了开放边界条件下垂直MKC的谱。首先考虑沿$\hat{}x$方向具有开放边界条件、对应于 $L_x = 80$的宽薄板几何结构。结果如图 17 所示。

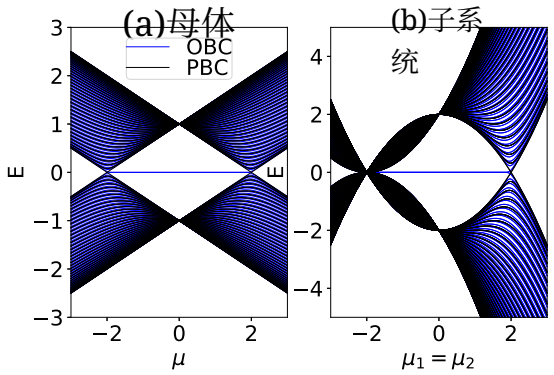


图 17：沿 x 方向采用开放边界条件（黑色）和沿 x 方向采用周期性边界条件（蓝色）时的薄板能谱，其中 $L_x = 80$ 对于 (a) 母体 KC，$t = 1 = \Delta$ 随 μ 变化；(b) 垂直子体 MKC，$t_1 = t_2 = 1 = \Delta_1 = \Delta_2$ 和 $k_y = 0$ 随相应参数变化。$\mu_1 = \mu_2$.

2 垂直母体链的边缘模

我们首先考虑垂直MKC仅在一个方向上有限时的边缘模。相关过程的详细内容已在补充材料 S1 B 中给出。

- 对于上述哈密顿量，我们先在$\hat{}x$方向施加开放边界条件。为求出边缘态的表达式，我们.....

  为 MKC 假设一个束缚态试探波函数

垂直哈密顿量，取 $k_x \to iq_x$，然后寻找零向量。我们得到零能态存在的以下条件，

$$2t_1 \cosh q_x + \mu_1 = \pm 2\Delta_1 \sinh q_x. \tag{43}$$

考虑 $x = 0$ 和 $x \to$ 处边界条件后，零能量边缘态的表达式推导见补充材料第 S1B 节，列于下方：

$$\Psi(j,k_y)_\pm \sim \left[\left(\frac{-\mu_1 + \sqrt{\mu_1^2 - 4(t_1^2 - \Delta_1^2)}}{2(\Delta_1 \pm t_1)}\right)^j - \left(\frac{-\mu_1 - \sqrt{\mu_1^2 - 4(t_1^2 - \Delta_1^2)}}{2(\Delta_1 \pm t_1)}\right)^j\right] e^{ik_y y} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix}. \tag{44}$$

值得注意的是，沿 y 方向的平移不变性表明，马约拉纳模式局域在平行于 y 轴的两条边缘上。在 y 方向施加周期边界条件仅会将动量 k_y 量子化，不会影响边缘态的解析形式。

类似地，可以按照补充材料第 S1B 节所述，根据局域化 $k_y \to iq_y$，计算沿 y 方向采用开放边界条件时的边缘态表达式。在这种情况下，零能量满足以下关系：

$$2t_2 \cosh q_y + \mu_2 = \pm 2\Delta_2 \sinh q_y. \tag{45}$$

在这种情况下，为了简化记号，我们定义 $M_1 = -(2t_1 \cos k_x + \mu_1)$ 和 $R_1 = 2\Delta_1 \sin k_x$，并求得.....的边缘态

形式，对于方程（45）中的两个符号，

$$\Psi(k_x,l)_{\pm}\sim e^{ik_x x}\left[\left(\frac{-\mu_2+\sqrt{\mu_2^2-4(t_2^2-\Delta_2^2)}}{2(\Delta_2\pm t_2)}\right)^l - \left(\frac{-\mu_2-\sqrt{\mu_2^2-4(t_2^2-\Delta_2^2)}}{2(\Delta_2\pm t_2)}\right)^l\right]\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\b_3\\b_4\end{pmatrix}. \tag{46}$$

这里，我们注意到，沿 x 方向（而非前一种情况中的 y 方向）的平移不变性，对应于沿着从左到右的整个边缘分布的马约拉纳模式。再次沿 x 实施周期性边界条件，并不会改变边缘模表达式的解析形式，只会使 k_x 量子化。

最后，我们通过局域化 $k_x\to iq_x$ 和 $k_y\to iq_y$，考虑沿 x 和 y 两个方向均采用开放边界条件。如补充材料 S1B 节所推导，我们得到如下关系，

$$[(2t_1\cosh q_x+\mu_1)^2-4\Delta_1^2\sinh^2 q_x] \times[(2t_2\cosh q_y+\mu_2)^2-4\Delta_2^2\sinh^2 q_y]=0. \tag{47}$$

上述条件给出四种符号组合，因此局域化哈密顿量的零向量如下所示，

$$\Phi=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\pm1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\\mp1\end{pmatrix}. \tag{48}$$

但由于我们的张量积结构，还存在另一组由最大纠缠贝尔态组成的本征向量。我们将在 E 节中推导不同边界条件下垂直MKC系统的实空间哈密顿量，并得出马约拉纳零模本征向量的显式形式，届时这一歧义便会得到澄清。

E 实空间中的垂直 MKC 哈密顿量 ace

为方便起见，我们再次重新定义 II D 节中的记号，$\gamma_{j,+}=(\gamma_{j,+,\uparrow},\gamma_{j,+,\downarrow})$ 和 $\gamma_{j,-}=(\gamma_{j,-,\uparrow},\gamma_{j,-,\downarrow})^T$。于是，垂直母体情形下的 MKC 哈密顿量可表示如下，

$$\begin{aligned}H^c_{MKC,\perp}=&\frac{1}{2}\sum_{i,j}-(t_1-\Delta_1)i\gamma_{i,j,+}(t_2\sigma^z-i\Delta_2\sigma^y)\gamma_{i+1,j+1,-}\\&-(t_1+\Delta_1)i\gamma_{i+1,j+1,+}(t_2\sigma^z+i\Delta_2\sigma^y)\gamma_{i,j,-}\\&-(t_1-\Delta_1)i\gamma_{i,j,+}(t_2\sigma^z+i\Delta_2\sigma^y)\gamma_{i+1,j-1,-}\\&-(t_1+\Delta_1)i\gamma_{i+1,j-1,+}(t_2\sigma^z-i\Delta_2\sigma^y)\gamma_{i,j,-}\\&-\mu_2(t_1-\Delta_1)i\gamma_{i,j,+}\sigma^z\gamma_{i+1,j,-}\\&-\mu_2(t_1+\Delta_1)i\gamma_{i+1,j,+}\sigma^z\gamma_{i,j,-},\\&-\mu_1 i\gamma_{i,j,+}(t_2\sigma^z-i\Delta_2\sigma^y)\gamma_{i,j+1,-}\\&-\mu_1 i\gamma_{i,j+1,+}(t_2\sigma^z+i\Delta_2\sigma^y)\gamma_{i,j,-}\\&-\mu_1\mu_2 i\gamma_{i,j,+}\sigma^z\gamma_{i,j,-}.\end{aligned} \tag{49}$$

我们执行与平行MKC情形中相同的相似变换，从而将哈密顿量表达式变为：

$$\begin{aligned}H^c_{MKC,\perp}=&\frac{i}{2}\sum_{i,j}[-(t_1-\Delta_1)(t_2-\Delta_2)\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i+1,j+1,\downarrow,-}\\&-(t_1+\Delta_1)(t_2+\Delta_2)\tilde\gamma_{i+1,j+1,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,-}\\&-(t_1-\Delta_1)(t_2+\Delta_2)\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i+1,j-1,\downarrow,-}\\&-(t_1+\Delta_1)(t_2-\Delta_2)\tilde\gamma_{i+1,j-1,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,-}\\&-\mu_2(t_1-\Delta_1)\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i+1,j,\downarrow,-}\\&-\mu_2(t_1+\Delta_1)\tilde\gamma_{i+1,j,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,-}\\&-\mu_1(t_2-\Delta_2)\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i,j+1,\downarrow,-}\\&-\mu_1(t_2+\Delta_2)\tilde\gamma_{i,j+1,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,-}-\mu_1\mu_2\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,-}]\\&+\frac{i}{2}\sum_{i,j}[-(t_1-\Delta_1)(t_2+\Delta_2)\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i+1,j+1,\uparrow,-}\\&-(t_1+\Delta_1)(t_2-\Delta_2)\tilde\gamma_{i+1,j+1,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,-}\\&-(t_1-\Delta_1)(t_2-\Delta_2)\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i+1,j-1,\uparrow,-}\\&-(t_1+\Delta_1)(t_2+\Delta_2)\tilde\gamma_{i+1,j-1,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,-}\\&-\mu_2(t_1-\Delta_1)\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i+1,j,\uparrow,-}\\&-\mu_2(t_1+\Delta_1)\tilde\gamma_{i+1,j,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,-}\\&-\mu_1(t_2+\Delta_2)\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i,j+1,\uparrow,-}\\&-\mu_1(t_2-\Delta_2)\tilde\gamma_{i,j+1,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,-}-\mu_1\mu_2\tilde\gamma_{i,j,\downarrow,+}\tilde\gamma_{i,j,\uparrow,-}],\\=&H_{1,\perp}+H_{2,\perp}.\end{aligned} \tag{50}$$

根据图 18 所示的示意图，即使系统具有有限的长度和宽度，也可以推断马约拉纳零模存在的可能性及其位置。我们在图 18(a) 和 (b) 中介绍相对于一个格点的所有相互作用，分别对应分量哈密顿量 $H_{\perp,1}$ 和 $H_{\perp,2}$，然后优先考虑 $t_{1,2}=\Delta_{1,2}$ 的情形（图 18(c) 和 (d)），此时我们发现，对于适当的 $\mu_{1,2}$，存在马约拉纳零模母体哈密顿量。

- 情形 *1*：我们首先考察母体1具有拓扑性质的情形，此时 $\mu_1=0$；而母体2是平庸的，此时$\mu_2>2t_2$。图 18(f) 和 (g) 显示，$H_{1,\perp}$ 和$H_{2,\perp}$ 在正方晶格中平行于 y轴的两条边缘上均存在马约拉纳零模。图 19(a) 中的数值模拟与这一解析计算相符。示意图进一步说明，沿每条边缘局域的态均为二重简并，因为式（50）中的每个分量哈密顿量都贡献了一个马约拉纳边缘态。
- 情况 *2*：现在，我们考虑处于拓扑相的母体2，其中 $\mu_2=0$；并要求 $\mu_1>2t_1$，使母体1处于平庸相。从图 18(e) 和 (f) 中分别针对 $H_{1,\perp}$ 和 $H_{2,\perp}$ 的结果可以看出，正方晶格中沿着平行于 x 轴的两条边存在马约拉纳零模。同样，每个哈密顿量分量都会在每条边缘局域化一个马约拉纳态，从而使马约拉纳零模呈现二重简并。图 19(d) 中的数值模拟结果与我们的解析表达式一致。

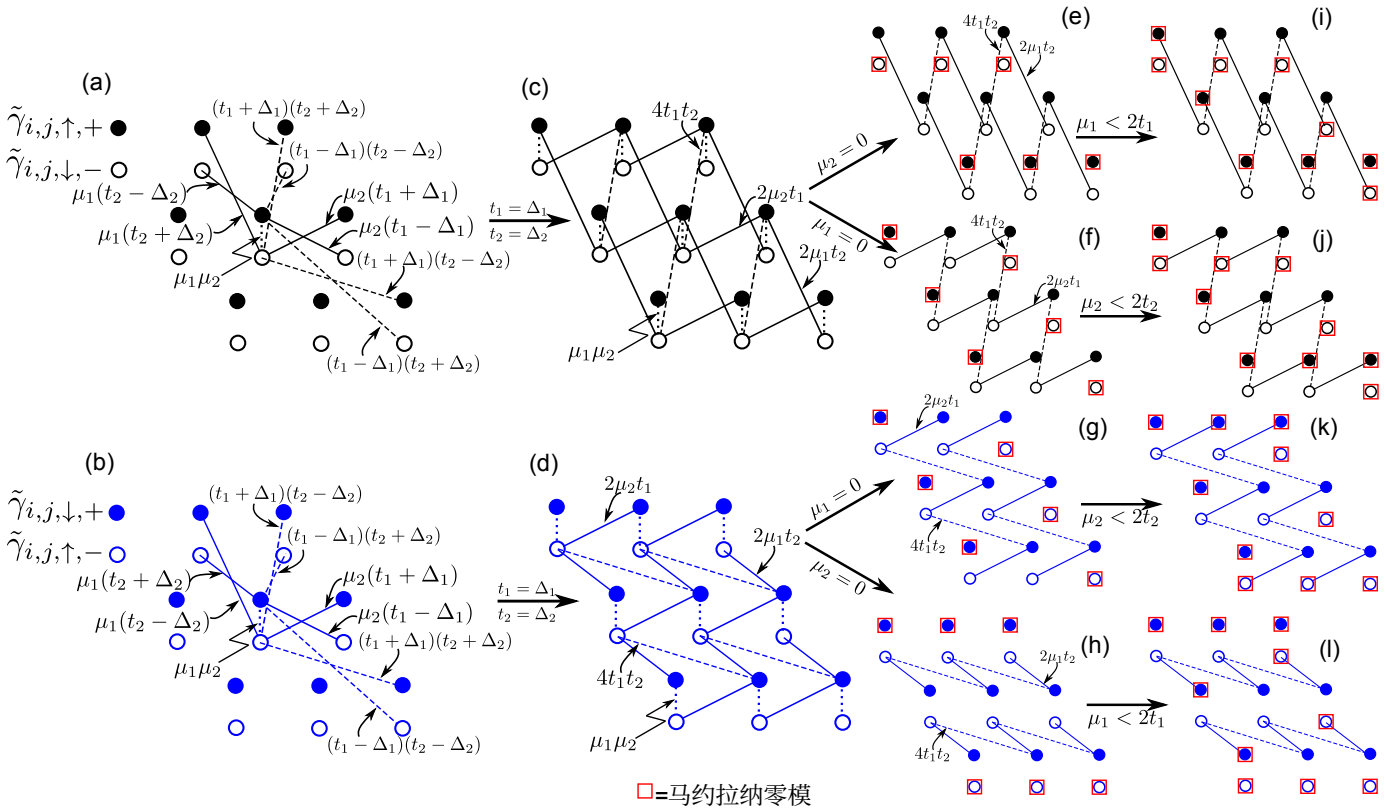


图 18：使用与图 10 相同的配色方案和符号，以马约拉纳费米子相互作用示意垂直MKC系统：（a）对应 $t_1 = \Delta_1$，（b）对应 $t_1 = \Delta_1$ 和 $\mu_1 = \mu_2 = 0$。如前所述，对于沿 y 方向具有平移对称性的有限 x 方向薄层，沿整个 y 轴都存在马约拉纳边缘模。

• 情形 *3*：最后，我们考虑每个母体都具有拓扑非平庸性的情形。图 18(i)、(j) 和 (k)、(l) 分别展示了 $\mu_1 = 0$，$\mu_2 < 2t_2$ 和$\mu_1 < 2t_1$，$\mu_2 = 0$的情况。请注意，虚线与实线交替连接，表明存在若干彼此解耦的基塔耶夫链。图 18(i) 和 (l) 中的条件 $\mu_1 < 2t_1$，以及图 18(j) 和 (k) 中的 $\mu_2 < 2t_2$，自然意味着每条彼此解耦的基塔耶夫链都具有拓扑非平庸性，因此在边缘处有马约拉纳零模。值得注意的是，此时有限尺寸系统的整个周界上都存在马约拉纳零模，且具有二重简并（$H_{1,\perp}$ 和 $H_{2,\perp}$ 各自提供一个马约拉纳零模）。这也与图 19(g) 和 (h) 中的数值模拟结果一致。此外，角处似乎存在三个简并的马约拉纳态。这可能表明存在高阶[30] 拓扑边缘模，但我们将推迟到后续文章再讨论这一问题。

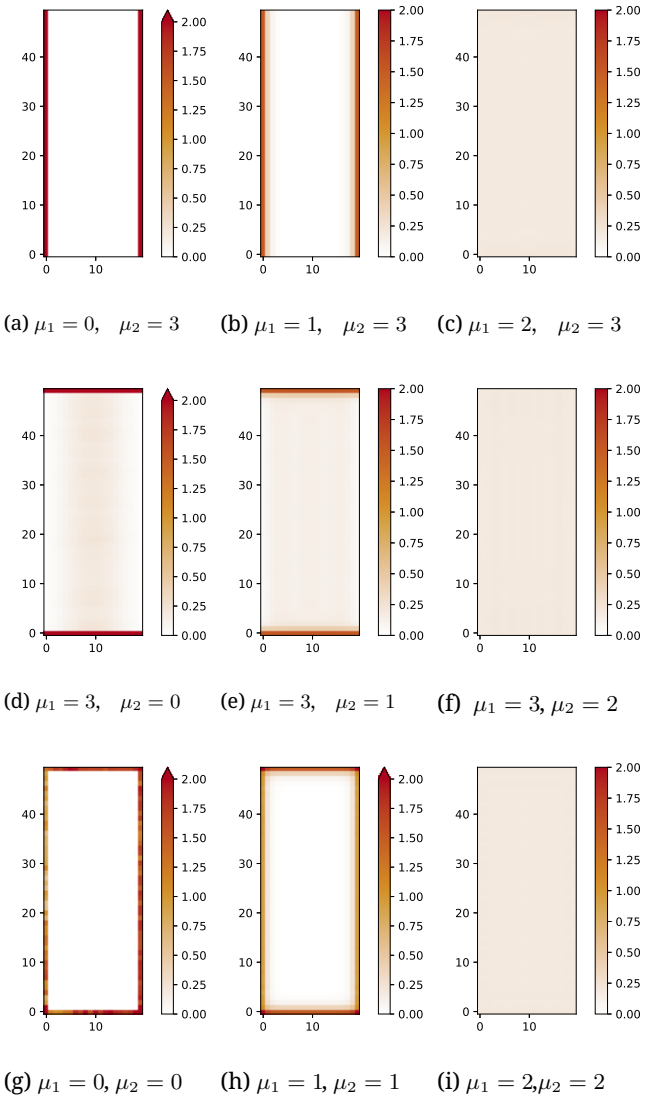
接下来，我们讨论由式 52a 和 52b 中 MKC 垂直系统的分量布洛赫哈密顿量导出的拓扑不变量。

1 通过手征分解表征垂直 *MKC* 的拓扑：

可以为每个分量哈密顿量分别推导出两个独立的布洛赫哈密顿量，$H_{\perp,1}$ 和 $H_{\perp,2}$ 其方法是将每个分量哈密顿量在马约拉纳基下的形式，与具有次近邻相互作用的二维双带基塔耶夫链的哈密顿量形式进行比较，

$$H^{c}_{\mathrm{MKC},\perp} = \frac{1}{2}\sum_{k} \tilde{\mathbf{c}}^{\dagger}_{k,1}\mathcal{H}_{\perp,1}(k)\tilde{\mathbf{c}}_{k,1} + \frac{1}{2}\sum_{k} \tilde{\mathbf{c}}^{\dagger}_{k,2}\mathcal{H}_{\perp,2}(k)\tilde{\mathbf{c}}_{k,2}, \tag{51}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\perp,1}(k) = &-[2\mu_2 t_1\cos k_x + 2\mu_1 t_2\cos k_y \\ &+ 2(t_1t_2+\Delta_1\Delta_2)\cos(k_x+k_y) \\ &+ 2(t_1t_2-\Delta_1\Delta_2)\cos(k_x-k_y) + \mu_1\mu_2]\sigma^z \\ &+ [2\mu_2\Delta_1\sin k_x + 2\mu_1\Delta_2\sin k_y \\ &+ 2(t_2\Delta_1+t_1\Delta_2)\sin(k_x+k_y) \\ &+ 2(t_2\Delta_1-t_1\Delta_2)\sin(k_x-k_y)]\sigma^y = \mathbf{d}_1(k)\cdot\boldsymbol{\sigma},\end{aligned} \tag{52a}$$



(a) $\mu_1 = 0, \quad \mu_2 = 3$ (b) $\mu_1 = 1, \quad \mu_2 = 3$ (c) $\mu_1 = 2, \quad \mu_2 = 3$

(d) $\mu_1 = 3, \quad \mu_2 = 0$ (e) $\mu_1 = 3, \quad \mu_2 = 1$ (f) $\mu_1 = 3, \mu_2 = 2$

(g) $\mu_1 = 0, \mu_2 = 0$ (h) $\mu_1 = 1, \mu_2 = 1$ (i) $\mu_1 = 2, \mu_2 = 2$

图 19：MKC 垂直系统中有限 20×50 薄板在不同 μ_1 和 μ_2取值下零能马约拉纳模的密度图。所有系统均满足 $t_1 = t_2 = 1$和$\Delta_1 = \Delta_2 = 1$。

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\perp,2}(k) = -\,&[2\mu_2 t_1 \cos k_x + 2\mu_1 t_2 \cos k_y \\ &+ 2(t_1 t_2 - \Delta_1\Delta_2)\cos(k_x + k_y) \\ &+ 2(t_1 t_2 + \Delta_1\Delta_2)\cos(k_x - k_y) + \mu_1\mu_2]\sigma^z \\ &+ [2\mu_2\Delta_1 \sin k_x - 2\mu_1\Delta_2 \sin k_y \\ &+ 2(t_2\Delta_1 - t_1\Delta_2)\sin(k_x + k_y) \\ &+ 2(t_2\Delta_1 + t_1\Delta_2)\sin(k_x - k_y)]\sigma^y = \mathbf{d}_2(k)\cdot\boldsymbol{\sigma},\end{aligned} \tag{52b}$$

where $\tilde{c}_{k,1} = (\tilde{c}_{k,\uparrow}, \tilde{c}^\dagger_{-k,\downarrow})^T$ and $\tilde{c}_{k,2} = (\tilde{c}_{k,\downarrow}, \tilde{c}^\dagger_{-k,\uparrow})^T$.
已有研究表明，对于二维基塔耶夫链，当k_x 和 k_y发生变化时，其拓扑由布洛赫矢量所产生的涡旋刻画。然而，在二维布里渊区中，类似布洛赫矢量场的表示方式可能并不适合进行恰当的可视化——化这些涡旋。相反，我们仍采用绕数来刻画马约拉纳零模，并展示如何确定拓扑，以及在开放边界条件下某条边缘上存在的马约拉纳零模数量。我们将使用

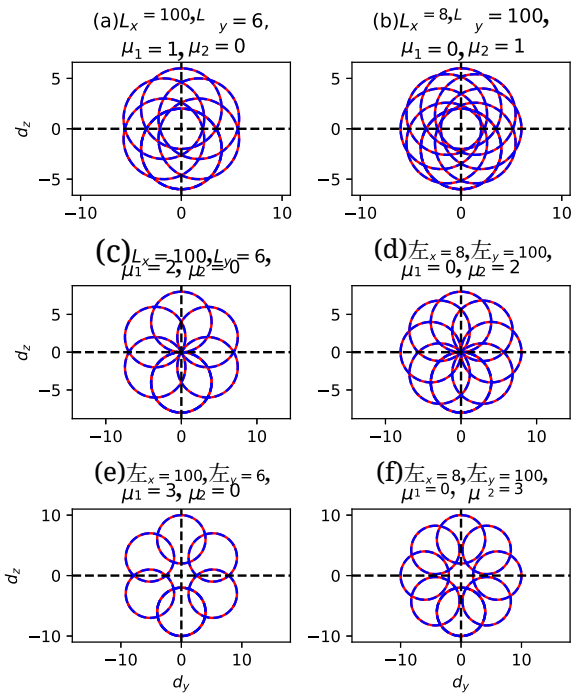


图 20：在 x 和 y 两个方向均采用周期性边界条件时，布洛赫矢量（$d_{1,y}$、$d_{1,z}$）（红色）和（$d_{2,y}$、$d_{2,z}$）（蓝色虚线）的绕数。(a)、(c)、(e) 是由周期性边界条件$L_x = 100$ 和 $L_y = 6$ 形成的闭合曲线，其中 6 个圆表示 y 方向边缘处的情况，分别对应 (a) $\mu_1 = 1$、 $\mu_2 = 0$（存在马约拉纳零模），(c) $\mu_1 = 2$、$\mu_2 = 0$（临界）和 (e) $\mu_1 = 3$、$\mu_2 = 0$（沿 y 边缘平庸）。类似地，(b)、(d)、(f) 是由周期性边界条件 $L_x = 8$和 $L_y = 100$ 形成的闭合曲线，其中 8 个圆表示 x 方向边缘处的情况，分别对应 (b) $\mu_1 = 0$、 $\mu_2 = 1$（存在马约拉纳零模），(d)$\mu_1 = 0$、$\mu_2 = 2$（临界）和 (f) $\mu_1 = 0$、 $\mu_2 = 3$（沿 x 边缘平庸）。布洛赫矢量$\mathbf{d}_1$ 和$\mathbf{d}_2$ 重合，因此两个分量哈密顿量的情况相似。所有情况均假设 $t_1 = 1 = t_2 = \Delta_1 = \Delta_2$。

矩阵 $d_{1,y/z}(k_x, k_y)$ 和 $d_{2,y/z}(k_x, k_y)$ 在 x 和 y 方向均采用周期性边界条件，因此矩阵元 $d_{1,2}(n, m)$ 由 $k_x = \frac{2\pi n}{L_x}$ 和 $k_y = \frac{2\pi m}{L_y}$ 给出，其中 $n \in \{0, ..., L_x\}$ 和$m \in \{0, ..., L_y\}$、 L_x 和 L_y 分别是 x 和 y 方向上的格点数（我们分别取 $L_x + 1$ 或 $L_y + 1$ 值作为 n 和 m，仅仅是为了闭合曲线；讨论时只考虑前 L_x 和 L_y 个值）。随后，我们将 $d_{1,y}$ 的第 n 行与 $d_{1,z}$ 的第 n 行作图比较，并对$d_{2,y}$ 和 $d_{2,z}$进行同样处理。由于沿给定行的 k_x 随给定的 k_y 变化，我们得到 y 方向边缘上的马约拉纳零模，其形式为 L_y 条闭合曲线：当$\mu_1 < 2t_1$时包围原点，当 $\mu_1 = 2t_1$ 时接触原点，而当 $\mu_1 > 2t_1$时不包含原点。为清晰起见，我们在图 20 (a)、(c) 和 (e) 中展示了$L_x = 100$ 和 $L_y = 6$ 的这一结果，这对应于图 18(g) 和 (h)，其—

对应于图 18(g) 和 (h)。此外，对于$t_{1,\,2} = \Delta_{1,\,2}$的情况，其中闭合曲线在双带 KC 中是一个圆，我们还看到，通过连接 6 个圆心形成的多边形也会在 $\mu_2 < 2t_2$时包围原点；在 $\mu_2 = 2t_2$ 时与原点相交（仅当 L_y 为偶数时如此；否则当L_y 为奇数时可能不会恰好相交）；而在$\mu_2 > 2t_2$时不包围原点。由此可以推断，一个方向上的马约拉纳零模绕数会受到垂直方向绕数的调制，这种调制同时体现在角度和半径上。然而，这并不能显示另一方向上的马约拉纳零模数量——要回答这一问题，必须将 $d_{1,\,y}$ 的第 m 列与 $d_{1,\,z}$ 的第 m 列作图比较，并对$d_{2,\,y}$ 和 $d_{2,\,z}$进行类似处理。为清晰起见，我们再次在图 20(b)、(d) 和 (f) 中展示 $L_x = 8$ 和 $L_y = 100$ 的作图结果；通过比较变化的 k_y 和给定的 k_x，可以看到 7 条包围原点的闭合曲线，这对应于 $\mu_2 < 2t_2$ 时 x 方向边缘上的 7 个马约拉纳零模，如图 18(e) 和 (h) 的示意图所示。

曲线的轨迹如下所示，其中 $t_1 = \Delta_1$ 随k_x 变化而 k_y 保持不变（详细计算见补充材料S3），

$$2t_1\sqrt{M_2^2+R_2^2} = (\cos\theta d_{1,y} + \sin\theta d_{1,z})^2 + \left(\cos\theta d_{1,z} - \sin\theta d_{1,y} + \mu_1\sqrt{M_2^2+R_2^2}\right)^2, \tag{53}$$

其中我们记 $M_2 = M_2 + 2t_2\cos\ k_y$、 $R_2 = 2\Delta_2\sin k_y$和 $\tan\theta = \frac{R_2}{M_2}$。本质上， θ是第二个母哈密顿量的布洛赫角。我们观察到，绕数曲线在旋转坐标空间中呈现为一个圆，并受到 k_y 值处色散关系的调制。然而，这并不影响绕数非零的条件，该条件仍可写为 $|\mu_1| < 2t_1$。另一种情况下的轨迹也可以类似地计算得到。

这里必须注意MKC 平行系统与MKC 垂直系统在绕数表征上的差异。对于MKC 平行系统，图1已表明，绕数在两个分量哈密顿量之间流动，因此，即使至少有一个母系统具有拓扑性，由两个系统导出的绕数绝对值之和仍为二。然而，这种流动在MKC 垂直系统中并不存在。两个分量哈密顿量的绕数曲线彼此重合，因此，当我们沿某一特定方向改变动量时，两个分量哈密顿量始终具有相等的绕数。这里的差异在于，当人们改变 k_x 方向时绕数的性质，相较于

k_y 方向，当然要对给定曲线保持垂直动量不变。甚至图 18 也与我们的判断一致：对于相同的参数值，两个分量哈密顿量都必须在同一条边上产生马约拉纳零模。

2 通过分量哈密顿量和纠缠研究 *MKC* 垂直系统的边缘态:

最后，可以进一步推导出此前在第三节 D 2 中得到的边缘态表达式的显式形式，其中边缘来自方程 52a 中的分量布洛赫哈密顿量和

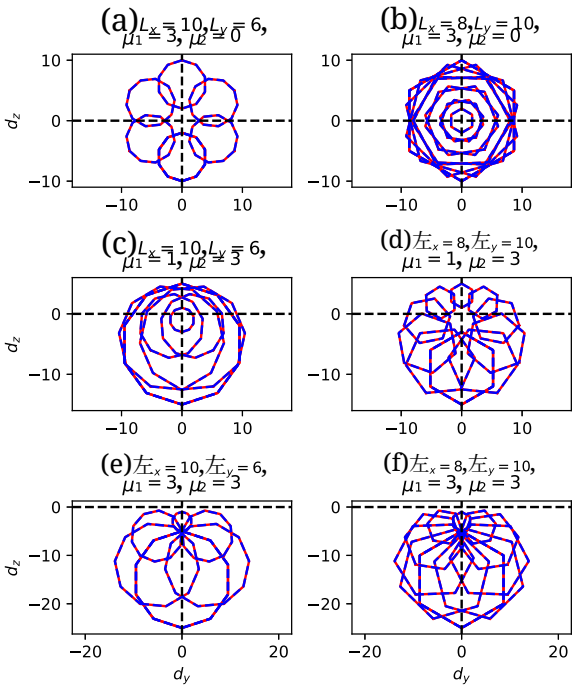


图 21：在 x 和 y 两个方向均施加周期性边界条件时，由布洛赫矢量（$d_{1,\,y}$，$d_{1,\,z}$）（红色）和（$d_{2,\,y}$，$d_{2,\,z}$）（蓝色虚线）得到的绕数。我们可以更清楚地看到，由于垂直部分的影响，绕数曲线沿一个方向发生了调制；如果两条边都较短，这些曲线实际上是多边形。不过，由于绕数取决于体态，这不应改变最终结果。(a)、(c)、(e) 是由周期性边界条件产生的闭合曲线 $L_x = 10$ 和 $L_y = 6$，其中 6 个圆表示 (a) 中沿 y 方向边缘的情况$\mu_1 = 3$, $\mu_2 = 1$（沿 x 方向有马约拉纳零模，沿 y 方向平凡），(c)$\mu_1 = 1$, $\mu_2 = 3$（沿 y 方向有马约拉纳零模，沿 x 方向平凡），

(e)$\mu_1 = 3$, $\mu_2 = 3$（两条边缘均平庸）。类似地，(b)、(d)、(f) 是由周期性边界条件$L_x = 8$和 $L_y = 10$ 导致的闭合曲线，其中 8 个圆展示了 (b)$\mu_1 = 3$, $\mu_2 = 1$（x 方向存在马约拉纳零模，y 方向平庸）、(d)$\mu_1 = 1$, $\mu_2 = 3$（y 方向存在马约拉纳零模，x 方向平庸）以及 (f)$\mu_1 = 0$, $\mu_2 = 3$（两条边缘均平庸）在 x 方向边缘上的情况。布洛赫矢量$\mathbf{d}_1$ 和$\mathbf{d}_2$ 重合，因此两种分量哈密顿量的情况相似。所有情况均假设 $t_1 = 1 = t_2 = \Delta_1 = \Delta_2$。

52b. 我们已在补充材料的 S1B 节中分别推导出由 $H_{\perp,1}$ 和 $H_{\perp,2}$ 得到的零能量关系。这里我们假设 x 和 y 方向均采用开放边界条件，以便在两个方向上实现局域化，如 $k_x \to iq_x$ 和 $k_y \to iq_y$ 所示。

$$[(2t_1\cosh q_x + \mu_1) \pm 2\Delta_1\sinh q_x] \times [(2t_2\cosh q_y + \mu_2) \pm 2\Delta_2\sinh q_y] = 0, \tag{54a}$$

$$[(2t_1\cosh q_x + \mu_1) \pm 2\Delta_1\sinh q_x] \times [(2t_2\cosh q_y + \mu_2) \mp 2\Delta_2\sinh q_y] = 0. \tag{54b}$$

我们假设 x 方向上的格点数为 L_x

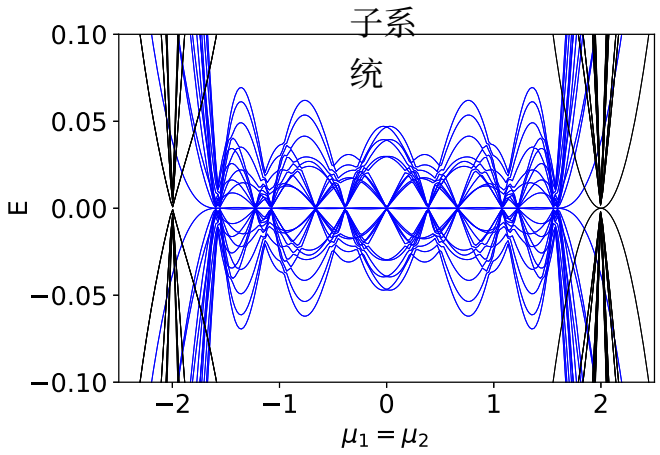


图 22：开放边界条件（蓝色）和周期性边界条件（黑色）下，沿 x 和 y 两个方向的能谱 E 随 $\mu_1 = \mu_2$ 的变化，其中 $t_1 = t_2 = 1$ 和 $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.5$ 对应 $L_x = 6$ 和 $L_y = 7$。我们看到，沿 x 方向采用开放边界条件时有 6 个无能隙点，对应 7 重简并；沿 y 方向采用开放边界条件时有 7 个无能隙点，对应 6 重简并。

y 方向上的格点数为 L_y。考虑边界条件，在 $x = 0$, $L_x + 1$ 对于每个 y，以及 $y = 0$, $L_y + 1$ 对于每个 x，其中无论另一垂直轴方向上的格点为何，波函数都需要为零，因此，对于 $H_{\perp,1}$ 的符号函数（+, +），我们有

$$\Psi(j,l) \sim [p^j_{1,+} - p^j_{1,-}][s^l_{1,+} - s^l_{1,-}], \tag{55}$$

对于符号函数（+, −），以及 $H_\perp$

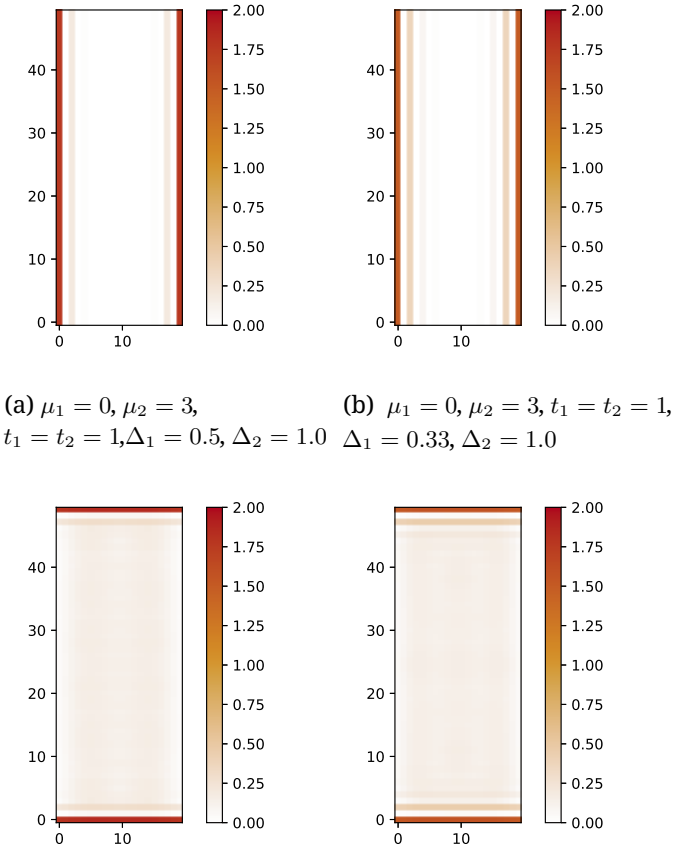
$$\Psi(j,l) \sim [p^j_{1,+} - p^j_{1,-}][s^l_{2,+} - s^l_{2,-}], \tag{56}$$

where we have $p_{1,\pm} = \frac{-\mu_1 \pm \sqrt{\mu_1^2 - 4(t_1^2 - \Delta_1^2)}}{2(t_1 + \Delta_1)}$, $p_{2,\pm} = \frac{-\mu_1 \pm \sqrt{\mu_1^2 - 4(t_1^2 - \Delta_1^2)}}{2(t_1 - \Delta_1)}$, $s_{1,\pm} = \frac{-\mu_2 \pm \sqrt{\mu_2^2 - 4(t_2^2 - \Delta_2^2)}}{2(t_2 + \Delta_2)}$, and $s_{2,\pm} = \frac{-\mu_2 \pm \sqrt{\mu_2^2 - 4(t_2^2 - \Delta_2^2)}}{2(t_2 - \Delta_2)}$. The boundary conditions at $x = L_x + 1$ and $y = L_y + 1$ again imply,

$$\begin{aligned} \mu_1 &= 2\sqrt{t_1^2 - \Delta_1^2}\cos\frac{n_x\pi}{L_x+1}, \quad n_x \in \{1, ..., L_x\} \\ \mu_2 &= 2\sqrt{t_2^2 - \Delta_2^2}\cos\frac{n_y\pi}{L_y+1}, \quad n_y \in \{1, ..., L_y\}. \end{aligned} \tag{57}$$

那么，能量 E 随 $\mu_1 = \mu_2 = \mu$变化的图中应总共有 $L_x \times L_y$ 个无能隙点。其中，由于 μ_1 产生的无能隙点具有 L_y重简并（简并度由 y 边缘上的格点数决定），而由于 μ_2 产生的无能隙点具有 L_x 重简并（简并度由 x 轴方向上的格点数决定），如图 22 所示。

与 MKC 平行系统的情形一样，可以根据母哈密顿量的拓扑性质或施加的边界条件，证明马约拉纳零模（MZMs）是纠缠态或乘积态。与 MKC 平行系统不同，MKC 垂直系统还增加了



(a) $\mu_1 = 0, \mu_2 = 3$, $t_1 = t_2 = 1$,$\Delta_1 = 0.5$, $\Delta_2 = 1.0$

(b) $\mu_1 = 0, \mu_2 = 3, t_1 = t_2 = 1$, $\Delta_1 = 0.33$, $\Delta_2 = 1.0$

(c) $\mu_1 = 3, \mu_2 = 0$, $t_1 = t_2 = 1$、$\Delta_1 = 1$、$\Delta_2 = 0.5$

(d) $\mu_1 = 3$、$\mu_2 = 0$、$t_1 = t_2 = 3$, $\Delta_1 = 1$、$\Delta_2 = 0.33$

图23：有限厚度的 MKC 垂直系统薄板中，零能马约拉纳模在 μ_1、μ_2 以及 t_1、t_2取不同值时的密度图。所有系统均有$\Delta_1 = \Delta_2 = 1$。

其优势在于，即使两个母体都是拓扑的，也可以通过将一条边缘粘合在一起或不将其打开来改变纠缠。我们再次从沿两个方向的局域化 $k_x \to iq_x$ 和 $k_y \to iq_y$ 开始，因此$H_{\perp,1}$ 和 $H_{\perp,2}$ 可表示为：

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\perp,1}(iq_x, iq_y) = &-[(\mu_1 + 2t_1\cosh q_x)(\mu_2 + 2t_2\cosh q_y) \\ &+ 4\Delta_1\Delta_2\sinh q_x \sinh q_y]\sigma^z \\ &+ i[2\Delta_1\sinh q_x(\mu_2 + 2t_2\cosh q_y) \\ &+ 2\Delta_2\sinh q_y(\mu_1 + 2t_1\cosh q_x)]\sigma^y \end{aligned} \tag{58a}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\perp,2}(iq_x, iq_y) = &-[(\mu_1 + 2t_1\cosh q_x)(\mu_2 + 2t_2\cosh q_y) \\ &- 4\Delta_1\Delta_2\sinh q_x \sinh q_y]\sigma^z \\ &+ i[2\Delta_1\sinh q_x(\mu_2 + 2t_2\cosh q_y) \\ &- 2\Delta_2\sinh q_y(\mu_1 + 2t_1\cosh q_x)]\sigma^y \end{aligned} \tag{58b}$$

要从上述表达式中得到零特征值，我们必须满足以下条件：

$$[(2t_1\cosh q_x+\mu_1)\mp 2\Delta_1\sinh q_x] \times[(2t_2\cosh q_y+\mu_2)\mp 2\Delta_2\sinh q_y]=0, \tag{59}$$

对于分量$H_{\perp,\,1}$和，

$$[(2t_1\cosh q_x+\mu_1)\mp 2\Delta_1\sinh q_x] \times[(2t_2\cosh q_y+\mu_2)\pm 2\Delta_2\sinh q_y]=0, \tag{60}$$

对于分量 $H_{\perp,\,2}$。示意图图 18 显示，马约拉纳零模局域的边缘取决于母体的拓扑性质。但如果某个方向未开放或采用周期边界条件，就无法观察到马约拉纳零模，尽管相关母体具有拓扑性质。我们来考虑 $\mathrm{sgn}(t_i)=\mathrm{sgn}(\Delta_i)$, $i\in\{1,2\}$ 的方程59条件，

$$[(2t_1\cosh q_x+\mu_1)-2\Delta_1\sinh q_x] \times[(2t_2\cosh q_y+\mu_2)-2\Delta_2\sinh q_y]=0. \tag{61}$$

如果沿 *x* 和 *y* 两个方向均采用开放边界条件，且两个母体均具有拓扑性质，则有 $2t_1\cosh q_x+\mu_1=2\Delta_1\sinh q_x$和 $2t_2\cosh q_y+\mu_2=2\Delta_2\sinh q_y$，将其代入方程58a和58b后可知 $\mathcal{H}_{\perp,\,2}$ 消失。实际上，我们使用的是 MKC 垂直系统的完整基底，由四个自由度构成：$(\tilde{c}_{\boldsymbol{k},\uparrow},\ \tilde{c}_{\boldsymbol{k},\downarrow},\ \tilde{c}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k},\uparrow},\ \tilde{c}^{\dagger}_{-\boldsymbol{k},\downarrow})^T$，它结合了两个分量的自由度。在这个基底中，由 $\mathcal{H}_{\perp,\,1}(iq_x,\ iq_y)$ 导出的零特征向量为：

$$|\Psi\rangle_{MZM}=\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle-|11\rangle),|01\rangle,|10\rangle\}, \tag{62}$$

其中 $|0\rangle=(1,\ 0)^T$和 $|1\rangle=(0,\ 1)^T$。

现在，假设母体*1*是拓扑相，而母体*2*是平庸相，同时我们在 *x* 和 *y* 两个方向上都保留开放边界条件，那么只需满足条件 $2t_1\cosh q_x+\mu_1=2\Delta_1\sinh q_x$。将恒等式代入方程58a 和 58b，可得在具有四个自由度的完整基底中，零特征向量为：

$$|\Psi\rangle_{MZM}=\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle-|11\rangle),\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle-|10\rangle)\}. \tag{63}$$

需要注意的是，当 *y* 方向未开启或采用周期性边界条件时，上述本征向量同样成立，因此第二个母体的拓扑性质并不重要。此时只需满足条件 $2t_1\cosh q_x+\mu_1=2\Delta_1\sinh q$。详细计算见补充材料S1 B节。与 MKC 平行系统相比，这里的额外之处在于，不仅可以通过母体的拓扑性质，还可以通过两个方向上的边界条件，来调控最大纠缠贝尔态与乘积态之间的纠缠。我们提供了一张小表（表II），列出了在各种母体拓扑性质和边界条件下所有可能的马约拉纳零模本征向量。该表仅列出边缘 $x=0$ 和 $y=0$处的 MMZM特征向量。

对于其他边缘处的特征向量，只需对两个母体都将$\mathrm{sgn}(t_i)$ $\mathrm{sgn}(\Delta_i)$~~从 +~~ 改为 $-$，反之亦然，即可求得。当两个母体都具有拓扑性质时，我们将得到总共四个特征向量，其中正负两种符号各有两个共同特征向量。因此，此时得到的马约拉纳零模具有与平行情形下的乘性马约拉纳零模（*MMZMs*）相似的纠缠结构，因此也可以将 MKC 垂直系统中的马约拉纳零模称为乘性马约拉纳零模（*MMZMs*）。

3 无需编织的并行量子门：

通过改变系统参数，在给定宇称下，垂直乘性基塔耶夫链系统中的马约拉纳零模也可以形成纠缠态和可分离双量子比特态。不过，在这种情况下，还可以执行并行量子门操作：由于垂直系统中的马约拉纳零模对数与系统周界成正比（每个方向均采用开放边界条件时），因此可以同时对大量马约拉纳零模对执行受控非门操作。结合并行量子门操作这一潜力，通过操控乘性拓扑相来实现通用量子计算方案的全部潜力，值得进一步研究；但这超出了本文的研究范围。

IV 讨论与结论

在这项工作中，我们引入了乘性马约拉纳零模（MMZM）的概念。它是一种零能、受对称性保护的张量积态或最大纠缠贝尔态，由一个或多个未配对 马约拉纳零模组成。我们发现，近期提出的乘法拓扑相[10] 通过体态-边界对应实现了这类零模；具体而言，我们考虑了一种用于实现此类乘法拓扑相的典范哈密顿量，它由两个基塔耶夫链哈密顿量的对称性保护张量积构成。当前，许多重要研究聚焦于在实验中对未配对马约拉纳零模及单个拓扑量子比特进行确凿验证；与此同时，寻找可扩展拓扑量子计算机的实用平台仍然至关重要。本文讨论的结果与实现由许多拓扑量子比特构成的可扩展系统密切相关，因为乘性马约拉纳零模是由多个受对称性保护的未配对马约拉纳零模组成的独立态。此外，本文结果表明，可以有机会受控地引入纠缠，使马约拉纳本征向量中源自两个母体的自由度彼此纠缠，这或许有助于执行拓扑量子计算方案中的量子门操作。

我们通过构造一维以及二维乘法 Kitaev 链模型，展示乘法拓扑相的丰富性。这些模型能够实现多种拓扑非平庸相。模型由两个母体基塔耶夫链哈密顿量构成，它们依赖于相同的动量分量或相互垂直的动量分量，并通过对称性保护的张量积构造相结合。我们通过刻画体拓扑和

母体1			母体2			MZM 本征向量
相	$\frac{\mathrm{sgn}(t_1)}{\mathrm{sgn}(\Delta_1)}$	x-边界	条件相	$\frac{\mathrm{sgn}(t_1)}{\mathrm{sgn}(\Delta_1)}$	y-BC	
topo	+	OBC	topo	+	OBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle - \|11\rangle)\ \|01\rangle,\ \|10\rangle\}$
	+	OBC		-	OBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle - \|10\rangle)\ \|00\rangle,\ \|11\rangle\}$
	-	OBC		+	OBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle + \|10\rangle)\ \|00\rangle,\ \|11\rangle\}$
	-	OBC		-	OBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle + \|11\rangle)\ \|01\rangle,\ \|10\rangle\}$
topo	+	OBC	topo	+,-	PBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle - \|11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle - \|10\rangle)\}$
	-	OBC		+,-	PBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle + \|11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle + \|10\rangle)\}$
	+,-	PBC		+	OBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle - \|11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle + \|10\rangle)\}$
	+,-	PBC		-	OBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle + \|11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle - \|10\rangle)\}$
topo	+	OBC	triv			$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle - \|11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle - \|10\rangle)\}$
	-	OBC				$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle + \|11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle + \|10\rangle)\}$
triv			topo	+	OBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle - \|11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle + \|10\rangle)\}$
				-	OBC	$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(\|00\rangle + \|11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\|01\rangle - \|10\rangle)\}$

表II：不同拓扑表征下，两个母系统的 MKC 垂直系统本征向量，t_i 与 Δ_i、$i \in \{1,2\}$的符号函数比值，以及边界条件。

相应的拓扑保护边界态，为研究这些系统奠定基础，并着重考察所得乘法拓扑相对母体拓扑的依赖关系。

我们首先通过证明体能谱的本征值是母体基塔耶夫链体能谱本征值的乘积，来刻画乘法 Kitaev 链的体态。这表明，子系统的拓扑相在任一母体发生能隙闭合之前都是稳定的。我们还探讨了如何在体态中刻画乘法型拓扑，并发现威尔逊环谱能够成功刻画某些乘法拓扑相，但当每个母体均为拓扑非平庸时，也可能指示平庸拓扑。不过，我们证明，在特定条件下，可以将 MKC 分解为手征子扇区，从而更全面地刻画其拓扑性质。这利用了此类哈密顿量的自由度受对称性约束、锁定为赝自旋这一事实，由此得到的绕数能够成功刻画本文所考虑的、由平庸与非平庸母体的不同组合实现的所有拓扑非平庸态。然而，全面刻画乘法拓扑相仍是未来研究中的一个重要课题。

乘法 Kitaev 链哈密顿量可能具有不同的拓扑保护边界态。我们考虑可块对角化为手征子扇区的子哈密顿量。根据母体的拓扑，子系统的马约拉纳零模可能呈现张量积结构或最大纠缠贝尔态结构。对于平行情形，我们通过计算绕数来刻画体态中子系统手征子扇区的拓扑；这些绕数似乎具有某种代数结构，正如人们从角动量相加中可能推断的那样。我们发现，在两个平行母体 Kitaev 链的情形下，子系统手征子扇区的绕数之间存在一种关系。通过实空间哈密顿量表达式，我们以示意方式表明，在适当的参数条件下，对于一维（平行）情形，马约拉纳零模局域于最外侧和次外侧格点；对于二维（垂直）情形，则沿两条或四条边缘局域。

类似地，我们展示了垂直情形下的绕数计算，它准确反映了马约拉纳零模的数量及其局域化所在的边缘。我们还得到了有限尺寸 MKC 系统中拓扑保护边界模存在的量子化条件，并表明该条件在一个较简单的情形下与数值结果一致。更复杂的情形仍有待研究，例如《补充材料》S1A 节中的一个例子。这表明，无论在平行情形还是垂直情形下，子体 MKC 中拓扑保护的乘性马约拉纳零模通常并非母哈密顿量态的简单张量积。相反，它们更普遍地具有涌现性质，体现在其局域化、纠缠和拓扑鲁棒性上。

未来的研究将探索对称性较低的系统中的拓扑表征；在这类系统中，乘性马约拉纳零模预计会呈现更一般的形式。未来研究也将探讨如何控制纠缠性质，这对于发展更鲁棒、更灵活的拓扑量子计算方案具有巨大潜力。这些研究可包括进一步探索编织方案的潜力；对于每个母体均为拓扑非平庸的情形，其零能态的简并流形尤其值得研究。此外，还可进一步研究拓扑保护量子计算中编织方案的替代方案。

致谢 - 我们衷心感谢 J. E. Moore、I.A.Day 和 R.Calderon 分享的宝贵见解。

通讯作者 - 有关材料的咨询和请求，请联系 A.M.C.（邮箱：cooka@pks.mpg.de）。

[1] A Yu Kitaev，《任意子容错量子计算》，《物理年鉴》**303**，2–30（2003）。

[2] David Aasen、Michael Hell、Ryan V Mishmash、Andrew Hig-

ginbotham，Jeroen Danon、Martin Leijnse、Thomas S Jespersen、Joshua A Folk、Charles M Marcus、Karsten Flensberg 等，“迈向基于马约拉纳的量子计算的里程碑”，《物理评论X辑》6，031016（2016年）。[3] Gr´egory Str¨ubi、Wolfgang Belzig、Mahn-Soo Choi 和 Christoph Bruder，“输运实验中马约拉纳费米子边缘态的干涉与噪声特征”，《物理评论快报》107，136403（2011年）。[4] Berthold J¨ack、Yonglong Xie、Jian Li、Sangjun Jeon、B Andrei Bernevig 和 Ali Yazdani，“在拓扑保护边缘通道中观测到马约拉纳零模”，Science 364，1255–1259（2019年）。[5]Torsten Karzig、Christina Knapp、Roman M Lutchyn、Parsa Bonderson、Matthew B Hastings、Chetan Nayak、Jason Alicea、Karsten Flensberg、Stephan Plugge、Yuval Oreg 等，“利用马约拉纳零模实现可扩展设计，以保护拓扑量子计算免受准粒子中毒影响”，Physical Review B 95，235305（2017年）。[6] Biao Lian、Xiao-Qi Sun、Abolhassan Vaezi、Xiao-Liang Qi 和 Shou-Cheng Zhang，“基于手性马约拉纳费米子的拓扑量子计算”，美国国家科学院院刊 115，10938–10942（2018年）。[7]Stephan Plugge、Asbjørn Rasmussen、Reinhold Egger 和 Karsten Flensberg，“马约拉纳盒量子比特”，New Journal of Physics 19，012001（2017年）。[8] Martin Leijnse 和 Karsten Flensberg，“双量子点中的宇称量子比特与简化版马约拉纳束缚态”，Physical Review B 86，134528（2012年）。[9] Alessio Calzona、Nicolas P. Bauer 和 Bj¨orn Trauzettel，“拓扑马约拉纳量子比特上 CNOT门的整体实现”，SciPost Phys. Core 3，14（2020年）。[10] Ashley M. Cook 和 Joel E. Moore，“乘法拓扑相”，Communications Physics 5，262（2022年）。[11] A Yu Kitaev，“量子线中的未配对马约拉纳费米子”，Physics-Uspekhi 44，131–136（2001年）。[12] Falko Pientka、Anna Keselman、Erez Berg、Amir Yacoby、Ady Stern 和 Bertrand I. Halperin，“平面约瑟夫森结中的拓扑超导”，Phys. Rev. X 7，021032（2017年）。[13] Michael Hell、Martin Leijnse 和 Karsten Flensberg，“用于构建马约拉纳束缚态网络的二维平台”，Phys. Rev. Lett. 118，107701（2017年）。[14] R. M. Lutchyn、E. P. A. M. Bakkers、L. P. Kouwenhoven、P. Krogstrup、C. M. Marcus 和 Y. Oreg，“超导体—半导体异质结构中的马约拉纳零模”，Nature Reviews Materials 3，52–68（2018年）。[15] V. Mourik、K. Zuo、S. M. Frolov、S. R. Plissard、E. P. A. M. Bakkers 和 L. P. Kouwenhoven，“混合超导体—半导体纳米线器件中的马约拉纳费米子特征”，Science 336，1003–1007（2012年）。[16] S. Nadj-Perge、I. K. Drozdov、B. A. Bernevig 和 Ali Yazdani，“在超导体上的磁性原子链中实现马约拉纳费米子的方案”，Phys. Rev. B 88，020407（2013年）。[17] Jason Alicea，“可调半导体器件中的马约拉纳费米子”，Phys. Rev. B 81，125318（2010年）。[18] Jason Alicea、Yuval Oreg、Gil Refael、Felix von Oppen 和 Matthew P. A. Fisher，“一维线网络中的非阿贝尔统计与拓扑量子信息处理”，Nature Physics 7，412–417（2011年）。[19] Jason Alicea，“在固态系统中探索马约拉纳费米子的新方向”，Reports on Progress in Physics 75，076501（2012年）。[20] C.W.J. Beenakker，“在超导体中搜寻马约拉纳费米子”，Annual Review of Condensed Matter Physics 4，113–136（2013年），https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-030212-184337.[21] Chetan Nayak、Steven H. Simon、Ady Stern、Michael Freed- man 和 Sankar Das Sarma，《非阿贝尔任意子与拓扑量子计算》，《现代物理评论》80，1083–1159（2008）。[22] Jay D. Sau、Roman M. Lutchyn、Sumanta Tewari 和 S. Das Sarma，《利用半导体异质结构实现拓扑量子计算的通用新平台》，《物理评论快报》104，040502（2010）。[23] Ching-Kai Chiu、Jeffrey CY Teo、Andreas P Schnyder 和 Shin- sei Ryu，《具有对称性的拓扑量子物质分类》，《现代物理评论》88，035005（2016）。[24] Christoph W Groth、Michael Wimmer、Anton R Akhmerov 和 Xavier Waintal，《Kwant：量子输运软件包》，New Journal of Physics 16，063065（2014）。[25]D´aniel Varjas、T´omas ¨O Rosdahl 和 Anton R Akhmerov，《Qsymm：算法对称性搜寻与对称哈密顿量生成》，New Journal of Physics 20，093026（2018）。[26] A. Alexandradinata、Xi Dai 和 B. Andrei Bernevig，《反演对称拓扑绝缘体的 Wilson 环表征》，《物理评论B辑》89，155114（2014）。[27] Nico Leumer、Magdalena Marganska、Bhaskaran Muralidharan 和 Milena Grifoni，《有限基塔耶夫链的精确特征向量与本征值及其拓扑性质》，《物理学杂志：凝聚态》32，445502（2020）。[28] A. M. Cook 和 A. E. B. Nielsen，《有限尺寸拓扑》，投稿中（2022）。[29] Nico Gerhard Leumer，《亚能隙与超能隙区域中有限尺寸一维拓扑超导体的谱与输运特征：一项解析研究》，博士论文（2021）。[30] Frank Schindler、Ashley M Cook、Maia G Vergniory、Zhijun Wang、Stuart SP Parkin、B Andrei Bernevig 和 Titus Neu- pert，《高阶拓扑绝缘体》，《科学进展》4，eaat0346（2018）。[31] KL Zhang、Peng Wang 和 Zhi Song，《二维基塔耶夫方格晶格中拓扑无能隙相的马约拉纳平带边缘模》，《科学报告》9，1–9（2019）。[32] R. D. King-Smith 和 David Vanderbilt，《晶体固体极化理论》，《物理评论B辑》47，1651–1654（1993）。[33] David Vanderbilt 和 R. D. King-Smith，《作为体相量的电极化及其与表面电荷的关系》，《物理评论B辑》48，4442–4455（1993）。[34] A. Alexandradinata、Zhijun Wang 和 B. Andrei Bernevig，《群上同调中的拓扑绝缘体》，《物理评论X辑》6，021008（2016）。[35] J´anos K Asb´oth、L´aszl´o Oroszl´any 和 Andr´as P´alyi，《拓扑绝缘体简明教程》，《物理学讲义》919，166（2016）。[36]Benjamin J Wieder、Barry Bradlyn、Zhijun Wang、Jennifer Cano、Youngkuk Kim、Hyeong-Seok D Kim、Andrew M Rappe、CL Kane 和 B Andrei Bernevig，《壁纸群费米子与非对称空间群狄拉克绝缘体》，Science 361，246–251（2018）。

《乘法型马约拉纳零模》补充材料

Adipta Pal[1,2], Joe H. Winter[1,2,3],和 Ashley M. Cook[1, 2, *]1马克斯·普朗克固体化学物理研究所，*N¨othnitzer Strasse 40，01187* 德累斯顿，德国2马克斯·普朗克复杂系统物理研究所，*N¨othnitzer Strasse 38，01187* 德累斯顿，德国3SUPA，圣安德鲁斯大学物理与天文学学院，North Haugh，圣安德鲁斯 KY16 9SS，英国

*电子邮箱：cooka@pks.mpg.de

S1 有限尺寸基塔耶夫链和 MKC 的计算：

KC 布洛赫哈密顿量 $H_{KC}(k) = -(2t\cos k + \mu)\tau^z + 2\Delta\sin k$与手征算符 $\Pi = \tau^x$反对易，因此我们得到本征态 ψ 和 $\tau^x\psi$，其能量分别为 E 和 $-E$。在位置基底中，KC 哈密顿量可表示为：

$$\mathbb{H}_{KC} = \frac{1}{2}[-\mu\tau^z \otimes \mathbb{I} - t\tau^z \otimes \mathbb{M}_+ - i\Delta\tau^y \otimes \mathbb{M}_-], \tag{S1}$$

其中 $\mathbb{M}_+ = \delta_{i+1,\ j} + \delta_{i,\ j+1}$和 $\mathbb{M}_- = \delta_{i,\ j+1} - \delta_{i+1,\ j}$。因此，我们对 KC 哈密顿量进行手征分解。通过相似变换 $S = \frac{1}{\sqrt{2}}(I - i\tau^y) \otimes \mathbb{I}$,

$$\tilde{\mathbb{H}}_{KC} = \mathbb{S}\mathbb{H}_{KC}\mathbb{S}^\dagger = \tau^+\tilde{\mathbb{H}}_{KC,R} + \tau^-\tilde{\mathbb{H}}_{KC,L}, \tag{S2}$$

其中 $\tau^\pm = \frac{1}{2}(\tau^x \pm i\tau^y)$ 和

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbb{H}}_{KC,R} =& \frac{1}{2}(-\mu\mathbb{I} - t\mathbb{M}_+ - \Delta\mathbb{M}_-),\\ \tilde{\mathbb{H}}_{KC,L} =& \frac{1}{2}(-\mu\mathbb{I} - t\mathbb{M}_+ + \Delta\mathbb{M}_-).\end{aligned} \tag{S3}$$

或者，可以通过变换 $k \to iq$ 进行手征分解。这对应于局域化，因此我们要寻找 Φ 的特征向量，

$$H_{KC}(iq) = -(2t\cosh q + \mu)\tau^z + 2i\Delta\sinh q\tau^y, \tag{S4}$$

使得 $H_{KC}(iq)\Phi = 0$，这应当引导我们得到边缘处马约拉纳零模的表达式。由于 $H_{KC}(iq)$ 的形式为 $\mathbf{d}(iq)\cdot\boldsymbol{\sigma}$，零特征值的条件为 $|\mathbf{d}(iq)| = 0$，由此得到两个条件，

$$2t\cosh q + \mu = \pm 2\Delta\sinh q. \tag{S5}$$

S将这些条件代入 $H_{KC}(iq)$，我们需要求 $\tau^z \mp i\tau^y$ 的零向量，它们为 a s

$$\Phi \sim \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}.$$

然而，零模的函数形式要求我们求解 e^{-q}；它们是将平面波自然转换为局域波函数 $e^{ikx} \to e^{-qx}$ 的结果。我们以其中一个条件为例说明，

$$\begin{aligned}&2t\cosh q + \mu - 2\Delta\sinh q = 0,\\ \Longrightarrow\ &(t+\Delta)e^{-2q} + \mu e^{-q} + (t-\Delta) = 0,\\ \Longrightarrow\ &e^{-q_\pm} = \frac{-\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4(t^2-\Delta^2)}}{2(t+\Delta)}.\end{aligned}$$

此条件等价于求解 $\tilde{\mathbb{H}}_{KC,L}$ 的零能量本征函数，其试探解为 $s^j \sim (e^{-q})^j$。对于双能带基塔耶夫链，马约拉纳零能态的函数形式必须为：

$$\Psi(j) = \alpha s_+^j + \beta s_-^j, \tag{S6}$$

其中 $s_\pm = e^{-q_\pm}$。只有 N 个格点的有限链意味着必须满足边界条件 $\Psi(0) = 0 = \Psi(N+1)$。这意味着：

$$\begin{aligned} &\alpha + \beta = 0, \\ &\alpha s_+^{N+1} + \beta s_-^{N+1} = 0. \end{aligned} \tag{S7}$$

除非波函数呈振荡态，否则无法同时满足这两个条件；这意味着 $|\mu| < 2\sqrt{t^2+\Delta^2}$，从而得到以下方程，

$$\begin{aligned} &\alpha\left(s_+^{N+1} - s_-^{N+1}\right) = 0, \\ \Longrightarrow &\left(-\frac{\mu}{2(t+\Delta)} + i\frac{\sqrt{4(t^2-\Delta^2)-\mu^2}}{2(t+\Delta)}\right)^{N+1} \\ &-\left(-\frac{\mu}{2(t+\Delta)} - i\frac{\sqrt{4(t^2-\Delta^2)-\mu^2}}{2(t+\Delta)}\right)^{N+1} = 0, \\ \Longrightarrow &R^{N+1}(e^{i(N+1)\theta} - e^{-i(N+1)\theta}) = 0, \\ \Longrightarrow &\sin((N+1)\theta) = 0, \\ \Longrightarrow &\cos\theta = \cos\frac{n\pi}{N+1}, \end{aligned} \tag{S8}$$

其中，$R = \sqrt{\frac{t-\Delta}{t+\Delta}}$ 且 $\cos\theta = \frac{\mu}{2\sqrt{t^2-\Delta^2}}$。因此，只有在以下情况下，才会出现振荡的零能马约拉纳模，

$$\mu = 2\sqrt{t^2-\Delta^2}\cos\frac{n\pi}{N+1}, \quad (n = 1, ..., N). \tag{S9}$$

MKC 平行零能模：

同样可以求出 MKC 平行系统的零向量和零模函数形式，

$$\begin{aligned} H_{MKC,||}(k) =&[-(2t_1\cos k + \mu_1)\tau^z + 2\Delta_1\sin k\tau^y] \otimes [(2t_2\cos k + \mu_2)\sigma^z + 2\Delta_2\sin k\sigma^y], \\ =&\mathbf{d}_1(k)\cdot\boldsymbol{\tau}\otimes\mathbf{d}_2(k)\cdot\boldsymbol{\sigma}\cdot \end{aligned} \tag{S10}$$

对局域化进行变换，$k \to iq$，

$$H_{MKC,||}(iq) = [-(2t_1\cosh q + \mu_1)\tau^z + 2i\Delta_1\sinh q\tau^y] \otimes [(2t_2\cosh q + \mu_2)\sigma^z + 2i\Delta_2\sinh q\sigma^y] \tag{S11}$$

根据张量积结构显而易见，若有 $|\mathbf{d}_1(iq)| \times |\mathbf{d}_2(iq)| = 0$，则会得到零特征值。于是我们有以下条件，

$$((2t_1\cosh q + \mu_1)^2 - 4\Delta_1^2\sinh^2 q)((2t_2\cosh q + \mu_2)^2 - 4\Delta_2^2\sinh^2 q) = 0. \tag{S12}$$

根据不同符号组合对应的四个条件，很容易推断出我们得到以下特征向量，

$$\Phi = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix}. \tag{S13}$$

这种方法的问题在于，对于我们的复合系统，特征向量还有另一种可能性，即贝尔态，它们同样保持完整系统各自的宇称。因此，最好考察四个约束对两个分量哈密顿量$H_{||,\ 1}$ 和 $H_{||,\ 2}$所产生的后果。分量布洛赫哈密顿量，

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{||,1}(k) =& -[2(\mu_1 t_2 + \mu_2 t_1)\cos k + 2(t_1 t_2 + \Delta_1\Delta_2)\cos 2k + \mu_1\mu_2 + 2t_1 t_2 - 2\Delta_1\Delta_2]\sigma^z \\ &+ [2(\mu_2\Delta_1 + \mu_1\Delta_2)\sin k + 2(t_2\Delta_1 + t_1\Delta_2)\sin 2k]\sigma^y = \mathbf{d}_1(k)\cdot\boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \tag{S14}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{||,2}(k) =& -[2(\mu_1 t_2 + \mu_2 t_1)\cos k + 2(t_1 t_2 - \Delta_1\Delta_2)\cos 2k + \mu_1\mu_2 + 2t_1 t_2 + 2\Delta_1\Delta_2]\sigma^z \\ &+ [2(\mu_2\Delta_1 - \mu_1\Delta_2)\sin k + 2(t_2\Delta_1 - t_1\Delta_2)\sin 2k]\sigma^y = \mathbf{d}_2(k)\cdot\boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \tag{S15}$$

局域化后， $k \to iq$ 零特征值的条件为，

$$\begin{aligned}&[2(\mu_1 t_2+\mu_2 t_1)\cosh q+2(t_1 t_2+\Delta_1\Delta_2)\cosh 2q+\mu_1\mu_2+2t_1 t_2-2\Delta_1\Delta_2]\\&=\pm[2(\mu_2\Delta_1+\mu_1\Delta_2)\sinh q+2(t_2\Delta_1+t_1\Delta_2)\sinh 2q],\\\Longrightarrow\ &[(2t_1\cosh q+\mu_1)\mp 2\Delta_1\sinh q][(2t_2\cosh q+\mu_2)\mp 2\Delta_2\sinh q]=0,\end{aligned}\tag{S16a}$$

$$\begin{aligned}&[2(\mu_1 t_2+\mu_2 t_1)\cosh q+2(t_1 t_2-\Delta_1\Delta_2)\cosh 2q+\mu_1\mu_2+2t_1 t_2+2\Delta_1\Delta_2]\\&=\pm[2(\mu_2\Delta_1-\mu_1\Delta_2)\sinh q+2(t_2\Delta_1-t_1\Delta_2)\sinh 2q],\\\Longrightarrow\ &[(2t_1\cosh q+\mu_1)\mp 2\Delta_1\sinh q][(2t_2\cosh q+\mu_2)\pm 2\Delta_2\sinh q]=0.\end{aligned}\tag{S16b}$$

局域化后， $k \to iq$，相应的分量布洛赫哈密顿量为，

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{||,1}(iq)=&-[(2t_1\cosh q+\mu_1)(2t_2\cosh q+\mu_2)+4\Delta_1\Delta_2\sinh^2 q]\sigma^z\\&+[2\Delta_1\sinh q(2t_2\cosh q+\mu_2)+2\Delta_2\sinh q(2t_1\cosh q+\mu_1)]\sigma^y,\end{aligned}\tag{S17a}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{||,2}(iq)=&-[(2t_1\cosh q+\mu_1)(2t_2\cosh q+\mu_2)-4\Delta_1\Delta_2\sinh^2 q]\sigma^z\\&+[2\Delta_1\sinh q(2t_2\cosh q+\mu_2)-2\Delta_2\sinh q(2t_1\cosh q+\mu_1)]\sigma^y.\end{aligned}\tag{S17b}$$

根据母体是拓扑还是平庸，我们有两种情形。这里展示其中一种条件下的情况，

$$[(2t_1\cosh q+\mu_1)-2\Delta_1\sinh q][(2t_2\cosh q+\mu_2)-2\Delta_2\sinh q]=0.\tag{S18}$$

完整系统的基底为 $\tilde{c}_k=(\tilde{c}_{k,\uparrow},\tilde{c}_{k,\downarrow},\tilde{c}^\dagger_{-k,\uparrow},\tilde{c}^\dagger_{-k,\downarrow})^T$。因此，我们将 $\mathcal{H}_{||,1}$ 的基底 $\tilde{c}_{k,1}=(\tilde{c}_{k,\uparrow},\tilde{c}^\dagger_{-k,\downarrow})^T$ 与 $\mathcal{H}_{||,2}$ 的基底 $\tilde{c}_{k,2}=(\tilde{c}_{k,\downarrow},\tilde{c}^\dagger_{-k,\uparrow})^T$ 组合起来，并寻找由完整基底导出的 4×4 矩阵的零特征向量。

- 情形 *1*：如果两个母体都是拓扑的，那么在彼此独立的情形下，我们有 $(2t_1\cosh q+\mu_1)=2\Delta_1\sinh q$ 和 $(2t_2\cosh q+\mu_2)=2\Delta_2\sinh q$；但如果两个母体的参数彼此成比例，即 $\left|\begin{smallmatrix}\mu_1\\t_1\end{smallmatrix}\right|=\left|\begin{smallmatrix}\mu_2\\t_2\end{smallmatrix}\right|$ 和 $\left|\begin{smallmatrix}t_1\\\Delta_1\end{smallmatrix}\right|=\left|\begin{smallmatrix}t_2\\\Delta_2\end{smallmatrix}\right|$，则情况除外。在这类情形下，例如 $\frac{\mu_1}{t_1}=\frac{\mu_2}{t_2}$ 和 $\frac{t_1}{\Delta_1}=\frac{t_2}{\Delta_2}$，我们会在式 (S16a) 和 (S16b) 第一行的右端（rhs）得到 $+$ 个符号函数，但式 (S16b) 中还会出现 $-$ 个符号函数。只需将 $2t_1\cosh q+\mu_1$ 和 $2t_2\cosh q+\mu_2$ 代入式 (S17a) 和 (S17b)，即可得出：式 (S16a) 右端同时出现 $+$ 和 $-$ 个符号函数，等价于得到 $\mathcal{H}(iq)=0$。因此，此情形下我们的 MZM 特征向量必须是该矩阵的零特征向量，

$$\begin{pmatrix} d_{1,z}(iq) & 0 & 0 & d_{1,z}(iq)\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ -d_{1,z}(iq) & 0 & 0 & -d_{1,z}(iq)\end{pmatrix},\tag{S19}$$

其形式为 $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle-|11\rangle)\ |10\rangle,\ |01\rangle\}$。另一方面，如果母体没有这类相关参数，我们就依次代入条件 $(2t_1\cosh q+\mu_1)=2\Delta_1\sinh q$ 和 $(2t_2\cosh q+\mu_2)=2\Delta_2\sinh q$，使我们的 MZM 特征向量成为矩阵的特征向量，

$$\begin{pmatrix} d_{1,z}(iq) & 0 & 0 & d_{1,z}(iq)\\ 0 & d_{2,z}(iq) & d_{2,z}(iq) & 0\\ 0 & -d_{2,z}(iq) & -d_{2,z}(iq) & 0\\ -d_{1,z}(iq) & 0 & 0 & -d_{1,z}(iq)\end{pmatrix},\tag{S20}$$

其形式为 $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle-|11\rangle)\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle-|10\rangle)\}$。

- 情况 *2*：如果其中一个母体（例如母体1）具有拓扑性质，而母体2是平庸的，我们就只有 $2t_1\cosh q+\mu_1=2\Delta_1\sinh q$。此时，MMZM特征向量必须是矩阵的零特征向量，

$$\begin{pmatrix} d_{1,z}(iq) & 0 & 0 & d_{1,z}(iq)\\ 0 & d_{2,z}(iq) & d_{2,z}(iq) & 0\\ 0 & -d_{2,z}(iq) & -d_{2,z}(iq) & 0\\ -d_{1,z}(iq) & 0 & 0 & -d_{1,z}(iq)\end{pmatrix},\tag{S21}$$

其给定为，$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle-|11\rangle)\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle-|10\rangle)\}$。

对于这两种情况，我们均使用 $|0\rangle = (1,\ 0)^T$ 和 $|1\rangle = (0,\ 1)^T$ 作为马约拉纳本征向量。然后，对于两侧右端项所选取的符号 $(+,\ +)$，我们得到以下非零零特征向量，

$$(+,+) : |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle), \tag{S22}$$

其中，这些是最大纠缠贝尔态。我们给出了正文中由于所选符号不同而产生的所有贝尔态组合。

现在我们来研究 贝尔态马约拉纳零模的函数形式。根据公式 (S17，我们得到四个解 e^{-q} ），

$$e^{-q} = \frac{-\mu_1 \pm \sqrt{\mu_1^2 - 4(t_1^2 - \Delta_1^2)}}{2(t_1 + \Delta_1)}, \frac{-\mu_2 \pm \sqrt{\mu_2^2 - 4(t_2^2 - \Delta_2^2)}}{2(t_2 + \Delta_2)}. \tag{S23}$$

马约拉纳边缘模 $\Psi(j)$ 的函数形式随后必须是 e^{-qj} 的线性组合，其中 j 对应于离散格点索引。当然，这还必须满足以下链长为 N 时的边界条件，

$$\Psi(0) = 0, \quad \Psi(N+1) = 0, \quad \Psi(-1) = 0, \quad \Psi(N+2) = 0. \tag{S24}$$

最后两个条件的出现是因为我们考虑了次近邻相互作用。如果考虑布洛赫哈密顿量手征分解所产生的递推关系，就可以推导出这些条件，正如我们此前对双带基塔耶夫链所展示的那样。由于链的长度有限，对于振荡解，我们必须使 e^{-q} 具有复根，因此可以写成，$e^{-q} = \frac{-\mu_l \pm i\sqrt{4(t_l^2-\Delta_l^2)-\mu_l^2}}{2\ t_l+\Delta_l}$ $() = R_l e^{\pm i\theta_l}, l \in \{1,2\}$。随后我们写出以下试探解，

$$\Psi(j) = A_1 R_1^j e^{ij\theta_1} + A_2 R_1^j e^{-ij\theta_1} + B_1 R_2^j e^{ij\theta_2} + B_2 R_2^j e^{-ij\theta_2}, \tag{S25}$$

由此，边界条件如下：

$$\begin{gathered} A_1 + A_2 + B_1 + B_2 = 0, \\ \begin{pmatrix} R_1^{-1}\cos\theta_1 - R_2^{-1}\cos\theta_2 & -R_1^{-1}\sin\theta_1 & -R_2^{-1}\sin\theta_2 \\ R_1^{N+1}\cos((N+1)\theta_1) - R_2^{N+1}\cos((N+1)\theta_2) & R_1^{N+1}\sin((N+1)\theta_1) & R_2^{N+1}\sin((N+1)\theta_2) \\ R_1^{N+2}\cos((N+2)\theta_1) - R_2^{N+2}\cos((N+2)\theta_2) & R_1^{N+2}\sin((N+2)\theta_1) & R_2^{N+2}\sin((N+2)\theta_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 + A_2 \\ i(A_1 - A_2) \\ i(B_1 - B_2) \end{pmatrix} = 0. \end{gathered} \tag{S26}$$

令上述矩阵的行列式等于零，即可得到量子化条件：

$$\frac{R_1^{2(N+2)} + R_2^{2(N+2)} - 2R_1^{N+2}R_2^{N+2}\cos(2(N+2)\theta_+)}{R_1^2 + R_2^2 - 2R_1R_2\cos 2\theta_+} = \frac{R_1^{2(N+2)} + R_2^{2(N+2)} - 2R_1^{N+2}R_2^{N+2}\cos(2(N+2)\theta_-)}{R_1^2 + R_2^2 - 2R_1R_2\cos 2\theta_-}, \tag{S27}$$

其中 $\theta_\pm = \frac{\theta_1 \pm \theta_2}{2}$。我们将该量子化条件应用于 $\mu_1 = \mu_2$、$t_1 = -t_2$ 和 $\Delta_1 = \Delta_2$ 的情况，以检验其是否成立。这里可以直接算得 $R_2 e^{i\theta_2} = -R_1 e^{i\theta_1}$。代入上式，得到：

$$1 - (-1)^{N+2}\cos 2(N+2)\theta_1 = (1 - (-1)^{N+2})\cos^2\theta_1. \tag{S28}$$

我们分别计算 N 为奇数和 N 为偶数的情况：

$$\begin{aligned} &(N = odd) \quad 2\sin(N+3)\theta_1 \sin(N+1)\theta_1 = 0, \implies \theta_1 = \frac{n\pi}{N+1}, \frac{m\pi}{N+3} \quad n \in \{1,...,N+1\}, m \in \{1,...,N+3\} \\ &(N = even) \quad 2\sin^2(N+2)\theta_1 = 0, \implies \theta_1 = \frac{n\pi}{N+2} \quad n \in \{1,...,N+2\}. \end{aligned} \tag{S29}$$

我们看到，通过示意图方法推导出的结果与根据该量子化条件得到的结果均表明，我们应观察到两条偶数长度的链，并据此计算马约拉纳点。

我们使用示意图方法给出的物理基底，计算上述情况的本征函数。首先，考虑一个含有 $N = 2L$ 个格点、具有 $t_1 = -t_2 = -t$ 和 $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ 的 MKC 平行系统。对于上述情况，两个长度为 L 的基塔耶夫链各自的马约拉纳零模波函数为：

$$\psi(j) = \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^j \sin\left(\frac{n\pi j}{L+1}\right), \quad n \in \{1,...,L\}. \tag{S30}$$

对于 MKC 平行系统中的格点指标 l，我们有两个本征函数。考虑到系统中只有最近邻相互作用，其中一个组成 KC 的波函数在完整 MKC 平行晶格中属于另一个 KC 的格点指标处保持为零

。因此，完整 MKC 平行晶格的格点指标 l 与第一个组成 KC 的格点指标 j 之间的关系为 $2j = l$，与第二个 KC 的格点指标之间的关系为 $2j - 1 = l$。

$$\Psi_1(l) = \begin{cases} \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^{\frac{l}{2}} \sin\left(\frac{n\pi l}{2L+2}\right) = \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^{\frac{l}{2}} \sin\left(\frac{n\pi l}{N+2}\right), & \text{if} \quad l = \text{even}, \\ 0, \quad \text{if} \quad l = \text{odd}. \end{cases} \tag{S31a}$$

$$\Psi_2(l) = \begin{cases} 0, \quad \text{if} \quad l = \text{even}, \\ \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^{\frac{l+1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi(l+1)}{2L+2}\right) = \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^{\frac{l+1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi(l+1)}{N+2}\right), & \text{if} \quad l = \text{odd}. \end{cases} \tag{S31b}$$

根据 MKC 平行系统中马约拉纳零模的一般波函数，即式 S25，对于 $\Psi_1(l)$，可将其表示为 $A_1 = B_1$和 $A_2 = B_2$，其中 $A_1 = -A_2$,

$$\Psi_1(l) \sim R_1^l(1 + (-1)^l)e^{il\theta_1} - R_1^l(1 + (-1)^l)e^{-il\theta_1}, \tag{S32}$$

其中 $\theta_1 = \frac{n\pi}{N+2}$，$\{n = 1, ..., N+2\}$ 来自我们不久前证明的量子化条件。对于 $\Psi_2(l)$，可以进行类似的计算，也可以直接将其视为平移后的 Ψ_1，因此 $\Psi_2(l) = \Psi_1(l+1)$，即向左平移一步。类似地，对于尺寸为 $N = 2L + 1$ 的 MKC 平行晶格，可以从示意图得出以下关系：

$$\Psi_1(l) = \begin{cases} \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^{\frac{l}{2}} \sin\left(\frac{n\pi l}{2L+2}\right) = \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^{\frac{l}{2}} \sin\left(\frac{n\pi l}{N+1}\right), & \text{if} \quad l = \text{even}, \\ 0, \quad \text{if} \quad l = \text{odd}. \end{cases} \tag{S33a}$$

$$\Psi_2(l) = \begin{cases} 0, \quad \text{if} \quad l = \text{even}, \\ \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^{\frac{l+1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi(l+1)}{2L+4}\right) = \left[\frac{t-\Delta}{t+\Delta}\right]^{\frac{l+1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi(l+1)}{N+3}\right), & \text{if} \quad l = \text{odd}. \end{cases} \tag{S33b}$$

同样，对于 $\Psi_1(l)$，我们得到与式 S32 相同的表达式，其中 $\theta_1 = \frac{n\pi}{N+1}$ 和 $\Psi_2(l) = \Psi_1(l+1)$，但 $\theta_1 = \frac{n\pi}{N+3}$不同。现在让我们将其推广到 $R_1 = R_2$ 的情况。当 $\frac{t_1}{\Delta_1} = \pm\frac{t_2}{\Delta_2}$ 时，这是可行的。现在考虑 $R_2 e^{i\theta_2} = R_1 e^{i\delta} e^{i\theta_1}$，这意味着 $\theta_2 - \theta_1 = \delta$。这是对前一种情况的推广，在前一种情况下我们有 $\delta = \pi$。此时的量子化条件为：

$$\frac{1 + (e^{i\delta})^{2(N+2)} - 2(e^{i\delta})^{N+2}\cos(2(N+1)\theta_1)}{1 + e^{2i\delta} - 2e^{i\delta}\cos 2\theta_1} = \frac{1 + (e^{i\delta})^{2(N+2)} - 2(e^{i\delta})^{N+2}}{1 + e^{2i\delta} - 2e^{i\delta_1}}. \tag{S34}$$

让我们考虑下一个最简单的情形，即相位差为三次单位根，记为 $\delta = e^{i\frac{2\pi}{3}} = \omega$。根据我们之前的分析，必须考虑三种系统尺寸，$N = 3L$，$3L + 1$ 以及 $3L + 2$,

- 情形 *1*：**(N=3L)** 根据公式 S34，我们得到,

$$\begin{aligned} &\frac{1 + \omega - 2\omega\cos(2(N+2)\theta_1)}{1 + \omega^2 - 2\omega\cos 2\theta_1} = \omega, \implies 4\omega^2 \sin((N+1)\theta_1)\sin((N+3)\theta_1) = 0, \\ &\implies \theta_1 = \frac{n\pi}{N+1}, \frac{m\pi}{N+3}, \quad n \in \{1, ..., N\}, m \in \{1, ..., N+2\}. \end{aligned} \tag{S35}$$

- 情况 *2*：**(N=3L+1)** 根据公式 S34，我们得到,

$$\begin{aligned} &\frac{2 - 2\cos(2(N+2)\theta_1)}{1 + \omega^2 - 2\omega\cos 2\theta_1} = 0, \implies 4\sin^2((N+2)\theta_1) = 0, \\ &\implies \theta_1 = \frac{n\pi}{N+2}, \quad n \in \{1, ..., N+1\}. \end{aligned} \tag{S36}$$

- 情形 *3*：**(N=3L+2)** 根据方程 S34，我们有：

$$\begin{aligned} &\frac{1 + \omega^2 - 2\omega\cos((N+2)\theta_1)}{1 + \omega^2 - 2\omega\cos 2\theta_1} = 1, \implies 4\omega\sin((N+1)\theta_1)\sin((N+3)\theta_1) = 0, \\ &\implies \theta_1 = \frac{n\pi}{N+1}, \frac{m\pi}{N+3}, \quad n \in \{1, ..., N\}, m \in \{1, ..., N+2\}. \end{aligned} \tag{S37}$$

B 垂直MKC 零能模：

这里，w 我们计算由该哈密顿量描述的 MKC 垂直系统的零能模 ，

$$\begin{aligned} H_{MKC,\perp}(k_x,k_y) =&[-(2t_1\cos k_x+\mu_1)\tau^z+2\Delta_1\sin k_x\tau^y]\otimes[(2t_2\cos k_y+\mu_2)\sigma^z+2\Delta_2\sin k_y\sigma^y],\\ =&\mathbf{d}_1(k_x)\cdot\boldsymbol{\tau}\otimes\mathbf{d}_2(k_y)\cdot\boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \tag{S38}$$

通过 $k_x\to iq_x$沿ˆx方向局域化哈密顿量，

$$H_{MKC,\perp}(iq_x,k_y)=[-(2t_1\cosh q_x+\mu_1)\tau^z+2i\Delta_1\sinh q_x\tau^y]\otimes[(2t_2\cos k_y+\mu_2)\sigma^z+2\Delta_2\sin k_y\sigma^y], \tag{S39}$$

零条件必须为，

$$\begin{aligned} &((2t_1\cosh q_x+\mu_1)^2-4\Delta_1^2\sinh^2 q_x)((2t_2\cos k_y+\mu_2)^2+4\Delta_2^2\sin^2 k_y)=0,\\ \Longrightarrow\ &2t_1\cosh q_x+\mu_1=\pm 2\Delta_1\sinh q_x. \end{aligned} \tag{S40}$$

正如我们对基塔耶夫链情形所示，边缘态必须具有如下形式： $\Psi(j,\ k_y)\sim(e^{-q_x,+j}-e^{-q_x,-j})e^{ik_yy}\Phi$，其中 Φ 由$H_{MKC,\perp}(iq_x,\ k_y)$的零向量导出。令 $M_2=2t_2$为cos $k_y+\mu_2$、 $R_2=2\Delta_2$为sin k_y，公式 (S40)中的两个符号函数意味着，

$$\Phi_\pm=\frac{1}{2\sqrt{M_2(M_2\pm\sqrt{M_2^2+R_2^2})}}\begin{pmatrix}1\\ \pm1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}M_2\pm\sqrt{M_2^2+R_2^2}\\ iR_2\end{pmatrix}. \tag{S41}$$

从公式 (S40) 中的两个符号函数各得到两个 e^{-q_x} 解，

$$+:e^{-q_x}=\frac{-\mu_1\pm\sqrt{\mu_1^2-4(t_1^2-\Delta_1^2)}}{2(t_1+\Delta_1)},\quad -:e^{-q_x}=\frac{-\mu_1\pm\sqrt{\mu_1^2-4(t_1^2-\Delta_1^2)}}{2(t_1-\Delta_1)}. \tag{S42}$$

类似地，仅沿 y 方向局域化， $k_y\to iq_y$，

$$H_{MKC,\perp}(k_x,iq_y)=[-(2t_1\cos k_x+\mu_1)\tau^z+2\Delta_1\sin k_x\tau^y]\otimes[(2t_2\cosh q_y+\mu_2)\sigma^z+2i\Delta_2\sinh q_y\sigma^y], \tag{S43}$$

零条件为，

$$\begin{aligned} &((2t_1\cos k_x+\mu_1)^2+4\Delta_1^2\sin^2 k_x)((2t_2\cosh q_y+\mu_2)^2-4\Delta_2^2\sinh^2 q_y)=0,\\ \Longrightarrow\ &2t_2\cosh q_y+\mu_2=\pm 2\Delta_2\sinh q_y. \end{aligned} \tag{S44}$$

与前一种情况类似，边缘态必须具有以下形式： $\Psi(k_x,j)\sim e^{ik_xx}(e^{-q_{y,}+j}-e^{-q_{y,}-j})\Phi$。分别记 $M_1=-(2t_1\cos k_x+\mu_1)$ 和 $R_1=2\Delta_1\sin k_x$ 为公式 (S44) 中两个符号函数对应的量，则零向量为，

$$\Phi_\pm=\frac{1}{2\sqrt{M_1(M_1\pm\sqrt{M_1^2+R_1^2})}}\begin{pmatrix}M_1\pm\sqrt{M_1^2+R_1^2}\\ iR_1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\ \mp1\end{pmatrix}. \tag{S45}$$

从公式 (S44) 中的两个符号函数各得到两个 e^{-q_y} 解，

$$+:e^{-q_y}=\frac{-\mu_2\pm\sqrt{\mu_2^2-4(t_2^2-\Delta_2^2)}}{2(t_2+\Delta_2)},\quad -:e^{-q_y}=\frac{-\mu_2\pm\sqrt{\mu_2^2-4(t_2^2-\Delta_2^2)}}{2(t_2-\Delta_2)}. \tag{S46}$$

再次，如果我们沿着 ˆx 和 ˆy 方向局域化， $k_x\to iq_x$、 $k_y\to iq_y$，

$$H_{MKC,\perp}(iq_x,iq_y)=[-(2t_1\cosh q_x+\mu_1)\tau^z+2i\Delta_1\sinh q_x\tau^y]\otimes[(2t_2\cosh q_y+\mu_2)\sigma^z+2i\Delta_2\sinh q_y\sigma^y], \tag{S47}$$

零条件实现为，

$$((2t_1\cosh q_x+\mu_1)^2-4\Delta_1^2\sinh^2 q_x)((2t_2\cosh q_y+\mu_2)^2-4\Delta_2^2\sinh^2 q_y)=0. \tag{S48}$$

这个关系并未给出同时出现的条件；要获得这些条件，我们需要考虑垂直MKC的分量布洛赫哈密顿量，

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\perp,1}(k)=&-[2\mu_2t_1\cos k_x+2\mu_1t_2\cos k_y+2(t_1t_2+\Delta_1\Delta_2)\cos(k_x+k_y)+2(t_1t_2-\Delta_1\Delta_2)\cos(k_x-k_y)+\mu_1\mu_2]\sigma^z\\ &+[2\mu_2\Delta_1\sin k_x+2\mu_1\Delta_2\sin k_y+2(t_2\Delta_1+t_1\Delta_2)\sin(k_x+k_y)+2(t_2\Delta_1-t_1\Delta_2)\sin(k_x-k_y)]\sigma^y\\ &=\mathbf{d}_1(k)\cdot\boldsymbol{\sigma}, \end{aligned} \tag{S49}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\perp,2}(k) =& -[2\mu_2 t_1\cos k_x + 2\mu_1 t_2\cos k_y + 2(t_1t_2-\Delta_1\Delta_2)\cos(k_x+k_y) + 2(t_1t_2+\Delta_1\Delta_2)\cos(k_x-k_y) + \mu_1\mu_2]\sigma^z \\ &+ [2\mu_2\Delta_1\sin k_x - 2\mu_1\Delta_2\sin k_y + 2(t_2\Delta_1 - t_1\Delta_2)\sin(k_x+k_y) + 2(t_2\Delta_1+t_1\Delta_2)\sin(k_x-k_y)]\sigma^y \\ &= \mathbf{d}_2(k)\cdot\boldsymbol{\sigma},\end{aligned} \tag{S50}$$

进行局域化 $k_x \to iq_x$ 和 $k_y \to iq_y$ 后，得到以下条件，

$$\begin{aligned}&[2\mu_2 t_1 \text{双曲余弦 } q_x + 2\mu_1 t_2 \text{双曲余弦 } q_y + 2(t_1t_2+\Delta_1\Delta_2) \text{双曲余弦}(q_x+q_y) + 2(t_1t_2-\Delta_1\Delta_2) \text{双曲余弦}(q_x-q_y) \\ &+ \mu_1\mu_2] = \pm[2\mu_2\Delta_1 \text{双曲正弦 } q_x + 2\mu_1\Delta_2 \text{双曲正弦 } q_y + 2(t_2\Delta_1+t_1\Delta_2) \text{双曲正弦}(q_x+q_y) + 2(t_2\Delta_1-t_1\Delta_2) \text{双曲正弦}(q_x-q_y)] \\ &\Longrightarrow [(2t_1 \text{双曲余弦 } q_x+\mu_1) \pm 2\Delta_1 \text{双曲正弦 } q_x][(2t_2 \text{双曲余弦 } q_y+\mu_2) \pm 2\Delta_2 \text{双曲正弦 } q_y] = 0,\end{aligned} \tag{S51a}$$

$$\begin{aligned}&[2\mu_2 t_1\cosh q_x + 2\mu_1 t_2\cosh q_y + 2(t_1t_2-\Delta_1\Delta_2)\cosh(q_x+q_y) + 2(t_1t_2+\Delta_1\Delta_2)\cosh(q_x-q_y) + \mu_1\mu_2] \\ &= \pm[2\mu_2\Delta_1\sinh q_x - 2\mu_1\Delta_2\sinh q_y + 2(t_2\Delta_1-t_1\Delta_2)\sinh(q_x+q_y) + 2(t_2\Delta_1+t_1\Delta_2)\sinh(q_x-q_y)], \\ &\Longrightarrow [(2t_1\cosh q_x+\mu_1) \pm 2\Delta_1\sinh q_x][(2t_2\cosh q_y+\mu_2) \mp 2\Delta_2\sinh q_y] = 0,\end{aligned} \tag{S51b}$$

每个分量哈密顿量的每个条件都会为 e^{-q_x} 给出两个解，为 e^{-q_y} 给出两个解。局域化后的布洛赫哈密顿量如下:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\perp,1}(iq_x,iq_y) =& -[(2t_1\cosh q_x+\mu_1)(2t_2\cosh q_y+\mu_2) + 4\Delta_1\Delta_2\sinh q_x\sinh q_y]\sigma^z \\ &+ [2\Delta_1\sinh q_x(2t_2\cosh q_y+\mu_2) + 2\Delta_2\sinh q_y(2t_1\cosh q_x+\mu_1)]\sigma^y,\end{aligned} \tag{S52a}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\perp,2}(iq_x,iq_y) =& -[(2t_1\cosh q_x+\mu_1)(2t_2\cosh q_y+\mu_2) - 4\Delta_1\Delta_2\sinh q_x\sinh q_y]\sigma^z \\ &+ [2\Delta_1\sinh q_x(2t_2\cosh q_y+\mu_2) - 2\Delta_2\sinh q_y(2t_1\cosh q_x+\mu_1)]\sigma^y.\end{aligned} \tag{S52b}$$

与平行系统类似，即使在这里，我们也必须使用完整系统的基底 $(\tilde{c}_{\boldsymbol{k},\uparrow},\ c\tilde{c}_{\boldsymbol{k},\downarrow},\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k},\uparrow},\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow})^T$。马约拉纳零模的特征向量取决于母体是拓扑还是平庸，以及哪些边界条件是开放的，因此有两种情形，

- 情形 *1*：如果 x 和 y 方向的边界条件均为开放，且两个母体都是拓扑的，则令以下条件成立，

$$[(2t_1\cosh q_x+\mu_1) - 2\Delta_1\sinh q_x][(2t_2\cosh q_y+\mu_2) - 2\Delta_2\sinh q_y] = 0. \tag{S53}$$

这里两个因子都为零，因为两个母体都是拓扑的，因此 $2t_1\cosh q_x+\mu_1 = 2\Delta_1\sinh q_x$ and $2t_2\cosh q_y+\mu_2 = 2\Delta_2\sinh q_y$。代入方程 (S47a) 和 (S47b)，我们看到 $\mathcal{H}_{\perp,2}(iq_x,\ iq_y) = 0$，于是马约拉纳零模本征向量必须是下列矩阵的零向量，

$$\begin{pmatrix} d_{1,z}(iq_x,iq_y) & 0 & 0 & d_{1,z}(iq_x,iq_y) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -d_{1,z}(iq_x,iq_y) & 0 & 0 & -d_{1,z}(iq_x,iq_y) \end{pmatrix}. \tag{S54}$$

马约拉纳零模本征向量为 $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle),\ |01\rangle, |10\rangle\}$。

- 情况 *2*：假设只有 x 边界条件是开放的，或者只有母体1是拓扑的。可以证明，我们必须满足以下条件，

$$2t_1\cosh q_x + \mu_1 = 2\Delta_1\sinh q_x. \tag{S55}$$

马约拉纳零模本征向量是以下矩阵的零向量，

$$\begin{pmatrix} d_{1,z}(iq_x,iq_y/k_y) & 0 & 0 & d_{1,z}(iq_x,iq_y/k_y) \\ 0 & d_{2,z}(iq_x,iq_y/k_y) & d_{2,z}(1q_x,iq_y/k_y) & 0 \\ 0 & -d_{2,z}(iq_x,iq_y/k_y) & -d_{2,z}(1q_x,iq_y/k_y) & 0 \\ -d_{1,z}(iq_x,iq_y/k_y) & 0 & 0 & -d_{1,z}(iq_x,iq_y/k_y) \end{pmatrix}, \tag{S56}$$

其给出为，$\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)\}$。

S2 威尔逊环

威尔逊环[26] 是定义在闭合路径上的酉算符:

$$\mathcal{W} = \overrightarrow{\exp}\Big[i \int_{BZ} d\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{k})\Big]. \tag{S57}$$

ˆ ˆ ˆ 此处 $\boldsymbol{A} = A_x k_x + A_y k_y + A_z k_z$ 是非阿贝尔贝里联络:

$$\boldsymbol{A}_{mn}(\boldsymbol{k}) = i \langle u_m(\boldsymbol{k})| \nabla_{\boldsymbol{k}} |u_n(\boldsymbol{k})\rangle , \tag{S58}$$

按照此约定，它是一个厄米算符，即 $A_{mn} = A^*_{nm}$。在上述定义中， $|u_n(\boldsymbol{k})\rangle$ 是布洛赫哈密顿量的特征向量，满足 $H(\boldsymbol{k}) |u_n(\boldsymbol{k})\rangle = E_n(\boldsymbol{k}) |u_n(\boldsymbol{k})\rangle$ 以及 $1 \le m,\ n \le M$，其中 M为占据能带的数量。

沿闭合路径定义的威尔逊算符的本征值，即威尔逊环的本征值，具有规范不变性且为幺正。因此，它们可以表示为 $e^{i2\pi\nu_i}$，其中 ν_i 对应于瓦尼尔中心[32,33]。

为了数值计算威尔逊环，并避免因缺少规范固定而产生的复杂问题，我们在动量空间中一条离散的闭合路径上计算威尔逊环，该路径被划分为 $R+1$ 段[26]:

$$\mathcal{W}_{mn} = \langle u_m(\boldsymbol{k}_0)| \lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} P(\boldsymbol{k}_i) |u_n(\boldsymbol{k}_0)\rangle , \tag{S59}$$

其中 $P(\boldsymbol{k}) = \sum_{n'=1}^{M} |u_{n'}(\boldsymbol{k})\rangle \langle u_{n'}(\boldsymbol{k})|$ 是占据子空间中的投影算符，如 $1 \le n,\ m \le M$，其中 M为占据能带的数量。

A 子哈密顿量威尔逊环谱的性质

我们在此解析推导图 2 中给出的数值结果，其中子哈密顿量的瓦尼尔中心对应于母体电荷瓦尼尔中心之和。

子哈　　密顿量（并联乘法链）由式 7 给出，为方便起见，现重述如下　　e,

$$\begin{aligned} H^c_{MKC,||}(k) =& [-(2t_1\cos k + \mu_1)\tau^z + 2\Delta_1 \sin k\tau^y] \\ & \otimes [(2t_2\cos k + \mu_2)\sigma^z + 2\Delta_2 \sin k\sigma^y]. \end{aligned} \tag{S60}$$

鉴于哈密顿量采用张量积构造，其特征向量可利用母体的特征分解表示为,

$$\begin{aligned} |u_1(k)\rangle &= |v_{1+}(k)\rangle \otimes |v_{2-}(k)\rangle ; \quad H^c_{MKC,||}(k) |u_1(k)\rangle = \epsilon^{(1)}_+ \epsilon^{(2)}_- |u_1(k)\rangle \\ |u_2(k)\rangle &= |v_{1-}(k)\rangle \otimes |v_{2+}(k)\rangle ; \quad H^c_{MKC,||}(k) |u_2(k)\rangle = \epsilon^{(1)}_- \epsilon^{(2)}_+ |u_2(k)\rangle \\ |u_3(k)\rangle &= |v_{1-}(k)\rangle \otimes |v_{2-}(k)\rangle ; \quad H^c_{MKC,||}(k) |u_3(k)\rangle = \epsilon^{(1)}_- \epsilon^{(2)}_- |u_3(k)\rangle \\ |u_4(k)\rangle &= |v_{1+}(k)\rangle \otimes |v_{2+}(k)\rangle ; \quad H^c_{MKC,||}(k) |u_4(k)\rangle = \epsilon^{(1)}_+ \epsilon^{(2)}_+ |u_4(k)\rangle \end{aligned} \tag{S61}$$

其中 $|v_{1\pm}(k)\rangle$ 是第一母体的特征向量，其对应的本征值为 $\epsilon^{(1)}_\pm$ ；而 $|v_{2\pm}(k)\rangle$ 是第二个母体的特征向量，其对应的本征值为 $\epsilon^{(2)}_\pm$ ，映射 $t_2 \to -t_2$ 和 $\mu_2 \to -\mu_2$后。由于 $\epsilon^{(1)}_\pm = \epsilon^{(2)}_\pm$ ，我们得到二重简并能带，并确定 $|u_1(k)\rangle$, $|u_2(k)\rangle$ 是半填充时占据子空间中的特征向量。这得到非阿贝尔贝里联络的 2×2 矩阵表示,

$$\begin{aligned} A(k) &= i \begin{pmatrix} \langle v_{1-}(k)| \partial_k |v_{1-}(k)\rangle + \langle v_{2+}(k)| \partial_k |v_{2+}(k)\rangle & 0 \\ 0 & \langle v_{1+}(k)| \partial_k |v_{1+}(k)\rangle + \langle v_{2-}(k)| \partial_k |v_{2-}(k)\rangle \end{pmatrix} \\ &= i \begin{pmatrix} \langle v_{1-}(k)| \partial_k |v_{1-}(k)\rangle & 0 \\ 0 & \langle v_{1+}(k)| \partial_k |v_{1+}(k)\rangle \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \langle v_{2+}(k)| \partial_k |v_{2+}(k)\rangle & 0 \\ 0 & \langle v_{2-}(k)| \partial_k |v_{2-}(k)\rangle \end{pmatrix} \\ \implies A &= A_1 + A_2 \end{aligned} \tag{S62}$$

其中 A_1 和 A_2 并非各个母体的贝里联络，因为它们是由整个空间而非仅占据子空间构造的。值得注意的是， A_1 和 A_2 是厄米且对角的。

$$\begin{aligned}\mathcal{W} &= \overline{\exp}\Big[i\int_{BZ} dk A(k)\Big] \\ &= \overline{\exp}\Big[i\int_{BZ} dk A_1(k) + i\int_{BZ} dk A_2(k)\Big] \\ &= \overline{\exp}\Big[i\int_{BZ} dk A_1(k)\Big] \quad \overline{\exp}\Big[i\int_{BZ} dk A_2(k)\Big] \\ \implies \mathcal{W} &= \mathcal{W}_1\mathcal{W}_2\end{aligned} \tag{S63}$$

为了分离指数项，我们利用了这样一个事实：由于 A_1 和 A_2 是对角矩阵，它们满足 $[A_1, A_2] = 0$。值得注意的是， A_1 和 A_2 的厄米性使得 $\mathcal{W}_1$ 和 $\mathcal{W}_2$ 成为具有幺正本征值的幺正算符。此外，由于 A_1 和 A_2 是对角的，我们得出 $\mathcal{W}_1$、 $\mathcal{W}_2$以及因此得到的 $\mathcal{W}$也都是对角的。

如前所述，威尔逊环 $\mathcal{W}$ 是一个幺正算符，因此其 i^{th} 本征值可以表示为 $\exp(i2\pi\nu_i)$。利用式 S63，我们建立了 $\mathcal{W}$ 的本征值与 $\mathcal{W}_1$ 和 $\mathcal{W}_2$的本征值之间的直接关系。我们首先将 $\mathcal{W}_1$ 和 $\mathcal{W}_2$ 的 i^{th}本征值分别记为 $\exp(i2\pi\nu_i^{(1)})$ 和 $\exp(i2\pi\nu_i^{(2)})$。注意到 $\nu_1^{(1)} = \nu_2^{(1)}$ 和 $\nu_1^{(2)} = \nu_2^{(2)}$， $\exp(i2\pi\nu_i)$便可表示为：

$$\begin{aligned}\implies \exp(i2\pi\nu_i) &= \exp(i2\pi\nu^{(1)})\exp(i2\pi\nu^{(2)}) \\ \implies \nu_i &= \nu^{(1)} + \nu^{(2)} \mod 1\end{aligned} \tag{S64}$$

$$\nu_i = \nu^{(1)} + \nu^{(2)} \mod 1 \tag{S65}$$

这一结果表明，通过威尔逊环谱无法区分由两个拓扑母体（$\nu^{(1)} = \nu^{(2)} = 0.5$）得到的子系统与由平庸母体（$\nu^{(1)} = \nu^{(2)} = 0$）得到的子系统，因为在两种情况下， $\nu_i = 0$ 对于 $i \in \{1, 2\}$ 均如此。

我们还可以采用另一种威尔逊环表述，即使用占据态上的投影算符；这种表述被广泛用于数值计算[34–36]，并得出相同的结论。

$$\mathcal{W}_{mn} = \langle u_m(\boldsymbol{k}_0)| \lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} P(\boldsymbol{k}_i) |u_n(\boldsymbol{k}_0)\rangle , \tag{S66}$$

在半填充情况下，投影算符对应于

$$\begin{aligned}P(k_i) &= |u_1(k)\rangle\langle u_1(k)| + |u_2(k)\rangle\langle u_2(k)| \\ &= |v_{1-}(k)\rangle\langle v_{1-}(k)| \otimes |v_{2+}(k)\rangle\langle v_{2+}(k)| + |v_{1+}(k)\rangle\langle v_{1+}(k)| \otimes |v_{2-}(k)\rangle\langle v_{2-}(k)|\end{aligned} \tag{S67}$$

因此，将布里渊区离散为 $R+1$ 个片段，使波函数的变化足够平滑后，

$$\begin{aligned}\lim_{R\to\infty}\prod_{i=R}^{1} P(k_i) &= \lim_{R\to\infty}\prod_{i=R}^{1}\Big[|v_{1-}(k)\rangle\langle v_{1-}(k)| \otimes |v_{2+}(k)\rangle\langle v_{2+}(k)| + |v_{1+}(k)\rangle\langle v_{1+}(k)| \otimes |v_{2-}(k)\rangle\langle v_{2-}(k)|\Big] \\ &= \lim_{R\to\infty}\prod_{i=R}^{1}\Big[|v_{1-}(k)\rangle\langle v_{1-}(k)| \otimes |v_{2+}(k)\rangle\langle v_{2+}(k)|\Big] + \prod_{i=R}^{1}\Big[|v_{1+}(k)\rangle\langle v_{1+}(k)| \otimes |v_{2-}(k)\rangle\langle v_{2-}(k)|\Big] \\ &= \lim_{R\to\infty}\prod_{i=R}^{1}|v_{1-}(k)\rangle\langle v_{1-}(k)| \otimes \prod_{i=R}^{1}|v_{2+}(k)\rangle\langle v_{2+}(k)| + \prod_{i=R}^{1}|v_{1+}(k)\rangle\langle v_{1+}(k)| \otimes \prod_{i=R}^{1}|v_{2-}(k)\rangle\langle v_{2-}(k)| \\ &= \lim_{R\to\infty}\prod_{i=R}^{1} P_{1-}(k_i) \otimes \prod_{i=R}^{1} P_{2+}(k_i) + \prod_{i=R}^{1} P_{1+}(k_i) \otimes \prod_{i=R}^{1} P_{2-}(k_i)\end{aligned} \tag{S68}$$

$$\implies \mathcal{W}_{mn} = \langle u_m(k_0)| \lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} P_{1-}(k_i) \otimes \prod_{i=R}^{1} P_{2+}(k_i) |u_n(k_0)\rangle + \langle u_m(k_0)| \lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} P_{1+}(k_i) \otimes \prod_{i=R}^{1} P_{2-}(k_i) |u_n(k_0)\rangle \tag{S69}$$

其中

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_{11} &= \langle v_{1+}(k_0)| \lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} P_{1+}(k_i) |v_{1+}(k_0)\rangle \langle v_{2-}(k_0)| \prod_{i=R}^{1} P_{2-}(k_i) |v_{2-}(k_0)\rangle \\
\mathcal{W}_{11} &= \langle v_{1-}(k_0)| \lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} P_{1-}(k_i) |v_{1-}(k_0)\rangle \langle v_{2+}(k_0)| \prod_{i=R}^{1} P_{2+}(k_i) |v_{2+}(k_0)\rangle \\
\mathcal{W}_{21} &= \mathcal{W}_{12} = 0
\end{aligned} \tag{S70}$$

这表明 $\mathcal{W}_{mn}$ 由一个对角矩阵表示，可写为 $\mathcal{W} = \mathcal{W}_1\mathcal{W}_2$，从而得出相同的结论。

类似地，也可以求出垂直MKC的Wannier谱，它由方程（32c）中的子哈密顿量给出，

$$H^c_{MKC,\perp} = [-(2t_1 \cos k_x + \mu_1)\tau^z + 2\Delta_1 \sin k_x \tau^y] \otimes [(2t_2 \cos k_y + \mu_2)\sigma^z + 2\Delta_2 \sin k_y \sigma^y]. \tag{S71}$$

采用与前文所述平行MKC情形类似的约定，同时将 k 替换为向量 $\boldsymbol{k} = (k_x,\ k_y)$，根据$\mathbf{A}(\boldsymbol{k})$的定义，可知应有以下非阿贝尔贝里联络矢量，

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}(\boldsymbol{k}) =& i \begin{pmatrix} \langle v_{1-}(k_x)| \partial_{k_x} |v_{1-}(k_x)\rangle \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{x}} + \langle v_{2+}(k_y)| \partial_{k_y} |v_{2+}(k_y)\rangle \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{y}} & 0 \\ 0 & \langle v_{1+}(k_x)| \partial_{k_x} |v_{1+}(k_x)\rangle \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{x}} + \langle v_{2-}(k_y)| \partial_{k_y} |v_{2-}(k_y)\rangle \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{y}} \end{pmatrix}, \\
=& i \begin{pmatrix} \langle v_{1-}(k_x)| \partial_{k_x} |v_{1-}\rangle \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{x}} & 0 \\ 0 & \langle v_{1+}(k_x)| \partial_{k_x} |v_{1+}\rangle \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{x}} \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \langle v_{2+}(k_y)| \partial_{k_y} |v_{2+}(k_y)\rangle \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{y}} & 0 \\ 0 & \langle v_{2-}(k_y)| \partial_{k_y} |v_{2-}(k_y)\rangle \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{y}} \end{pmatrix}, \\
=& A_1 \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{x}} + A_2 \hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{y}}.
\end{aligned} \tag{S72}$$

我们首先考虑用占据态上的投影算符来表示威尔逊环，如方程（S66）所示。在半填充时，垂直MKC的占据态投影算符为，

$$\begin{aligned}
P(k_x, k_y) =& |u_1(k_x, k_y)\rangle \langle u_1(k_x, k_y)| + |u_2(k_x, k_y)\rangle \langle u_2(k_x, k_y)|, \\
=& |v_{1+}(k_x)\rangle \langle v_{1+}(k_x)| \otimes |v_{2-}(k_y)\rangle \langle v_{2-}(k_y)| + |v_{1-}(k_x)\rangle \langle v_{1-}(k_x)| \otimes |v_{2+}(k_y)\rangle \langle v_{2+}(k_y)|
\end{aligned} \tag{S73}$$

可以对 k_x 或 k_y积分来计算威尔逊环。假设对于给定的 k_y，沿 k_x 方向的布里渊区被离散为 $R+1$ 段（假设波函数足够光滑），另一种情况也可类似处理，

$$\begin{aligned}
\lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} P(k_{xi}, k_y) &= \lim_{R\to\infty} \prod_{i=R}^{1} \Big[|v_{1+}(k_{xi})\rangle \langle v_{1+}(k_{x1})| \otimes |v_{2-}(k_y)\rangle \langle v_{2-}(k_y)| + |v_{1-}(k_{xi})\rangle \langle v_{1-}(k_{xi})| \otimes |v_{2+}(k_y)\rangle \langle v_{2+}(k_y)| \Big], \\
&= \lim_{R\to\infty} \left[\prod_{i=R}^{1} |v_{1+}(k_{xi})\rangle \langle v_{1+}(k_{xi})| \right] \otimes |v_{2-}(k_y)\rangle \langle v_{2-}(k_y)| \\
&\quad + \left[\prod_{i=R}^{1} |v_{1-}(k_{xi})\rangle \langle v_{1-}(k_{xi})| \right] \otimes |v_{2+}(k_y)\rangle \langle v_{2+}(k_y)|, \\
&= \lim_{R\to\infty} \left[\prod_{i=R}^{1} P_{1+}(k_{xi}) \right] \otimes P_{2-}(k_y) + \lim_{R\to\infty} \left[\prod_{i=R}^{1} P_{1-}(k_x) \right] \otimes P_{2+}(k_y).
\end{aligned} \tag{S74}$$

根据定义，我们得到如下 Wilson环矩阵：

$$\mathcal{W}_{mn}(k_y) = \langle u_m(k_{x0}, k_y)| \lim_{R\to\infty} \left[\prod_{i=R}^{1} P_{1+}(k_{xi}) \right] \otimes P_{2-}(k_y) + \lim_{R\to\infty} \left[\prod_{i=R}^{1} P_{1-}(k_x) \right] \otimes P_{2+}(k_y) |u_n(k_{x0}, k_y)\rangle, \tag{S75}$$

因此， $\mathcal{W}_{11}(k_y) = \mathcal{W}_{11}$ 和 $\mathcal{W}_{22}(k_y) = \mathcal{W}_{22}$ 可表示为：

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_{11} &= \langle v_{1+}(k_{x0})| \lim_{R\to\infty}\left[\prod_{i=R}^{1} P_{1+}(k_{xi})\right]|v_{1+}(k_{x0})\rangle\,,\\ \mathcal{W}_{22} &= \langle v_{1-}(k_{x0})| \lim_{R\to\infty}\left[\prod_{i=R}^{1} P_{1-}(k_{xi})\right]|v_{1-}(k_{x0})\rangle\,,\\ \mathcal{W}_{12} &= \mathcal{W}_{21} = 0.\end{aligned} \tag{S76}$$

第二个母体的特征向量所对应的投影算符，与张量积特征向量中占据基对应的第二个母体的特征向量进行收缩，从而得到全部四个矩阵元 $\mathcal{W}_{mn}(k_y) = \mathcal{W}_{mn}$，作为 k_y 个相互独立的项。这意味着，对给定动量分量进行积分所计算出的威尔逊环，与另一个动量分量无关。此前我们提到，由于 $\mathcal{W}$ 的幺正性，威尔逊环本征值具有 $e^{i2\pi\nu_i}$ 的形式。在这里， ν_i 是 i^{th} Wannier电荷中心。我们将沿 k_x 的威尔逊环所产生的 Wannier电荷谱记为 $\{\nu_i(k_y)\}_{x}$。对于每个 k_y 值，通过对 k_x 进行积分计算得到的子哈密顿量的 i^{th} Wannier 电荷中心，即 $\nu_i(k_y)$，等于母哈密顿量沿穿过 k_x（此处为母体1）的环计算得到的 Wannier电荷中心。类似地，对于给定的 k_x，通过对 k_y 积分计算得到的子哈密顿量的 i^{th} Wannier电荷中心，即 $\nu_i(k_x)$，等于母哈密顿量沿穿过 k_y（此处为母体2）的环计算得到的 Wannier电荷中心，因此

$$\begin{aligned}\nu_i(k_y) &= \nu^{(1)} \bmod 1,\\ \nu_i(k_x) &= \nu^{(2)} \bmod 1,\end{aligned} \tag{S77}$$

其中， $\nu^{(j)}$ 是由 j^{th} 母体产生的Wannier电荷中心。这里， $\{\nu_i（k_y）\}$ 和 $\{\nu_i（k_x）\}$ 的谱均为二重简并（模 1 意义下），且分别等于相应母体的Wannier电荷中心值。

S3：MKC垂直情形的绕数计算：

考虑MKC垂直情形下分量哈密顿量对应的布洛赫哈密顿量：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\perp,1}(\boldsymbol{k}) = &-((\mu_1 + 2t_1\cos k_x)(\mu_2 + 2t_2\cos k_y) - 4\Delta_1\Delta_2\sin k_x\sin k_y)\sigma^z\\ &+ (2\Delta_1\sin k_x(\mu_2 + 2t_2\cos k_y) + 2\Delta_2\sin k_y(\mu_1 + 2t_1\cos k_x))\sigma^y = (0, d_{1,y}, d_{1,z})\cdot\boldsymbol{\sigma},\end{aligned} \tag{S78a}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\perp,2}(\boldsymbol{k}) = &-((\mu_1 + 2t_1\cos k_x)(\mu_2 + 2t_2\cos k_y) + 4\Delta_1\Delta_2\sin k_x\sin k_y)\sigma^z\\ &+ (2\Delta_1\sin k_x(\mu_2 + 2t_2\cos k_y) - 2\Delta_2\sin k_y(\mu_1 + 2t_1\cos k_x))\sigma^y = (0, d_{2,y}, d_{2,z})\cdot\boldsymbol{\sigma}.\end{aligned} \tag{S78b}$$

由于我们希望在两个方向的周期性边界条件下，绘制给定 k_y时随 k_x变化的布洛赫矢量（d_1，$_y$，d_1，$_z$）和（d_2，$_y$，d_2，$_z$），反之亦然，因此先求参数 k_x 在给定 k_y时曲线的轨迹。记 $M_2 = \mu_2 + 2t_2\cos k_y$和 $R_2 = 2\Delta_2\sin k_y$。进一步记$\cos\theta = \frac{M_2}{\sqrt{M_2^2+R_2^2}}$和$\sin\theta = \frac{R_2}{\sqrt{M_2^2+R_2^2}}$。则参数曲线（$d_1$，$_y$，$d_1$，$_z$）的轨迹如下所示：

$$\frac{(\cos\theta d_{1,y} + \sin\theta d_{1,z})^2}{4\Delta_1^2(M_2^2+R_2^2)} + \frac{(\cos\theta d_{1,z} - \sin\theta d_{1,y} + \mu_1\sqrt{M_2^2+R_2^2})^2}{4t_1^2(M_2^2+R_2^2)} = 1. \tag{S79}$$

由于正文中我们绘制的是 $t_1 = \Delta_1$，实施这一条件后，我们进一步得到：

$$(\cos\theta d_{1,y} + \sin\theta d_{1,z})^2 + (\cos\theta d_{1,z} - \sin\theta d_{1,y} + \mu_1\sqrt{M_2^2+R_2^2}) = (2t_1\sqrt{M_2^2+R_2^2})^2. \tag{S80}$$

很容易看出，这是一个圆，其坐标旋转了 θ 角，圆心和半径则受到另一个母体以 $\sqrt{M_2^2+R_2^2}$调制，但这并不会改变系统处于拓扑相的参数范围。对于 y 方向有 L_y 个格点的周期性边界条件，我们得到 L_y 个这样的圆，它们分别旋转了 L_y 角，这本质上就是正文中得到的结果。

S4 临界点附近能量随参数 μ的变化：

我们将考虑 MKC 平行哈密顿量色散关系的两种情况：(i)$\mu_1 = \mu_2 = \mu$、 $t_1 = t_2 = t$ 和 $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$，以及(ii) $\frac{\mu_1}{t_1} = -\frac{\mu_2}{t_2} = \frac{\mu}{t}$和 $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$。对于(i)，子色散关系的形式为，

$$E(k) = (2t\cos k + \mu)^2 + 4\Delta^2\sin^2 k. \tag{S81}$$

设 $\mu = -2t + \delta\mu$ 在 $k = 0$处的临界点附近，因此必须满足，

$$E(k=0) \approx (2t - 2t + \delta\mu)^2, \implies E(k=0) \sim \delta\mu^2. \tag{S82}$$

对于（ii），子色散关系为：

$$\begin{aligned} E(k) =& \sqrt{((2t\cos k + \mu)^2 + 4\Delta^2 \sin^2 k)((2t\cos k - \mu)^2 + 4\Delta^2 \sin^2 k)}, \\ =& \sqrt{(4t^2\cos^2 k + 4\Delta^2 \sin^2 k + \mu^2)^2 - 16t^2\mu^2\cos^2 k}. \end{aligned} \tag{S83}$$

再次，我们令 $\mu = -2t + \delta\mu$ 接近临界点 $k = 0$，由此得到，

$$\begin{aligned} E(k=0) &\approx \sqrt{(4t^2 + (-2t + \delta\mu)^2)^2 - 16t^2(-2t + \delta\mu)^2}, \\ &\approx 4t^2 - (-2t + \delta\mu)^2 \approx 4t\delta\mu + \delta\mu^2 \implies E(k=0) \sim \delta\mu. \end{aligned} \tag{S84}$$

S5 MKC 平行系统中马约拉纳零模的鲁棒性：

这里，我们展示了 MKC 的更多薄板能谱，它们随化学势 μ_1 变化，并对应多种无序项：$\mu_1 = -\mu_2$ 见图 S24，$\mu_2 = 0$ 见图 S25，$\mu_2 = 3$ 见图 S26。马约拉纳零模对正比于 $\tau^i\sigma^j$ 的位点无序项的稳定性，表现为在 μ_1的有限区间内存在零能模。

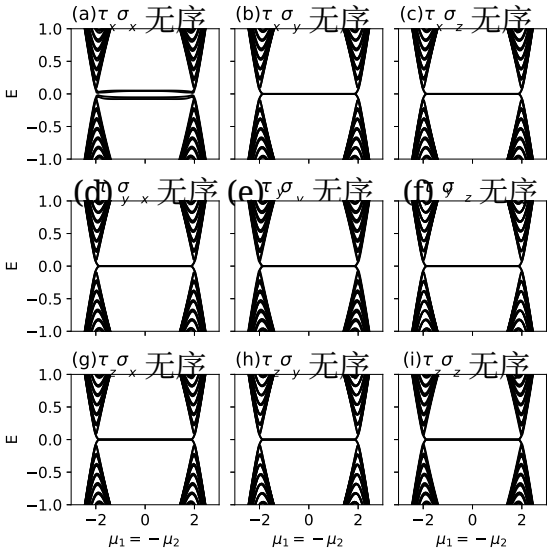


图 S24：对于情形 $\mu_1 = -\mu_2$，MKC 平行系统中的马约拉纳零模再次对除 $\tau^x\sigma^x$以外的所有 $\tau^i\sigma^j$ 无序均具有鲁棒性。

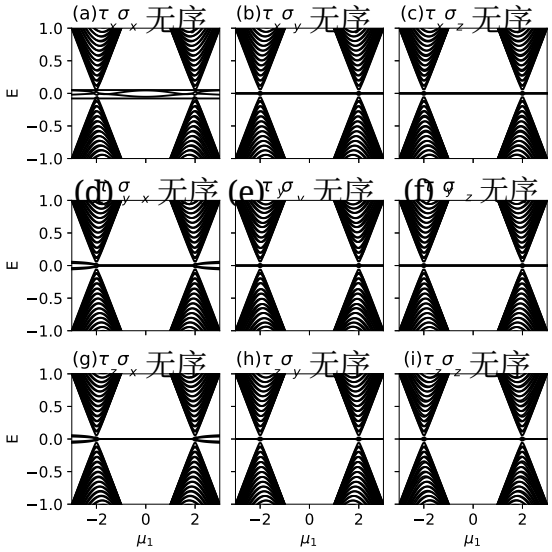


图 S25：检查给定 $\mu_2 = 0$并在 μ_1 范围内变化时，所有无序 $\tau^i\sigma^j$ 组合下的鲁棒性。范围（$-2t_1$，$2t_1$）内的马约拉纳零模始终具有鲁棒性，除 $\tau^x\sigma^x$外；而该范围之外的马约拉纳零模在 $\tau^i\sigma^x$时会受到无序影响。

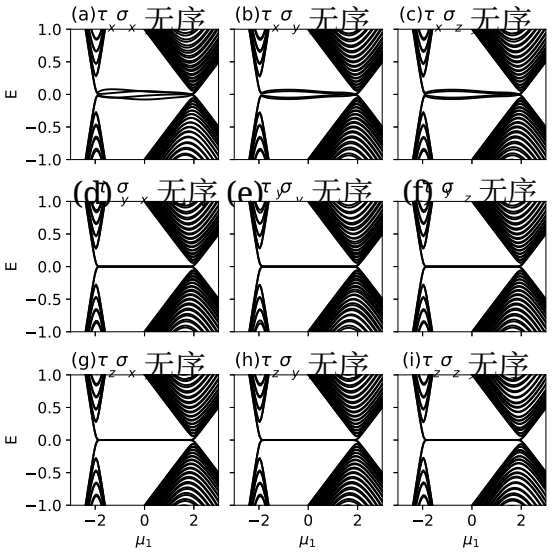


图 S26：检查给定 $\mu_2 = 3$并在 μ_1 范围内变化时，所有无序 $\tau^i\sigma^j$ 组合下的鲁棒性。范围（$-2t_1$，$2t_1$）内的马约拉纳零模始终具有鲁棒性，除 $\tau^x\sigma^x$外；而该范围之外的马约拉纳零模在 $\tau^x\sigma^j$时会受到无序影响。