



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**ESTADOS DE ARISTA DEPENDIENTES DE LA GEOMETRÍA EN
SEMIMETALES TOPOLÓGICOS DE ORDEN SUPERIOR**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRA EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
ALONDRA JAZMÍN TAPIA DE LA ROSA

TUTOR
DR. JOSÉ EDUARDO BARRIOS VARGAS
FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM.
COMITÉ TUTOR
DR. THOMAS WERNER STEGMANN
INSTITUTO DE CIENCIAS FÍSICAS, UNAM.
DR. JOSÉ ALBERTO MARTÍN RUIZ
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES, UNAM.

CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO, DICIEMBRE, 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

- Sinodal 1: Dr. Luis Antonio Pérez López
Sinodal 2: Dr. José Eduardo Barrios Vargas
Sinodal 3: Dr. Oracio Navarro Chávez
Sinodal 4: Dr. Carlos Ramírez Ramos
Sinodal 5: Dr. Miguel Cruz Irisson

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. José Eduardo Barrios Vargas
Facultad de Química, UNAM.

Agradecimientos

Agradezco en primer lugar a mi tutor principal el Dr. José Eduardo Barrios Vargas, por su guía, su amistad, su confianza, apoyo y completa comprensión durante toda realización de este proyecto. También agradezco a los miembros de mi Comité tutor: el Dr. José Alberto Martín Ruiz y el Dr. Thomas Werner Stegmann por su disponibilidad, atención y consejos los cuales me permitieron llevar a cabo de forma exitosa la escritura de esta tesis. Agradezco también a todos los miembros de mi jurado: al Dr. Miguel Irisson, al Dr. Luis Pérez, al Dr. Carlos Ramírez y al Dr. Oracio Navarro por sus valiosos comentarios que permitieron el enriquecimiento de este trabajo.

Más allá de todo lo académico me gustaría agradecer a mi familia: a mi mamá Rosa, cuya vida ha sido de nuestros logros y nuestras derrotas, te dedico este trabajo y te agradezco por haber nutrido mi cuerpo y mi mente desde el primer segundo que pise este mundo. A mi papá César, quien me enseñó a amar la ciencia y a nunca darme por vencida, te dedico este logro y te agradezco todos los sacrificios que hiciste para que jamás faltara nada en casa y yo pudiera cumplir con todos mis propósitos, le agradezco también a mi hermano Edwin con quien he compartido todo; desde mis primeros pasos hasta el orgullo de la sangre. Gracias familia, porque aún sin entender por completo mi trabajo o a lo que me dedico, me han brindado su apoyo y amor incondicionalmente.

Agradezco a la familia Uthoff Rodríguez por brindarme lo más valioso que una familia puede dar: la sensación de pertenecer a un hogar. Le agradezco principalmente a Leonardo, por ser mi mejor amigo y compañero de vida y aventuras. Gracias Leo, sin ti no estaría donde estoy ahora, te agradezco por apoyarme incondicionalmente en todas mis decisiones y enseñarme a amar la vida en todas sus facciones.

Me gustaría agradecer a mis amigos de Lotus: Bruno Rodríguez y Mítzi Olvera, quienes probablemente piensan que no tuvieron ninguna inferencia en la realización de este trabajo, sin embargo, su compañía, su amistad, las risas y los momentos extraordinarios y bellos que hemos compartido durante todo este tiempo fueron en infinidad de ocasiones lo que más me motivó para seguir adelante. Gracias, amigos. Ningún texto será suficiente para agradecer todo lo que me han dado.

Continúo agradeciendo a Mauricio Rodríguez, por todos los momentos que hemos compartido tanto dentro como fuera del ámbito académico, recordándome siempre hacer mis trámites, pero más importante aún, gracias Mauricio por compartir tu vida conmigo, porque constantemente eres un motivo para ser feliz.

Quiero agradecer a los que siempre consideraré mis mejores amigos durante mi carrera en ciencias: a Jorge Betancourt, fefesito, por sus buenos consejos y gracias a cuales estoy donde estoy. A Emmanuel Franco, momito, porque fue la primer persona a quien conocí desde mis primeros días en la Facultad de Ciencias y no dudó ni un segundo en integrarme a sus (ahora nuestros) amigos. A Eduardo Conde, por todas las risas compartidas, por ser un ejemplo de constancia y cambio. A Julio Azuara, por los momentos divertidos y por hacerme administradora de su proyecto más grande. A Alejandro Polanco, pushcat, por toda la diversión y por ser un ejemplo de lo que es un verdadero amigo y a Sergio Ramírez, por todos los momentos agradables de chismes y risas, por mostrarme que la amistad perdura más allá de la distancia y las fronteras. En fin, gracias Kariñositos, porque siempre estarán presentes en este trabajo y en los que vienen. Agradezco especialmente a Jonathan Urrutia, quien sin saberlo, me ayudó a que esta tesis sea bonita.

Agradezco con mucho cariño a mis amigos del club de robótica de la Facultad de Ciencias: a Valente Vázquez, Donají Xóchitl, Fernando Ángeles, Luis Ramírez y Katy. Quienes me dieron la oportunidad de ser su ayudante, enseñándome y permitiéndome crecer en mis primeros pasos como docente. Les agradezco infinitamente todos los consejos, las atenciones prestadas, las historias contadas y las comidas deliciosas compartidas.

Agradezco también a los topoamigos: a Montserrat Navarro por ser mi primer amiga durante la maestría, por los momentos lindos compartidos y las tardes (y noches) de chismes e historias de vida. A Kean Castañeda por su contribución para los cálculos de esta tesis. También agradezco a Laura Michelle, por todos los buenos consejos y la diversión que su estadía ortoga al grupo. Agradezco también a Dieguito Bautista, su inocencia y perseverancia me han recordado lo bonito que es estudiar física. ¡Muchas gracias topoamigos!

Sin restarles importancia, agradezco también a mis dos mejores amigos de toda la vida y quienes han sido una pieza fundamental en todas las decisiones y acciones que he llevado a cabo hasta ahora: Héctor Gil y Jennifer Quiroz. Esta de más agradecerles por todo lo que han hecho por mí, principalmente porque me han amado más allá de lo que puede amarse a un amigo. Todo lo que soy y lo que he logrado en parte es gracias a que pude conocerlos y en todos mis logros (incluida la realización de esta tesis) esta plasmada la huella que han dejado en mi desde la infancia. Muchas Gracias.

Muchas gracias a todos aquellos profesores y grandes maestros y maestras de quienes he tenido la oportunidad de aprender y quienes me enseñaron lo más valioso que puede dar un profesor: el amor por aprender cosas nuevas. Gracias José Luis Sánchez García, Luis Manuel Gallardo, Alejandro Reyes Coronado, José Ángel Castellanos y Carlos Ramírez.

Finalmente, agradezco a la CONACyT por la beca otorgada durante toda mi estancia en la maestría y gracias a la cual tuve la oportunidad de dedicarme de tiempo completo a este proyecto. De igual forma agradezco a los proyectos CONACyT FRONTERA 428214 y al proyecto PAPIIT IA-106021 por el apoyo otorgado.

*A mi familia por su amor incondicional desde el inicio,
a mi madre y su ternura,
a mi padre y su sacrificio.*

*A Teffi,
Copo de Nieve,
Chiquis,
y Tom,
los amores de mi vida.*

Resumen/Abstract

En la presente tesis se realiza el estudio de la dependencia geométrica de los estados de arista en un semimetal topológico de orden superior construido a partir del apilamiento de capas bidimensionales cuya base es la red de Kagome. Como primer paso, se introducen los conceptos básicos que permiten la comprensión de los materiales topológicos de orden superior, particularmente de aquellos que poseen estados degenerados. Adicionalmente, se realiza una introducción al formalismo de Landauer para el cálculo de la conductancia. Como parte de los resultados de este trabajo, se analizan las bandas energéticas asociadas al bulto del sistema como función de los parámetros de su hamiltoniano de amarre fuerte. Paralelamente se realiza el cálculo del invariante topológico del sistema el cual se identifica como la polarización. Se realiza el análisis de la dependencia geométrica de los estados de arista a través del cálculo de la estructura de bandas para tres arreglos finitos distintos: base triangular, hexagonal y paralelogramo. Adicionalmente se realiza un análisis de la robustez de los estados conductores topológicamente protegidos al imponer un desorden en el valor de las energías de sitio. Finalmenre se analiza el comportamiento de la conductancia para estos tres dispositivos electrónicos con dos terminales.

In this thesis, is done the study of the geometric dependence of the edge states in a higher-order topological semimetal constructed from the stacking of two-dimensional layers whose basis is the Kagome lattice. As a first step, are introduced the basic concepts that allow the understanding of higher order topological materials, in particular those that have degenerate states. Additionally, an introduction to the Landauer formalism for the calculation of conductance is made. As part of the results of this work, the energy bands associated with the bulk of the system are analyzed as a function of the parameters of its Hamiltonian. At the same time, the calculation of the topological invariant of the system is carried out, which is identified as polarization. The analysis of the geometric dependence of the edge states is carried out through the calculation of the band structure for three different finite arrays: triangular, hexagonal, and parallelogram basis. Further, an analysis of the robustness of the topologically protected conductive states is performed by imposing a disorder in the value of the site energies. Finally, is analyzed the behavior of the conductance for these three electronic devices with two terminals.

Índice general

Agradecimientos	II
Resumen	VI
1. Introducción	1
Introduccion	1
2. Teoría	4
2.1. Aislantes topológicos de orden superior (HOTI's)	4
2.2. Fase de Berry y Conexión de Berry	6
2.3. Formulación discreta de la fase de Berry	11
2.4. Funciones de Wannier	12
2.5. Formulación multibanda de la fase de Berry (Wilson Loop)	14
2.6. Polarización eléctrica	16
2.7. Formulación de Landauer para la conductancia	19
3. Resultados y discusión	23
3.1. Red de Kagome	23
3.2. Simetrías de la red y hamiltoniano del sistema	25
3.3. Cálculo del Wilson Loop y Polarización eléctrica	28
3.4. Sistema finito triangular	30
3.5. Sistema finito hexagonal	35
3.6. Sistema finito paralelogramo	38
3.7. Cálculo del transporte electrónico	41
Conclusiones	44
A. Hamiltoniano de amarre fuerte del sistema	46
B. Modelo SSH unidimensional	50

Capítulo 1

Introducción

Las primeras ideas acerca de los aislantes topológicos introducidos como una nueva fase de la materia fueron planteadas por Kane y Mele en 2005 [1] y a partir de entonces el estudio de las propiedades que subyacen en estos nuevos materiales se ha mantenido como un campo realmente activo tanto en la física experimental como en la física teórica. De hecho, la rama de las fases topológicas fue condecorada con el Premio Nobel de Física en 2016, demostrando su papel fundamental en la física actual. Al momento en que se escribe este trabajo se han publicado ya decenas de miles de artículos en los cuales las fases topológicas han sido clave fundamental de estudio y esto no es más que el reflejo de la gran importancia que han adquirido estos materiales en la investigación actual. Comprender los principios básicos del cómo y el por qué surgen los materiales topológicos ha sido la clave fundamental para su implementación en dispositivos electrónicos reales.

Una de las primeras cuestiones a comprender al momento de sumergirnos en el mundo de los materiales topológicos, es precisamente entender a que nos referimos con la palabra *topología*. La topología es una de las ramas más profundas y de mayor importancia en el campo de las matemáticas dedicada al estudio de las propiedades de los cuerpos geométricos y sus transformaciones en el espacio. La conexión de esta rama con la física ha permitido establecer nuevas propiedades con aplicaciones tecnológicas y también ha permitido establecer nuevos puentes entre la física de altas y bajas energías [2]. Dentro del campo de la topología todos los objetos geométricos existentes pueden asociarse a una cantidad denominada el *invariante topológico*. De esta forma dos objetos que posean la misma clase topológica comparten en común el mismo valor de su invariante topológico. Por ejemplo, se dice que una esfera es topológicamente equivalente a cualquier otro objeto geométrico existente siempre y cuando la deformación de la esfera para conseguir dicho objeto no incluya la creación de un agujero y en este sentido el número de agujeros representa el invariante topológico. Esta misma analogía se utiliza cuando se dice que una taza de café y una dona son topológicamente equivalentes y también puede ser aplicada a transformaciones en los parámetros de un hamiltoniano. Por otro lado, el desarrollo de la teoría de bandas ha permitido describir de forma eficaz e intuitiva el comportamiento electrónico de los materiales permitiendonos diferenciar si un material se comportará como aislante, como semimetal o como metal a través del análisis del hamiltoniano que describe al sistema y de sus eigenenergías (bandas). Desde la perspectiva pre-topológica en la teoría de bandas solamente importan los eigenvalores

del hamiltoniano del sistema, sin embargo, en la perspectiva topológica los eigenvectores también cobrarán relevancia ya que nos permitirán calcular el invariante topológico.

Hasta el descubrimiento del efecto Hall cuántico en 1980 [3] se creía que todos los aislantes eran equivalentes (es decir, que compartían la misma clase topológica), sin embargo, el avance crucial que reveló el descubrimiento de este efecto fue la revelación de una nueva clase de aislantes cuyo hamiltoniano no estaba conectado a los hamiltonianos de los aislantes triviales. Al calcular las eigenenergías de estos hamiltonianos cualquier proceso que imaginemos conectando a estos dos distintos tipos de aislantes cerrará una brecha energética o *gap* [4]. En términos de las bandas cerrar o abrir una brecha energética será análogo a crear o eliminar un agujero: ambos procesos modifican la clase topológica. En el modelo propuesto para el efecto Hall cuántico los electrones se encuentran confinados a moverse en un plano bidimensional y al aplicarles un campo magnético la física dicta que la trayectoria de los electrones tendrá forma de ciclotrón [5]. Cuando consideramos la existencia de bordes en un arreglo finito, en los extremos de un aislante común no ocurrirá nada impresionante, sin embargo, en los bordes de un material bidimensional topológico sometido a un campo magnético lo suficientemente fuerte harán que las órbitas de ciclotrón de los electrones deban rebotar y seguir su camino, formando un estado conductor en el extremo de la muestra. Estos estados de borde de los electrones son extremadamente robustos ya que los electrones están forzados por los bordes de la muestra y por el campo magnético a seguir una sola dirección. Dado que los electrones no pueden saltar de un extremo a otro debido a la anchura del material, la única forma de transformar un aislante Hall cuántico a un aislante trivial será consiguiendo que los estados de ciclotrón conduzcan, conectando ambos bordes. Como esto solo puede ocurrir cuando el *gap* se cierra, entonces se dice que el efecto Hall cuántico es una fase topológicamente diferente al aislante trivial [2]. Más adelante se supo que las fases topológicas no se inducen únicamente por medio de campos magnéticos si no que éstos también pueden surgir naturalmente en metales pesados en los cuales la interacción espín-órbita de sus electrones es fuerte [1].

Conectando todas las ideas anteriores, definiremos como *aislante topológico* a un material con estados de superficie conductores, los cuales nacen debido a la topología del sistema y están topológicamente protegidos y pueden presentarse tanto en dos como en tres dimensiones [6]. A cada una de las clases topológicas distintas de un aislante se les asociará un valor específico de un invariante, lo que nos permitirá distinguir eficazmente entre un aislante trivial y un aislante topológico y aún más sorprendente: ¡el invariante estará relacionado matemáticamente con una cantidad físicamente medible!. La existencia de los estados superficiales conductores en estos materiales solo dependerá del valor del invariante topológico y de que éste se mantenga lo que los hace inmunes ante impurezas y otros defectos dentro del material. Esta es una de las razones por las cuales se tiene la certeza de que los materiales topológicos revolucionarán a los dispositivos electrónicos del futuro. En años posteriores al descubrimiento de los aislantes topológicos, se descubrió que el surgimiento de nuevas fases topológicas no estaba restringida únicamente a los aislantes y que podía extenderse también a los semimetales y esto abrió la puerta al estudio de lo que hoy conocemos como semimetales de Weyl y de Dirac [7, 8]. Más recientemente se ha descubierto que los estados superficiales conductores pueden restringirse y localizarse sólo en las aristas o en las esquinas del material [9], lo que abrió paso a una nueva rama: los materiales topológicos de orden superior.

El objetivo de esta tesis es estudiar los efectos de la geometría en los estados de borde de un semimetal topológico de orden superior. En el primer capítulo de esta tesis se presenta una

introducción sobre los conceptos básicos que permiten la comprensión de las fases topológicas de orden superior en semimetales como lo son: la fase de Berry, el Wilson Loop y la polarización eléctrica, con el fin de poder dar pie a la caracterización de un invariante asociado a un semimetal topológico cuya base cristalina será la red de Kagome. Dado que el transporte electrónico actúa como la firma de cualquier nanodispositivo ya que su cálculo se encuentra dentro de los primeros pasos para considerar una futura implementación en dispositivos electrónicos reales, en el capítulo 1 también se presentan los principios básicos para el cálculo de la conductancia en sistemas nanoestructurados utilizando la formulación de Landauer. En el capítulo 2, se presentan los resultados de esta tesis. A partir del hamiltoniano de amarre fuerte del sistema periódico cuya base es la red de Kagome tridimensional se caracteriza al valor de la polarización eléctrica como el invariante topológico de nuestro sistema. Posterior a ello y como parte de los objetivos de este trabajo, se estudia el comportamiento de las bandas de los estados de borde de tres sistemas finitos con estructuras geométrías distintas y también se compara el comportamiento de la conductancia para estos tres arreglos. Finalmente, en el capítulo 3 se exhiben las conclusiones de esta tesis.

Capítulo 2

Teoría

”But still try for who knows what is possible!” -Michael Faraday.

2.1. Aislantes topológicos de orden superior (HOTI's)

La estructura de bandas de un aislante topológico convencional (TI, por sus siglas en inglés) esta caracterizada por poseer estados asociados al bulto¹ con brechas energéticas y estados de borde sin dichas brechas [10]. El surgimiento de estos estados de borde sin brechas estará determinado y protegido por un *invariante topológico*² asociado al bulto y a la preservación de las simetrías presentes en el sistema. En los años más recientes se ha descubierto un nuevo tipo de TI, el cual alberga estados sin brechas energéticas asociados a las aristas (o *hinges*, por su nombre en inglés) o a las esquinas del sistema [9]. Estos aislantes topológicos no convencionales se han denominado *aislantes topológicos de orden superior* (HOTI's por sus siglas en inglés).

Por ejemplo, un HOTI 3D de primer orden (o también llamado TI) tendrá estados de borde asociados a su superficie (en 2D) sin brechas energéticas. Por otro lado, un HOTI 3D de segundo orden presentará estados sin brechas energéticas asociados a sus aristas (en 1D) o a tercer orden asociados a sus esquinas (en 0D)(véase Fig.2.1). La aparición de estados de arista y estados de esquina topológicamente protegidos es el reflejo de la interacción entre la simetría cristalina y la topología de sus bandas. En los trabajos pioneros relacionados a estos sistemas [9, 11] el surgimiento de los aislantes topológicos de orden superior se dio al estudiar las transiciones de fase del hamiltoniano asociado a los bordes de un cristal, es decir, al estudiar como los estados

¹Todas aquellas partes del sistema que poseen periodicidad debido a la ausencia de bordes.

²Propiedad de un espacio topológico que es invariante bajo *transformaciones suaves*.

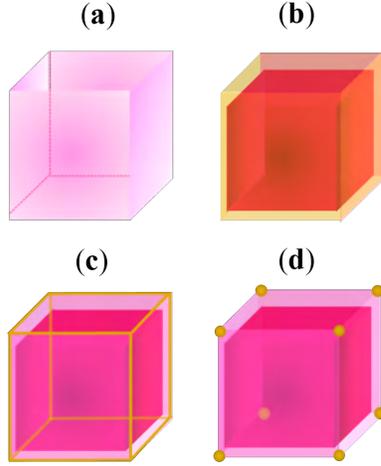


Fig. 2.1: Clasificación de los aislantes topológicos tridimensionales de orden superior.(a) aislante con topología trivial. (b) aislante topológico convencional con estados de borde en 2D (capa exterior del sistema). (c) aislante topológico 3D de segundo orden con estados topológicos asociados a sus aristas en 1D. (d) aislante topológico 3D de tercer orden con estados topológicos asociados a sus esquinas en 0D.

de borde sin gap pueden volver a separarse mediante la adición de un término que rompa con ciertas simetrías pertenecientes al sistema (por ejemplo, esto puede ocurrir al aplicar un campo magnético). Como consecuencia, al estudiar la interfase entre dos áreas topológicamente distintas, emergen estados conductores asociados a dimensiones menores como a las aristas en 1D o a las esquinas en 0D.

Como se mencionó anteriormente, las fases topológicas de la materia se encuentran caracterizadas mediante invariantes que están asociados a cantidades físicas cuantificables tales como la polarización de carga, la conductancia Hall o la polarizabilidad magnetoelectrica y éstas pueden ser expresadas matemáticamente como integrales de un potencial de Berry [10] y tienen una forma similar a momentos dipolares para sistemas 1D, 2D y 3D respectivamente. Es posible extender este concepto para los ordenes superiores en donde los momentos dipolares de orden superior como los cuadrupolos u octopolos actuarán como las cantidades topológicas observables [9]. Este tipo de sistemas se denominan *aislantes multipolares* (QMI, por sus siglas en inglés) e históricamente fueron los primeros sistemas en los cuales se descubrió que se podían albergar fases topológicas con estados de borde de dimensiones menores, como los estados de esquina. A pesar de que las realizaciones experimentales de estos sistemas son posibles [11, 12], en general existirán dificultades ya que requieren de la creación de sistemas que tengan simetrías de espejo no conmutativas [10].

Actualmente ya se han reportado prototipos de HOTI's cuyos invariantes no están representados por medio de momentos cuadrupolares u octopolares, tal es el caso del modelo SSH bidimensional en una red cuadrada [13] que exhibe estados de borde sin brechas asociados a sus esquinas pero éstos surgen naturalmente al modular los valores de los acoplamientos (o hoppings) intercelda e intracelda en el sistema. La expresión matemática del invariante topológico asociado a este tipo de HOTI's tendrá la forma de un momento dipolar el cual se puede escribir mediante una integral del potencial de Berry. La primera realización experimental de este modelo se realizó en cristales fotónicos dieléctricos en 2018 [13, 14] utilizando varillas de aluminio en una configuración similar a la del modelo SSH bidimensional (véase Fig.2.2). El ajuste de los

parámetros geométricos que modelaban los acoplamientos intercelda e intracelda condujeron a la construcción del diagrama de sus fases topológicas, las cuales estaban caracterizadas mediante el valor de la polarización del bulto. De forma similar se han construido sistemas experimentales mas allá del modelo SSH bidimensional en los cuales las simetrías C_n juegan un papel importante [15], uno de estos modelos fue un HOTI creado a partir de la red de Kagome bidimensional en cristales acústicos [16].

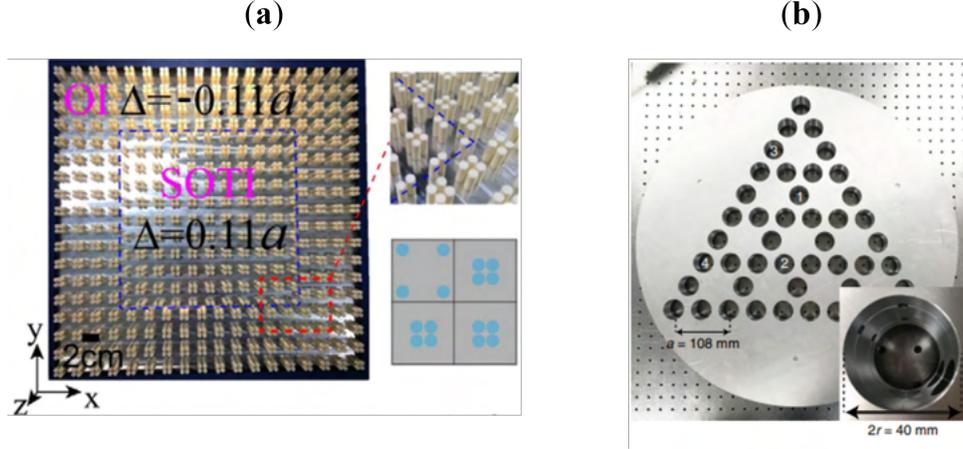


Fig. 2.2: Realizaciones experimentales de aislantes topológicos de orden superior. (a) Fotograma experimental de un aislante topológico bidimensional de segundo orden realizado para un cristal fotónico dieléctrico. Imagen recuperada de [14]. (b) Fotograma experimental de un aislante topológico bidimensional de segundo orden con simetría C_3 en un resonador acústico realizado para la red de Kagome. Imagen recuperada de [16].

Es importante mencionar que el surgimiento de estados de borde topológicos de orden superior no se restringe únicamente a los aislantes. Los sistemas con comportamientos semimetálicos, los cuales poseen degeneraciones en su estructura de bandas también pueden tener estados de borde conductores asociados a sus aristas o a sus esquinas. Recientemente se ha reportado en [17] un modelo de un semimetal tridimensional de Weyl de segundo orden construido a partir del apilamiento de capas bidimensionales cuya base es la red de Kagome. Este sistema es el principal objeto de estudio de este trabajo.

En las secciones siguientes se presentan las nociones básicas que nos permitirán comprender el comportamiento de la topología de las bandas para sistemas semimetálicos topológicos de orden superior.

2.2. Fase de Berry y Conexión de Berry

La fase geométrica o *fase de Berry* es un concepto de especial relevancia en el área de materia condensada que surge de la evolución adiabática de un eigenestado cuando un parámetro externo al sistema varía lentamente y realiza un ciclo completo en lo que se denomina el *espacio de parámetros*. Esta fase surge de forma natural al calcular el eigenestado asociado a un sistema cuántico después de haber recorrido dicho ciclo en el régimen adiabático, donde el resultado que se obtiene será la fase dinámica conocida debido a la evolución temporal del sistema más otro factor: la fase de Berry.

El primer trabajo que se conoce relacionado con esta fase es el artículo escrito por el físico hindú Shivaramakrishnan Pancharatnam [18] aunque fue hasta 1983, con el trabajo realizado por Sir Michael Berry [19] que el concepto cobró importancia como tema de investigación. En las últimas tres décadas la comprensión de la fase de Berry ha tenido un efecto profundo en el entendimiento de las propiedades de los materiales y es el responsable de un conjunto de fenómenos distintos, tales como el bombeo cuántico de carga, la polarización y el magnetismo orbital. Como se sugirió al inicio de esta sección, el cálculo de la fase de Berry será crucial para comprender el comportamiento de los sistemas topológicos de orden superior ya que nos permitirá identificar el invariante topológico asociado a estos sistemas.

A continuación se presenta la derivación de la fase de Berry siguiendo de cerca el formalismo utilizado en el artículo original de Sir Michael Berry [19].

Consideremos un sistema que se describe por medio de un hamiltoniano $\hat{H}(\mathbf{R})$ que depende del tiempo a través de un conjunto de parámetros ³ denotados por $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3, \dots)$ donde $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$. Nos interesa la evolución adiabática del sistema, es decir, la evolución del sistema a medida que los parámetros $\mathbf{R}(t)$ varían lentamente en el tiempo a lo largo de una trayectoria C . En principio la trayectoria C puede ser cerrada o abierta.

Resulta útil definir una base ortonormal de eigenestados de $\hat{H}(\mathbf{R})$ en cada punto \mathbf{R} del espacio de parámetros. Ésta se obtiene de diagonalizar $\hat{H}(\mathbf{R})$ para cada \mathbf{R} , lo que nos da como resultado la siguiente ecuación de eigenvalores:

$$\hat{H}(\mathbf{R}) |u_{\mathbf{R}}\rangle = E_n(\mathbf{R}) |u_{\mathbf{R}}\rangle. \quad (2.1)$$

Ahora supongamos que el sistema cuántico evoluciona a través del tiempo y que por lo tanto un eigenestado del mismo también evolucionará debido a la variación de los parámetros $\mathbf{R}(t)$ a lo largo de la trayectoria C . De acuerdo con el *teorema adiabático* [20, 21] un sistema que se encuentra inicialmente en un eigenestado $|u_{\mathbf{R}(0)}\rangle$ que varía lentamente permanecerá como un eigenestado instantáneo del hamiltoniano $\hat{H}(\mathbf{R}(t))$ durante el proceso. De esta forma, la única libertad que existe durante la evolución adiabática es un posible cambio de fase del estado cuántico, esto es, $|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta_n(t)} |u_{\mathbf{R}(t)}\rangle$. Es importante mencionar que, en un principio, esta fase no puede ser cero ya que al menos contiene el factor de fase dinámico conocido que depende de la energía del eigenestado. La evolución temporal del estado del sistema estará gobernada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$\hat{H}(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle. \quad (2.2)$$

Sustituyendo el estado $|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta_n(t)} |u_{\mathbf{R}(t)}\rangle$, de acuerdo al teorema adiabático, se obtiene:

³Ejemplos de tales parámetros pueden ser el campo magnético, el campo eléctrico o incluso el espacio recíproco \mathbf{k} .

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |u_{\mathbf{R}(t)}\rangle + \hbar \dot{\theta}_n(t) |u_{\mathbf{R}(t)}\rangle = E_n(\mathbf{R}(t)) |u_{\mathbf{R}(t)}\rangle. \quad (2.3)$$

Aplicando el bra $\langle u_{\mathbf{R}(t)}|$ y ya que los estados forman una base ortonormal, se obtiene:

$$\dot{\theta}_n(t) = \frac{1}{\hbar} E_n(\mathbf{R}(t)) - i \langle u_{\mathbf{R}(t)} | \partial_t |u_{\mathbf{R}(t)}\rangle. \quad (2.4)$$

La expresión final para esta fase será el resultado de integrar desde $t = 0$ hasta $t' = t$,

$$\theta_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' - i \int_0^t \langle u_{\mathbf{R}(t')} | \partial_{t'} |u_{\mathbf{R}(t')} \rangle dt'. \quad (2.5)$$

En esta última ecuación, el primer término puede identificarse como la fase dinámica usual de un estado que evoluciona en el tiempo, mientras que el segundo término es al que denominaremos la **fase de Berry**, la cual surgió de la evolución adiabática del eigenestado $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$. Por lo tanto, podemos escribir el eigenestado del sistema evolucionado de la siguiente forma:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt'} e^{i\phi_n} |u_{\mathbf{R}(t)}\rangle, \quad (2.6)$$

de donde el factor correspondiente a la fase de Berry es:

$$\phi_n = i \int_0^t \langle u_{\mathbf{R}(t')} | \partial_{t'} |u_{\mathbf{R}(t')} \rangle dt'. \quad (2.7)$$

Se puede apreciar que la fase de Berry surge del hecho de que los estados en t y en $t + dt$ no son idénticos. Es importante mencionar que la fase ϕ_n no depende de la forma en la que se parametriza $\mathbf{R}(t)$, para ver esto con mayor claridad, podemos eliminar la dependencia temporal de la ecuación (2.7) en favor de los parámetros \mathbf{R} , que sabemos que dependen del tiempo, aplicando un cambio de variable:

$$\begin{aligned} \phi_n &= i \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} \langle u_{\mathbf{R}(t')} | \frac{\partial}{\partial R_j} |u_{\mathbf{R}(t')} \rangle dR_j. \\ &= i \int_C \langle u_{\mathbf{R}} | \nabla_{\mathbf{R}} |u_{\mathbf{R}} \rangle \cdot d\mathbf{R}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Por otro lado, definiremos como potencial de Berry o **conexión de Berry** al siguiente factor:

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle u_{\mathbf{R}} | \nabla_{\mathbf{R}} | u_{\mathbf{R}} \rangle. \quad (2.9)$$

Cabe mencionar que esta conexión no es una cantidad físicamente medible ya que depende de la norma o *gauge* correspondiente al sistema. Si aplicamos una transformación de norma a los eigenestados del sistema éstos se transforman de acuerdo a:

$$|u_{\mathbf{R}}\rangle \rightarrow e^{i\xi(\mathbf{R})} |u_{\mathbf{R}}\rangle, \quad (2.10)$$

donde $\xi(\mathbf{R})$ es una función suave y univaluada. De esta forma, la conexión de Berry de la ecuación (2.19) se transforma como:

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_{\mathbf{R}}\xi(\mathbf{R}). \quad (2.11)$$

El término adicional de esta última ecuación hace que la fase de Berry tampoco sea univaluada, de hecho esta puede calcularse como:

$$\phi_n \rightarrow \phi_n - \int_C \nabla_{\mathbf{R}}\xi(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \phi_n - [\xi(\mathbf{R}(T)) - \xi(\mathbf{R}(0))], \quad (2.12)$$

donde T es el tiempo en el cual se completa la trayectoria C en el espacio de parámetros.

Esta situación cambia si consideramos la evolución adiabática para una trayectoria **cerrada** C en el espacio de parámetros, es decir que $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$ y, dado que hemos elegido los estados del sistema como univaluados entonces al completar el circuito se debe cumplir que $e^{i\xi(\mathbf{R}(0))} |u_{\mathbf{R}(0)}\rangle = e^{i\xi(\mathbf{R}(T))} |u_{\mathbf{R}(T)}\rangle = e^{i\xi(\mathbf{R}(T))} |u_{\mathbf{R}(0)}\rangle$. Por lo tanto:

$$\xi(\mathbf{R}(T)) - \xi(\mathbf{R}(0)) = 2\pi m, \quad (2.13)$$

donde m es un entero. En conclusión, el único cambio en la fase de Berry debido a una transformación de norma será por un múltiplo entero de 2π , y éste no puede ser removido. Por lo tanto, de este punto en adelante, consideraremos a ϕ_n una cantidad invariante de norma y nuestra definición de la fase de Berry va a considerar únicamente trayectorias cerradas, ya que son las que tendrán sentido físico. De esta forma la ecuación (2.8) finalmente se escribe como:

$$\phi_n = i \oint_C \langle u_{\mathbf{R}} | \nabla_{\mathbf{R}} | u_{\mathbf{R}} \rangle \cdot d\mathbf{R} \text{ mod } 2\pi. \quad (2.14)$$

Esta última ecuación nos permite concluir que la fase de Berry depende únicamente del aspecto geométrico de la trayectoria cerrada C y es independiente del modo en el cual $\mathbf{R}(t)$ varíe en el tiempo por lo que la dependencia temporal no es esencial para la descripción de la fase de

Berry.

Como se mencionó anteriormente, el espacio de parámetros puede ser el descrito por el espacio recíproco de una función de Bloch, es decir, \mathbf{k} puede describir una trayectoria cerrada C en el espacio recíproco. De acuerdo al teorema de Bloch, la función de onda electrónica puede escribirse como [6]:

$$\psi_{n\mathbf{k}} = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.15)$$

donde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es la parte periódica de la función de Bloch y n denota el índice de banda. Esta función periódica satisface la condición de frontera:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.16)$$

siendo \mathbf{a} un vector de traslación. Esta condición garantiza que todos los eigenestados del sistema viven en el mismo espacio de Hilbert. Por otro lado, sabemos que $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ satisface la ecuación de eigenvalores $\hat{H}_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, y si \mathbf{k} describe una trayectoria cerrada C en el espacio de momentos, entonces el estado de Bloch adquirirá una fase de Berry que puede escribirse conforme a la ecuación (2.14) como:

$$\phi_n = \oint_C \langle u_{n\mathbf{k}} | i\nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \cdot d\mathbf{k}. \quad (2.17)$$

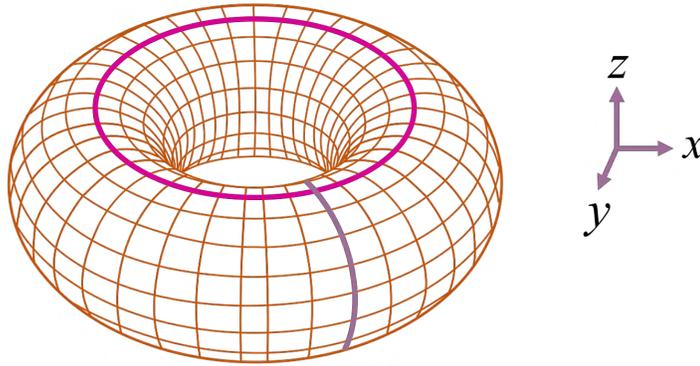


Fig. 2.3: Topología de la 1BZ. Forma de representar esquemáticamente a la primer zona de Brillouin de una red bidimensional cuya topología es la de un toro.

Dado que la primer zona de Brillouin para una red bidimensional (por ejemplo, una red cuadrada) debido a su carácter periódico, tiene la topología de un toro (véase Fig. 2.3) podemos elegir como trayectoria cerrada al camino que recorre \mathbf{k} en toda la primer zona de Brillouin asegurandonos de que la norma de las funciones $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ es periódica; en tal caso a la fase de Berry también se le denomina *fase de Zak* [22] y podemos reescribirla como:

$$\phi_n = \oint_{ZB} \langle u_{n\mathbf{k}} | i \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n\mathbf{k}} \rangle \cdot d\mathbf{k}. \quad (2.18)$$

y la conexión de Berry se expresa como:

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{k}) = i \langle u_{n\mathbf{k}} | \partial_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.19)$$

2.3. Formulación discreta de la fase de Berry

Para los propósitos de este trabajo utilizaremos la formulación discreta de la fase de Berry. Primero partiremos de la definición de la *fase relativa* $\gamma_{1,2}$ entre dos estados no ortogonales $|u_1\rangle$ y $|u_2\rangle$ dada como [6]:

$$\phi_{1,2} = -\arg \langle u_1 | u_2 \rangle, \quad (2.20)$$

donde $\arg(z)$ denota la fase de un número complejo z tal que $\arg(z) \in (-\pi, \pi)$. Por lo tanto, la fase relativa también puede escribirse como [6]:

$$e^{-i\phi_{1,2}} = \frac{\langle u_1 | u_2 \rangle}{|\langle u_1 | u_2 \rangle|}. \quad (2.21)$$

Ahora, consideremos un camino cerrado o *loop* a lo largo del cual podemos considerar $N > 2$ estados en el espacio de Hilbert y nos preguntamos por la fase relativa acumulada a lo largo de este camino, la respuesta es, como se ha resuelto anteriormente: la fase de Berry y la definiremos en su forma discreta como [6]:

$$\phi_L = -\arg e^{-i(\phi_{1,2} + \phi_{2,3} + \dots + \phi_{N-1,N} \phi_{N,1})} = -\arg \{ \langle u_1 | u_2 \rangle \langle u_2 | u_3 \rangle \dots \langle u_{N-1} | u_N \rangle \langle u_N | u_1 \rangle \}. \quad (2.22)$$

Como se dedujo anteriormente, la fase de Berry es una cantidad que es invariante de norma, esto es importante y ha sido la clave para comprender su estrecha relación con los materiales topológicos. A pesar de que la fase de Berry analíticamente no representa el valor esperado de un operador, por ser invariante de norma, tendrá asociado un significado físico, es decir, **la fase de Berry será una cantidad medible.**

Recordemos que para un número complejo escrito en la forma $z = |z| e^{-i\varphi}$, la expresión $-\text{Im} \ln z = \varphi$ nos proporcionará únicamente la fase compleja (o el argumento) de dicho número complejo. Tomando esto en cuenta podemos reescribir la fase de Berry como sigue:

$$\phi_L = -\text{Im} \ln \{ \langle u_1 | u_2 \rangle \langle u_2 | u_3 \rangle \dots \langle u_{N-1} | u_N \rangle \langle u_N | u_1 \rangle \}. \quad (2.23)$$

Esta última ecuación representa la formulación discreta de la fase de Berry y se encuentra en concordancia con su versión continua representada en la ecuación (2.17). En los cálculos computacionales realizados en este trabajo utilizaremos siempre la formulación discreta.

2.4. Funciones de Wannier

Las funciones de Bloch, por estar definidas como el producto de una onda plana y una función periódica en la red, son funciones deslocalizadas por todo el cristal. Ya que estas funciones solo dependen de \mathbf{k} , son adecuadas para trabajar en el espacio recíproco, sin embargo, no permiten tener una visión intuitiva de la localización de los electrones en un cristal.

Con el propósito de resolver esta problemática las funciones de Wannier fueron introducidas en 1937 por el físico Gregory Wannier [23] y constituyen un conjunto de funciones ortogonales localizadas que permiten describir el mismo espacio que las funciones de Bloch [24]. A continuación se presentan las propiedades más relevantes de éstas funciones que nos serán de utilidad para comprender los resultados de esta tesis.

Sea $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ una función de Bloch periódica asociada a una única banda n , su función de Wannier asociada $|w_{n\mathbf{R}}\rangle$ se definirá como la transformada de Fourier de la función de Bloch [24], es decir,

$$|w_{n\mathbf{R}}\rangle = \frac{V_{\text{celda}}}{(2\pi)^3} \int_{BZ} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\psi_{n\mathbf{k}}\rangle d^3k. \quad (2.24)$$

Al igual que las funciones de Bloch, las funciones de Wannier también forman una base ortogonal y abarcan el mismo subespacio de Hilbert. Sin embargo, mientras que la función $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es una función suave a lo largo de todo el camino en \mathbf{k} , la función de Wannier $w_{n\mathbf{R}}(\mathbf{r})$ decaerá rápidamente con $|\mathbf{R}|$ para una \mathbf{r} dada. En pocas palabras, la función de Wannier será una función localizada centrada cerca de \mathbf{R} (véase Fig. 2.4).

Para los intereses de este trabajo definiremos los elementos de matriz del operador de posición entre funciones de Wannier como [6]:

$$\langle w_{n\mathbf{0}} | \mathbf{r} | w_{n\mathbf{R}} \rangle = \mathbf{A}_{n\mathbf{R}}. \quad (2.25)$$

Los coeficientes $\mathbf{A}_{n\mathbf{R}}$ corresponden a la transformada de Fourier de la conexión de Berry $\mathbf{A}_n(\mathbf{k})$ descrita en la ecuación (2.19) de la sección 2.2. Este resultado nos da un indicio de la relación entre el operador de posición, las funciones de Wannier y la fase de Berry. Si nos fijamos en el caso particular $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ obtenemos lo que se conoce como **Centro de Wannier**:

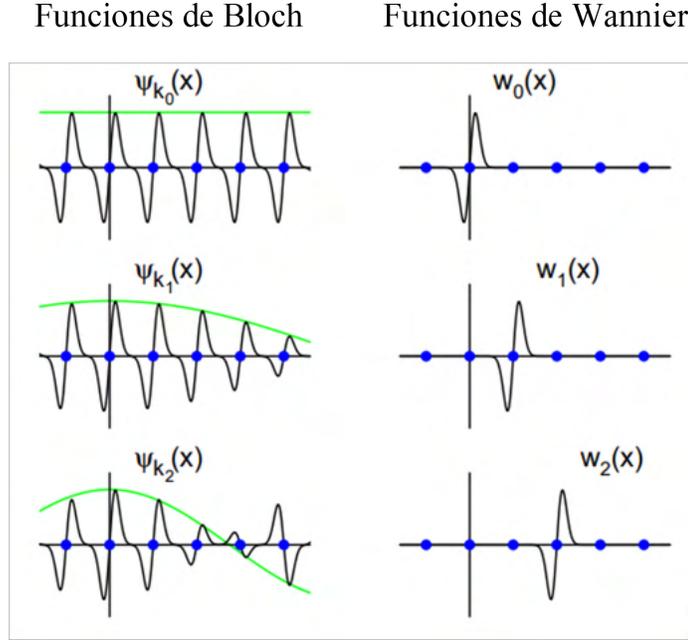


Fig. 2.4: Gráfico de las funciones de Wannier. Izquierda: Funciones de Bloch asociadas a una sola banda unidimensional para tres valores distintos de \mathbf{k} . Derecha: funciones de Wannier (abreviadas como FW's) correspondientes a la misma banda. Los puntos azules representan átomos y las líneas verdes esquematizan las envolventes e^{ikx} . Imagen recuperada de [24].

$$\bar{\mathbf{r}}_n = \langle w_{n\mathbf{0}} | \mathbf{r} | w_{n\mathbf{0}} \rangle. \quad (2.26)$$

En términos de la transformada de Fourier de la conexión de Berry, el centro de Wannier puede expresarse como:

$$\bar{\mathbf{r}}_n = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \mathbf{A}_n(\mathbf{k}) d^3k. \quad (2.27)$$

En esta última ecuación se utilizó la propiedad de ortogonalidad de las funciones de Wannier. Finalmente, podemos expresar la ecuación (2.27) sustituyendo la expresión dada para la conexión de Berry obtenida en la ecuación (2.19), es decir,

$$\bar{\mathbf{r}}_n = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} \langle u_{n\mathbf{k}} | i\nabla_{\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} \rangle d^3k. \quad (2.28)$$

Este último resultado muestra la relación entre el centro de Wannier, el cual nos proporciona el promedio de la posición de los electrones y la fase de Berry, que es una cantidad invariante de norma y medible que además está relacionada con el cálculo de los invariantes que se asociarán a los materiales topológicos. Por ejemplo, en el caso unidimensional el factor de proporcionalidad entre ambas cantidades será igual a $\frac{a}{2\pi}$, donde a es la constante de red. Esto quiere decir que

una evolución de la fase de Berry de 0 a 2π corresponderá a una evolución del centro de Wannier desde $x = 0$ hasta $x = a$. Esta conexión entre centros de Wannier y fase de Berry son de vital importancia para comprender la *teoría moderna de la polarización* [25].

2.5. Formulación multibanda de la fase de Berry (Wilson Loop)

En las secciones anteriores se hizo la suposición de que las funciones de Wannier (y sus respectivas funciones de Bloch) estaban asociadas a una única banda, la cual se consideró como una función suave en todo el espacio \mathbf{k} , sin embargo, en muchos casos no puede hacerse esta suposición tan fácilmente. En una inmensa cantidad de materiales (como en los metales o semimetales) la estructura de bandas posee puntos en el espacio \mathbf{k} en los cuales las bandas se encuentran degeneradas, en otras palabras, las bandas se tocan y comparten el mismo valor en energía. Si intentáramos calcular las funciones de Wannier asociadas a una banda que posee un punto de degeneración con alguna otra de sus bandas consecutivas utilizando simplemente la ecuación (2.24) nos encontraríamos en un serio problema ya que la función de Bloch $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ tendría una singularidad en \mathbf{k} para el punto en el cual las bandas se tocan [26].

Para poder resolver este problema y calcular las funciones de Wannier asociadas al caso multibanda la clave será la siguiente: vamos a abandonar la idea de que una función de Wannier esta asociada unicamente a una banda y en su lugar, vamos a asociar una función de Wannier a un conjunto de bandas $n = 1, 2, \dots, J$, siendo J el número de bandas que se encuentran degeneradas. Es decir, vamos a construir las funciones de Wannier de la forma [26]:

$$|w_{n\mathbf{R}}\rangle = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}\rangle d^3k, \quad (2.29)$$

donde el conjunto de funciones $|\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}\rangle$ estan relacionadas a las funciones de Bloch originales $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ a través de una *transformación unitaria* de la forma:

$$|\tilde{\psi}_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{m=1}^J U_{mn}(\mathbf{k}) |\psi_{m\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.30)$$

De forma análoga las funciones periódicas $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ asociadas a las funciones de Bloch $|\psi_{n\mathbf{k}}\rangle$ se transformarán como:

$$|\tilde{u}_{n\mathbf{k}}\rangle = \sum_{m=1}^J U_{mn}(\mathbf{k}) |u_{m\mathbf{k}}\rangle. \quad (2.31)$$

Tanto en las ecuaciones (2.30) como en (2.31) $U_{mn}(\mathbf{k})$ denota un conjunto de matrices de rotación unitarias de tamaño $J \times J$. Las ecuaciones (2.30) y (2.31) se conocen como transformaciones de norma *no-abelianas* o multibanda por su conexión con las teorías de norma no abelianas [26].

Finalmente, para resolver el problema de las degeneraciones bastará con definir un conjunto de J bandas consecutivas las cuales no tengan degeneración con ninguna banda arriba o abajo de este conjunto en la primer zona de Brillouin y calcular de una forma *apropiada* la matriz $U_{mn}(\mathbf{k})$ para hacer la transformación de las funciones de Bloch (y por lo tanto de las funciones de Wannier) o de las funciones periódicas $|u_{m\mathbf{k}}\rangle$. La clave entonces es definir de forma correcta la matriz unitaria $U_{mn}(\mathbf{k})$ tal que permita *cancelar* los comportamientos no analíticos de las funciones que presentan la degeneración.

Tomando en cuenta estas ideas, es posible hacer una generalización del cálculo de la fase de Berry para el caso multibanda. Esta generalización es lo que se denomina **Wilson Loop** [6]. A continuación se presenta la forma de calcularlo.

Partamos del mismo razonamiento que se hizo para calcular la fase de Berry discreta en la sección 2.3 y consideremos un camino o *loop* cerrado a lo largo del cual evolucionarán un conjunto de $J \in \mathbb{N}$ estados ortonormales tales que $\{|u_n(k)\rangle | n = 1, 2, \dots, J\}$ con $k = 1, 2, \dots, N$. Y ya que nos interesa obtener una expresión análoga a la ecuación (2.22) para la fase de Berry, en este caso los brackets entre las funciones periódicas conformarán una matriz, la cual denominamos matriz de traslape o matriz *overlap* entre el conjunto k y el conjunto l de funciones periódicas y se denota como:

$$\mathbf{M}_{nm}^{(k,l)} = \langle u_n(k) | u_m(l) \rangle. \quad (2.32)$$

La matriz $\mathbf{M}^{(k,l)}$ será de tamaño $J \times J$, siendo J el número de bandas que se encuentran degeneradas. Siguiendo el procedimiento descrito anteriormente y con el fin de eliminar los puntos de singularidad, el siguiente paso es someter a la matriz $\mathbf{M}^{(k,l)}$ a una descomposición de la forma $\mathbf{M}^{(kl)} = V\Sigma W^\dagger$, donde V y W son matrices unitarias de tamaño $J \times J$ y $\Sigma_{mn} = s_n \delta_{mn}$ es una matriz diagonal cuyos elementos s_n son reales y positivos [26]. De esta forma obtendremos la matriz unitaria $\mathcal{M}^{k,l} = VW^\dagger$, y representa la forma más adecuada de una transformación unitaria que rotará los estados para cancelar las degeneraciones y los problemas analíticos subyacentes en ellas [26]. Por lo tanto, definimos el operador Wilson Loop a lo largo de todo el camino como el producto de las matrices overlap [6],

$$\mathbf{W} = \mathcal{M}^{(1,2)}\mathcal{M}^{(2,3)}\mathcal{M}^{(3,4)} \dots \mathcal{M}^{(N-1,N)}\mathcal{M}^{(N,1)}. \quad (2.33)$$

Finalmente, la fase de Berry total para el caso multibanda en términos del operador Wilson Loop \mathbf{W} cuya representación conforma una matriz unitaria y por lo tanto sus eigenvalores λ_m serán unimodulares de la forma $\lambda_m = e^{-i\phi_m}$ con ϕ_m real, se definirá como:

$$\phi_{tot} = -\text{Im} \ln \prod_{m=1}^J \lambda_m = -\sum_{m=1}^J \text{Im} \ln \lambda_m = \sum_{m=1}^J \phi_m. \quad (2.34)$$

Las fases individuales ϕ_m son los *eigenvalores* del operador Wilson Loop [26], de forma que podemos reescribir la ecuación anterior como:

Fase de Berry multibanda

$$\phi_{tot} = -\text{Im} \ln \det \left(\mathcal{M}^{(1,2)} \mathcal{M}^{(2,3)}, \dots, \mathcal{M}^{(N-1,N)} \mathcal{M}^{(N,1)} \right). \quad (2.35)$$

Esta última ecuación representa la forma discreta de la fase de Berry para el caso multibanda. En la práctica y para los fines de esta tesis vamos a usar la aproximación $\mathbf{M}^{(kl)} \approx \mathcal{M}^{(kl)}$ ya que la ecuación (2.35) nos proporcionará el mismo resultado en el límite en el cual aumentamos el número de puntos \mathbf{k} a lo largo del loop y su cálculo será mucho más práctico.

2.6. Polarización eléctrica

La polarización para una molécula en su forma más convencional se calcula sencillamente a partir de la diferencia en distancia entre sus cargas positivas y negativas. Sin embargo, cuando se intenta aplicar este mismo razonamiento para calcular la polarización de una red periódica surgen diferentes complicaciones. En primer lugar se puede demostrar que el valor de la polarización de una red puede variar dependiendo de como se defina la celda unitaria [6]. Dicho problema fue resuelto hace 30 años con la introducción de la *Teoría moderna de la polarización* [25]. A continuación se presenta una breve introducción a los conceptos básicos que engloban esta teoría, particularmente con el propósito de entender la forma de calcular la polarización para redes cristalinas y su conexión con la fase de Berry y los centros de Wannier previamente descritos.

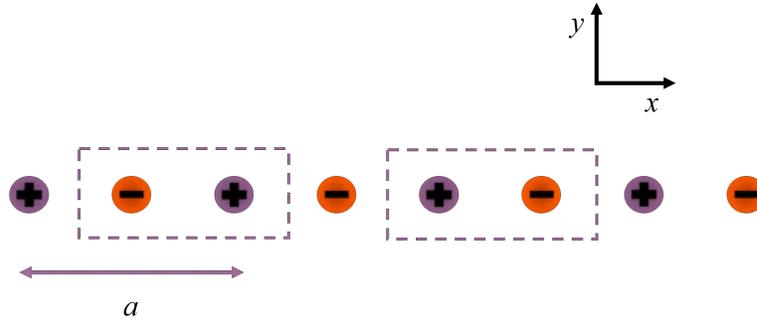


Fig. 2.5: Cadena unidimensional compuesta por aniones y cationes alternados. Los sitios se encuentran separados por una distancia $a/2$, siendo a la constante de la red. Las líneas punteadas ejemplifican dos formas distintas de definir la celda unitaria.

Supongamos una cadena unidimensional (ver Fig. 2.5) la cual está compuesta por cationes y aniones alternados con sus respectivas cargas. La definición convencional para el cálculo de la polarización es *momento dipolar por unidad de volumen* [20] (o en este caso, por unidad de longitud). Para obtener la polarización de todo el cristal, primero definamos como celda unitaria la celda esquematizada del lado izquierdo de la figura 2.5, donde la carga negativa se encuentra a la izquierda de la celda. Por lo tanto, la polarización utilizando la definición convencional para esta celda está dada como:

$$P = \frac{1}{a} \sum_i q_i x_i = \frac{1}{a} \left(-1 \left(\frac{a}{4} \right) + 1 \left(\frac{3a}{4} \right) \right) = \frac{1}{2}, \quad (2.36)$$

en unidades de $|e|$. Por otro lado, supongamos que la celda unitaria la definimos como la que se encuentra esquematizada a la derecha de la figura 2.5, en la cual la carga positiva se encuentra a la izquierda de la celda. Para este caso, la polarización es:

$$P = \frac{1}{a} \left(+1 \left(\frac{a}{4} \right) - 1 \left(\frac{3a}{4} \right) \right) = -\frac{1}{2}. \quad (2.37)$$

De esta forma mostramos que para dos celdas unitarias completamente válidas obtenemos dos valores diferentes para la polarización. Sin embargo, se puede demostrar que estos diferentes valores de polarización (y cualquier otro valor que pueda obtenerse de la definición de otra celda unitaria) difieren entre ellos por lo que se define como *cuanto de polarización* [27]. En general, para el caso unidimensional tendremos que $P = \frac{qd}{a} + nq = P_0 + nq$ con nq el cuanto de polarización, donde q denota el valor de la carga y d la distancia entre las mismas. En el caso caso tridimensional se tendrá que:

$$P = P_0 + \frac{ne\mathbf{R}}{V}. \quad (2.38)$$

siendo \mathbf{R} el vector de red y a la cantidad $\frac{ne\mathbf{R}}{V}$ el cuanto de polarización.

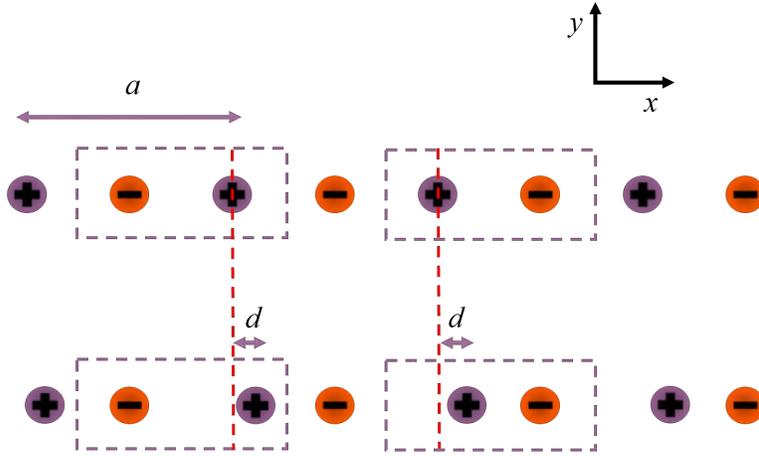


Fig. 2.6: Cadena unidimensional compuesta por aniones y cationes alternados separados por una distancia $a/2$, siendo a la constante de la red. La segunda cadena representa el caso en el cual las cargas positivas se han movido una distancia d

Ahora supongamos que para esta misma cadena unidimensional nos interesa calcular el *cambio de la polarización* (de hecho, experimentalmente, ésto es lo que se mide) [27]. Basándonos en la figura 2.6, moveremos las cargas positivas a la derecha una distancia d y calcularemos la diferencia entre la polarización para ambos casos. Para las dos celdas de la izquierda se tiene que :

$$\Delta P = \left(\frac{1}{2} + \frac{d}{a} \right) - \frac{1}{2} = \frac{d}{a}. \quad (2.39)$$

En las dos celdas de la derecha se tiene:

$$\Delta P = - \left(-\frac{1}{2} + \frac{d}{a} \right) - \left(-\frac{1}{2} \right) = \frac{d}{a}. \quad (2.40)$$

En ambos casos, el cambio de la polarización es el mismo, independientemente de la forma en la que se haya elegido la celda unitaria. Por lo tanto, aunque la polarización para un sistema periódico es multivaluada, puede demostrarse que el cambio de la polarización tiene un valor único y bien definido [27].

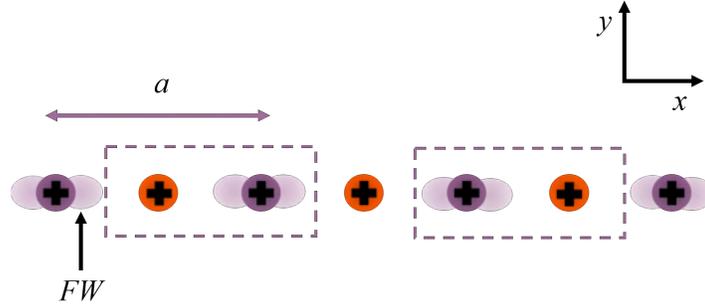


Fig. 2.7: Esquematación de la cadena unidimensional considerando que la posición de las cargas positivas esta representada a través de los centros de Wannier (FW)

En el caso de una cadena unidimensional real, los sitios con carga positiva pueden seguir tratándose como partículas puntuales, sin embargo, este no es el caso para los electrones con carga negativa, ya que el promedio de sus posiciones dadas por el valor esperado de la posición entre funciones de Bloch (ver Fig. 2.7), no están completamente localizadas en el espacio real. Sin embargo, como se vio en la sección 2.4 una estrategia para poder tratar las posiciones de los electrones y que éstas representen posiciones localizadas, es a través del cálculo de los centros de Wannier utilizando la ecuación (2.26). Tomando esto en cuenta, la expresión para la polarización que usamos previamente para la cadena unidimensional se extiende como la suma sobre la contribución de los iones de carga puntual más una suma sobre las cargas electrónicas centradas en el centro de Wannier de cada banda ocupada, esto es:

$$P = \frac{1}{a} \left(\sum_i (q_i x_i)^{\text{iones}} + \sum_n (q_n \bar{r}_n)^{\text{FW's}} \right) \quad (2.41)$$

Finalmente, para el cálculo de la polarización de un sistema periódico todo lo que se requerirá son las posiciones de los iones (los sitios) y las posiciones de los centros de Wannier, los cuales pueden obtenerse a través del cálculo de la fase de Berry, tal y como se describió en la ecuación (2.28). Por lo tanto, para calcular la polarización eléctrica, es decir, la contribución de las cargas negativas (electrones) a la polarización, se usará la ecuación [26]:

Polarización eléctrica

$$P_{el} = \sum_n (q_n \bar{r}_n)^{\text{FW's}} = -\frac{e}{2\pi} \sum_n \phi_n. \quad (2.42)$$

siendo ϕ_n la fase de Berry para la banda n . Para el caso bidimensional, la polarización tendrá dos contribuciones, que dependerán del cálculo de la fase de Berry en la dirección x y y respectivamente, es decir $\mathbf{P} = (p_x, p_y)$. Finalmente, es importante mencionar que, dado que la polarización puede expresarse a través del cálculo de la fase de Berry, y ésta representa una cantidad medible e invariante de norma, entonces la polarización también heredará estas mismas cualidades. De hecho, como se mencionó en la introducción, la polarización representará el invariante topológico asociado a los materiales topológicos de orden superior.

2.7. Formulación de Landauer para la conductancia

El transporte electrónico es uno de los más fundamentales e importantes conceptos en física de la materia condensada y ciencia de los materiales y sienta las bases para su aplicación en dispositivos. El descubrimiento de estados de borde topológicamente protegidos en aislantes (o semimetales) topológicos de orden superior abre una nueva vía hacia la exploración de nuevos fenómenos de transporte. Como parte de los objetivos de este trabajo, buscamos analizar el transporte electrónico en estos sistemas que más allá de sus características topológicas. Cuando se estudian este tipo de estructuras (consideradas nanoscópicas), la conductancia descrita por la ecuación $G = \frac{I}{V}$ deja de ser útil, y es necesario otro camino que nos permita entender el transporte cuántico en sistemas pequeños. Uno de éstos es el método de Landauer-Büttiker (LB) [28]. La formulación de transporte de Landauer nos permite interpretar la transmisión del sistema a través del cálculo de la conductancia, y la fórmula de Büttiker finalmente nos dice cómo deben ser tratadas las cantidades medibles como la corriente y los voltajes [29]. En esta sección mostraremos los aspectos generales de este formalismo.

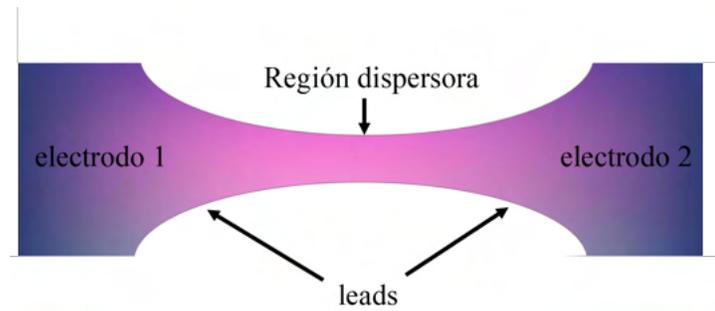


Fig. 2.8: Esquema de una nanoconexión. Estructura general de una nanoconexión con sus componentes: electrodos (izquierdo y derecho, *leads*) y región dispersora.

Las estructuras en las cuales vamos a analizar la conductancia esencialmente se componen por una región de dispersión, dos electrodos y dos *leads* (ver Fig. 2.8) [30]. La región de dispersión es aquella región de nuestro sistema en la cual se producen efectos de dispersión, debido a los defectos dentro de esta misma región, los cuales naturalmente derivan en una variación de la conductancia. Ésta región se caracteriza por ser finita y de dimensiones nanométricas por lo que puede modelarse a través de diferentes métodos, uno de ellos es a través del cálculo de la matriz de dispersión [30]. Actualmente existen paquetes computacionales que facilitan las implementaciones prácticas en el cálculo de la matriz de dispersión para nanosistemas, en este trabajo hicimos uso

de la paquetería de Python llamada *kwant* [31]. El uso de esta paquetería nos da la posibilidad para empezar rápidamente a centrarnos en el comportamiento de los nanosistemas que queremos estudiar, y una ventaja de este paquete es que es de uso gratuito y que puede ampliarse e implementarse fácilmente con códigos propios para mejorar el análisis.

Los saturadores corresponden a las estructuras que conectan la región de dispersión con los electrodos. Su principal objetivo es servir como guías de onda para los electrones [30] y presentaran una estructura periódica que permite definir funciones de onda entrantes o salientes de la región de dispersión evitando reflexiones. Los electrodos son regiones donde la función de onda no preserva su información de fase (son incoherentes) [32].

Ahora, supongamos una nanoconexión la cual posee todos los componentes anteriores. Todas las partículas que vamos a considerar llegarán desde el electrodo izquierdo cuyo potencial químico es μ_i y atravesarán la región de dispersión para llegar al electrodo derecho cuyo potencial químico es μ_d . Ya que unicamente estamos considerando las partículas que si logran atravesar la región dispersora, entonces la corriente que surge de este sistema va a depender de la velocidad de grupo de la partícula $v(n, m, E)$ y de su probabilidad de transmisión cuyo coeficiente denotaremos como $T(n, m, E)$. Ya que ambos electrodos poseen multiples canales de conducción, es conveniente definir la función de transmisión como [32]:

$$T(E) = \sum_{nm} T(n, m, E), \quad (2.43)$$

donde $T(n, m, E)$ denota la probabilidad de transmisión del m -ésimo canal del electrodo derecho para una partícula que incide por el n -ésimo canal del electrodo izquierdo. En el caso particular en el que las partículas que inciden en el sistema son electrones, estos van a distribuirse obedeciendo la función de distribución de Fermi-Dirac, dada por:

$$f(E, \mu, \Theta) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B\Theta}\right) + 1}, \quad (2.44)$$

donde μ y Θ denotan el potencial químico y la temperatura respectivamente. Por otro lado, podemos expresar a la velocidad de grupo como $v(n, E) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z}$ y tomando en cuenta lo anterior, la corriente generada de izquierda a derecha desde el electrodo izquierdo adquiere la forma [30]:

$$I_{i \rightarrow d} = \frac{2e}{h} \int_{E_{n1}}^{\infty} T_{i \rightarrow d}(n, E) f_i(E, \mu_i) dE, \quad (2.45)$$

Análogamente, la corriente generada de derecha a izquierda desde el electrodo derecho es:

$$I_{d \rightarrow i} = \frac{2e}{h} \int_{E_{n2}}^{\infty} T_{d \rightarrow i}(n, E) f_d(E, \mu_d) dE. \quad (2.46)$$

Tomando en cuenta la simetría de los coeficientes de transmisión ya que la transmitancia

debe ser equivalente si la partícula incide de derecha a izquierda, o si lo hace de izquierda a derecha, es decir, debe cumplirse que $T_{i \rightarrow d}(E) = T_{d \rightarrow i}(E) = T(E)$, entonces la corriente neta entre ambos electrodos estará dada por [33]:

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f_i(E, \mu_i, \Theta) - f_d(E, \mu_d, \Theta)] dE. \quad (2.47)$$

Finalmente, podemos discutir las posibilidades dentro de las expresiones para las funciones de distribución de Fermi-Dirac, ya que existen diferentes formas en las cuales se puede crear un estado de no equilibrio en la nanoconexión. Particularmente, en el equilibrio el potencial químico de ambos electrodos debe ser el mismo y depende de la diferencia de potencial V , de forma que $\tilde{\mu} = \mu + eV$ siendo μ el potencial químico interno que determina el llenado de las bandas de los electrones [30].

Las funciones de distribución en este caso, estarán dadas como:

$$f_i(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_i - eV}{k_B \Theta}\right) + 1}, \quad f_d(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - \mu_i - eV}{k_B \Theta}\right) + 1}, \quad (2.48)$$

Sustituyendo ambas expresiones en la ecuación (2.47) y considerando $\mu_i = \mu_d = \mu$, obtenemos:

$$I = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f_0(E - eV, \Theta) - f_0(E, \Theta)] dE, \quad (2.49)$$

con f_0 la función de distribución en $\mu_i = \mu_d = \mu$. A esta ecuación se le conoce como la *fórmula de Landauer a temperatura finita* [34].

Al considerar el caso a temperatura $\Theta \rightarrow 0$, la distribución de Fermi toma la forma de una función escalón [35] y el potencial químico será igual a la energía de Fermi E_F , por lo que la diferencia entre las funciones f_0 será nula fuera del intervalo entre las energías $E_F + eV$ y E_F . De forma que la ecuación (2.49) se reduce a:

$$I = \frac{e}{h} T(E_F) \int_{E_F}^{E_F + eV} dE = \frac{e^2}{h} T(E_F) V, \quad (2.50)$$

donde hemos considerado potenciales pequeños para V , por lo que la función de transmisión puede aproximarse como constante dentro del intervalo de integración, lo cual nos permite extraerlo de la integral. Finalmente, sustituyendo esta expresión en la fórmula para la conductancia tenemos:

$$G = \frac{I}{V} = \frac{1}{V} \left(\frac{e^2}{h} T(E_F) V \right) = \frac{e^2}{h} T(E_F). \quad (2.51)$$

Utilizando la ecuación (2.43), entonces la conductancia queda definida como:

Conductancia de Landauer

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{n,m} T(n, m, E_F) \quad (2.52)$$

la cual representa la conductancia de Landauer considerando temperatura cero y voltajes pequeños [30].

Capítulo 3

Resultados y discusión

En el capítulo anterior se desarrolló la teoría que engloba la comprensión del comportamiento y el surgimiento de los materiales (aislantes o semimetales) topológicos de orden superior. En la ecuación (2.35) se presentó una expresión general que permite el cálculo de la fase de Berry en su forma discreta para el caso multibanda mientras que en la ecuación (2.42) se presentó la expresión para el cálculo de la polarización eléctrica en términos de la fase de de Berry y en términos de los centros de Wannier. Como se señaló anteriormente, la polarización actuará como el invariante que caracterizará a los sistemas topológicos que se presentarán en esta tesis. En este capítulo se presenta el cálculo de la polarización para un sistema cristalino tridimensional construido a partir del apilamiento de capas bidimensionales cuya base es la red de Kagome con la finalidad de distinguir entre la fase trivial y la fase topológica del sistema periódico.

Los efectos de presentar una fase topológica en el sistema se ven reflejados al imponer condiciones de borde. En este capítulo se estudian dichos efectos a través del análisis de la dispersión electrónica para tres tipos de geometrías distintas en los bordes: triangular, hexagonal y paralelogramo. En todos los sistemas descritos se computó el hamiltoniano por medio de la aproximación de amarre fuerte. Finalmente, ya que el transporte es la firma del comportamiento electrónico de un nanodispositivo, en este capítulo se muestra el cálculo de la conductancia utilizando la ecuación (2.52) para todos los sistemas finitos descritos anteriormente .

3.1. Red de Kagome

Consideremos un arreglo cristalino conocido como *red de Kagome*, el cual debe su nombre a un patrón de bambú tejido japonés tradicional de esta región y se deriva de las palabras *kago* que significa canasta y *me* que significa ojos refiriéndose al patrón de agujeros en una canasta tejida. La red de Kagome fue utilizada por primera vez con fines teóricos y de investigación por el físico japonés Kodi Usimi y el término apareció por primera vez en un artículo de 1951 de su asistente Ichirō Shōji [36].

La celda unitaria de una red de Kagome en su versión tridimensional esta compuesta por tres sitios denotados por A, B y C (ver Fig. 3.1) que forman una estructura triangular en el plano

3.1 Red de Kagome

xy . Los sitios dentro de la celda unitaria estarán unidos por medio de los *hoppings* t_a y cada celda unitaria estará unida a sus celdas vecinas por medio de los *hoppings* t_b . A su vez, cada red bidimensional estará unida a sus análogas en el eje z por medio de los *hoppings* cruzados t_z los cuales van a dominar en la interacción entre capas apiladas [17].

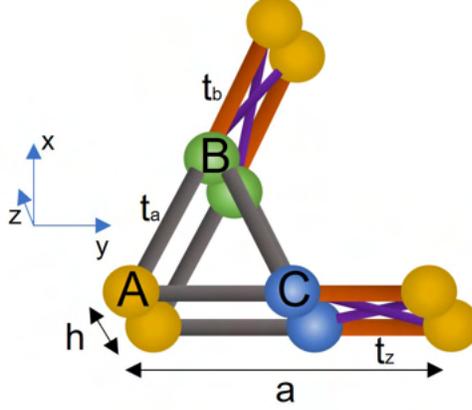


Fig. 3.1: Esquematación de la celda unitaria de la red de Kagome tridimensional. Los parámetros a y h corresponden a las constantes de red en el plano xy y en el eje z respectivamente.

Basándonos en la figura 3.1 los vectores que definen la estructura cristalina son:

$$\mathbf{a}_1 = a(1, 0, 0) \quad (3.1)$$

$$\mathbf{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right) \quad (3.2)$$

$$\mathbf{a}_3 = h(0, 0, 1) \quad (3.3)$$

Mientras que las posiciones de los sitios en la celda unitaria en términos de los vectores de red son:

$$\text{A: } 0\mathbf{a}_1 + 0\mathbf{a}_2 + 0\mathbf{a}_3 \quad (3.4)$$

$$\text{B: } 0\mathbf{a}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{a}_2 + 0\mathbf{a}_3 \quad (3.5)$$

$$\text{C: } \frac{1}{2}\mathbf{a}_1 + 0\mathbf{a}_2 + 0\mathbf{a}_3 \quad (3.6)$$

Los vectores de la red en el espacio recíproco son:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}, 0 \right) \quad (3.7)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}, 0 \right) \quad (3.8)$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{h} (0, 0, 1) \quad (3.9)$$

En la figura 3.2 se presenta la esquematización de la primer zona de Brillouin para esta red, en donde se muestran tres puntos de alta simetría que cobrarán mayor importancia posteriormente \mathbf{K} , \mathbf{K}' y Γ .

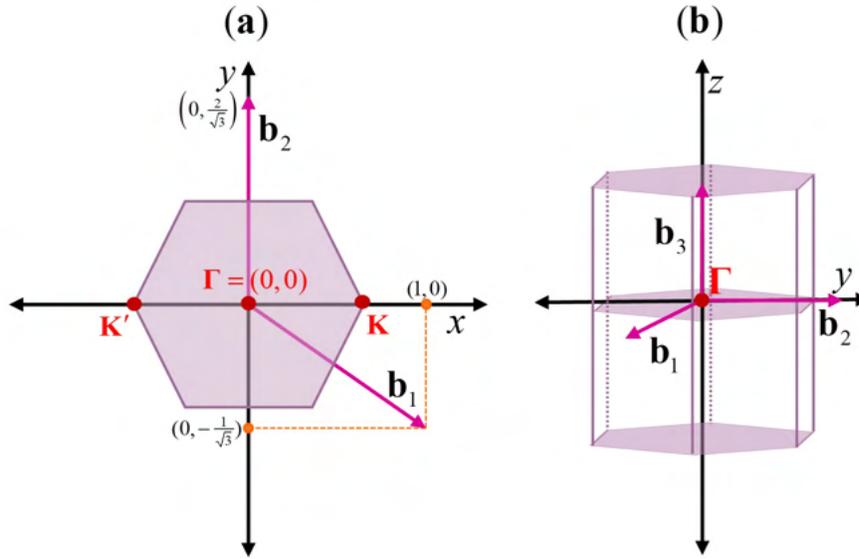


Fig. 3.2: 1BZ para la red de Kagome tridimensional. (a) Esquema de la primer zona de Brillouin asociada a los vectores de red \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 en el plano xy (b) Esquema de la 1BZ tridimensional.

3.2. Simetrías de la red y hamiltoniano del sistema

A continuación analizaremos las simetrías asociadas al sistema que es el objeto de nuestro estudio: la red de Kagome tridimensional. Esto puede realizarse a través de sus vectores de red y las posiciones de sus sitios. Las simetrías de la red se encontrarán implícitas en el hamiltoniano que describirá al sistema, por lo tanto van a repercutir en el surgimiento y la caracterización de las distintas fases topológicas que puedan presentarse.

Las principales simetrías que serán de nuestro interés se encuentran esquematizadas en la figura 3.3. La primera es la simetría C_6 y la segunda es la simetría C_3 . Debido a que la simetría $C_3 \in C_6$ entonces es posible romper la simetría C_6 conservando la simetría C_3 . Esto puede conseguirse en nuestro arreglo cristalino si se desaparecen los acoplamientos t_a en la red. Como se verá mas adelante, la ruptura de la simetría C_6 será la responsable del surgimiento de estados de

borde con dimensiones menores.

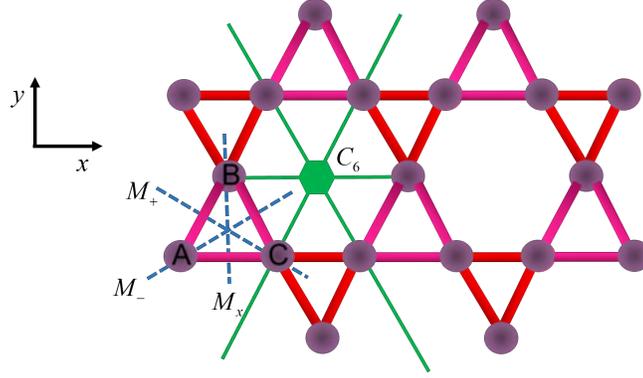


Fig. 3.3: Simetrías de la red de Kagome. Esquemización de las simetrías que posee la red de Kagome bidimensional: C_3 , C_6 , M_+ , M_- y M_x

Adicionalmente, existirán tres simetrías de espejo: M_x respecto al eje x y las simetrías (también de espejo) M_{\pm} respecto a los dos ejes que surgen de la rotación de $\pm \frac{2\pi}{3}$ del eje x .

Debido a las ecuaciones derivadas en la sección 2.6, para el caso con carga $q = 1$ la polarización adquiere exactamente el mismo valor que el centro de Wannier (que a su vez puede escribirse como una fase de Berry); y este valor estará sujeto a las simetrías del sistema. Cuando la simetría C_3 y las simetrías de espejo se mantienen intactas, será posible distinguir un valor cuantizado para la polarización (los centros de Wannier) que corresponderá a una fase topológica específica. Sin embargo, si adicionalmente a estas simetrías también se conserva la simetría C_6 entonces el valor de la polarización, como se verá más adelante, adquirirá un valor cuantizado diferente, lo que distinguirá una fase diferente. Concretamente se demostrará en los resultados posteriores que la polarización actúa como el *invariante topológico* asociado a nuestro sistema.

Todo lo anterior sugiere estudiar el efecto de la modulación de las amplitudes de los *hoppings* en la dispersión de las bandas electrónicas. Esta es la misma estrategia que se realiza, por ejemplo, cuando se estudia el modelo Su-Schrieffer-Heeger para una cadena unidimensional [6] (las características generales de este modelo se encuentran en el apéndice B). Para construir el hamiltoniano de este sistema periódico (que nombramos como el *bulto* del sistema) se hará uso de la aproximación de amarre fuerte, ya que ésta nos permitirá describir la interacción entre los átomos y tiene la ventaja de ser una aproximación semiempírica, por lo que los parámetros del hamiltoniano se podrán ajustar a experimentos o ser parámetros libres que permitirán explorar las transiciones de fase del sistema. El hamiltoniano correspondiente al bulto se expresa en la ecuación (3.10) y su derivación se encuentra en el apéndice A [17, 37].

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & t_a + t'_b e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)} & t_a + t'_b e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1)} \\ t_a + t'_b e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)} & 0 & t_a + t'_b e^{i(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1))} \\ t_a + t'_b e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1)} & t_a + t'_b e^{-i(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1))} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

donde $t'_b = t_b + t_z (e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3})$ con $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$.

Las diferentes fases que se podrán identificar a través de las bandas energéticas del bulto

3.2 Simetrías de la red y hamiltoniano del sistema

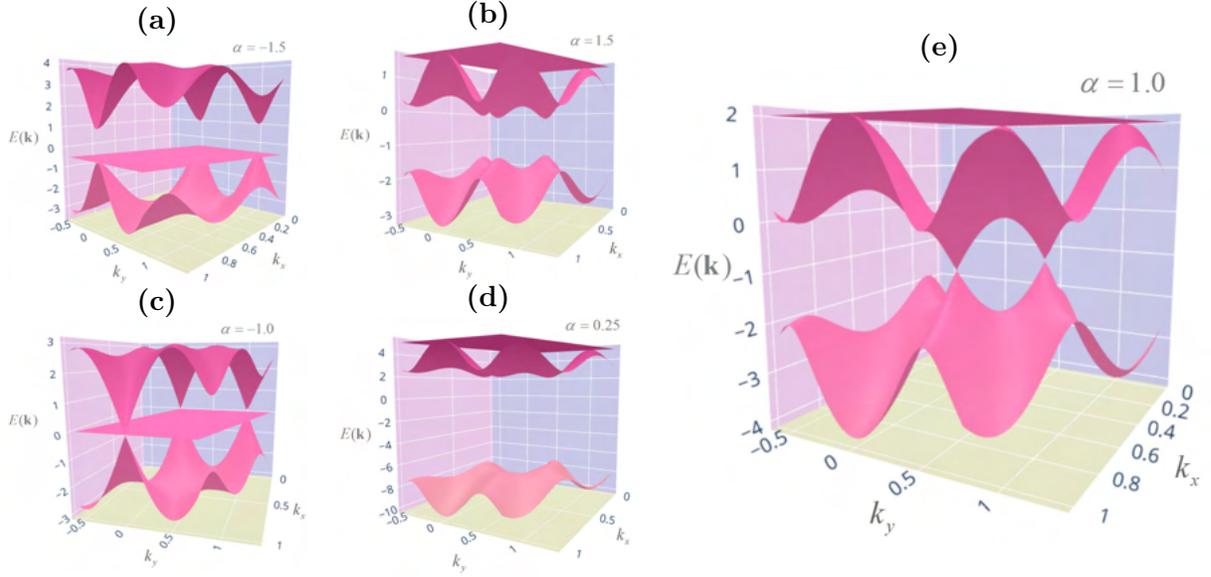


Fig. 3.4: Estructura de bandas del bulto para la red de Kagome $E(k_x, k_y)$: con $\alpha = \frac{t_a}{t'_b}$ para (a) $\alpha = -1.5$, (b) $\alpha = 1.5$, (c) $\alpha = -1.0$, (d) $\alpha = 0.25$ y (e) $\alpha = 1.0$. Los ejes horizontales representan k_x y k_y .

descrito en la ecuación (3.10) (es decir al graficar los eigenvalores de la matriz 3.10) dependerán de las amplitudes de los hoppings t_a , t_b y t_z . Como primer paso, para tener una intuición apropiada de la identificación de estas fases a continuación se presentan las eigenenergías resultantes de la diagonalización de $\hat{H}(\mathbf{k})$ [37]:

$$E_1 = -(t_a + t'_b) \quad (3.11)$$

$$E_2 = \frac{t_a + t'_b}{2} - \sqrt{9(t_a^2 + t'_b{}^2) - 6t_a t'_b + 8t_a t'_b P} \quad (3.12)$$

$$E_3 = \frac{t_a + t'_b}{2} + \sqrt{9(t_a^2 + t'_b{}^2) - 6t_a t'_b + 8t_a t'_b P} \quad (3.13)$$

con $P = \cos(k_x) + 2 \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right)$. Estas soluciones dependientes de k_x , k_y y k_z geométricamente representan hipersuperficies en un espacio 4-dimensional. Una estrategia para poder hacer un análisis del comportamiento de estas bandas consistirá en reducir estas eigenenergías a funciones que dependan únicamente de las variables k_x y k_y ; es decir, vamos a considerar a t'_b como una constante (sin olvidar que en realidad esta variable contendrá información del valor de k_z). De esta forma, las ecuaciones descritas en (3.11), (3.12) y (3.13) representarán superficies tridimensionales que podremos graficar como funciones de k_x y k_y imponiendo distintos casos para los valores de t_a y t'_b . Algunos casos se encuentran desglosados en la figura 3.4.

A través de los casos presentados en la figura 3.4 vemos que para $t_a = t'_b$ (es decir, $\alpha = 1.0$) la estructura de bandas se cierra. Los puntos de degeneración de estas bandas se pueden calcular mediante las intersecciones entre las superficies descritas por las ecuaciones (3.12) y (3.13) e imponiendo la condición $t_a = t'_b$. De esta forma se obtiene el punto de intersección de las bandas

3.3 Cálculo del Wilson Loop y Polarización eléctrica

en $(k_x, k_y) = (\pm \frac{4\pi}{3a}, 0)$ los cuales corresponden a los puntos de alta simetría de la primer zona de Brillouin \mathbf{K} y \mathbf{K}' (ver Fig.3.2). Para el caso $t_a = -t'_b$ la banda también se cierra en el punto $\Gamma = (0, 0)$. En ambos casos se concluye que el bulto tendrá un comportamiento semimetálico [37], sin embargo, en esta tesis nos centraremos en el caso $t_a = t'_b$.

Para recuperar los valores de los hoppings en el caso tridimensional t_b y t_z imponemos los valores determinados previamente para $(k_x, k_y) = (\pm \frac{4\pi}{3a}, 0)$. Los puntos de intersección en el eje z se determinarán con la ecuación $k_w = \arccos\left(\frac{t_a - t_b}{2t_z}\right)$. A continuación se presentan todos los puntos de degeneración del sistema tridimensional.

$$\mathbf{K}_{\pm} = \left(\frac{4\pi}{3a}, 0, \pm \frac{k_w}{h} \right), \quad (3.14)$$

$$\mathbf{K}'_{\pm} = \left(-\frac{4\pi}{3a}, 0, \pm \frac{k_w}{h} \right), \quad (3.15)$$

en donde \mathbf{K}'_{\pm} corresponden a las contrapartes de reversión temporal de \mathbf{K}_{\pm} respectivamente [17]. En la figura 3.5 se muestra el gráfico de bandas del bulto para un camino en la dirección de k_z con k_x y k_y fijos en donde quedan esquematizados los puntos de degeneración denotados por k_w .

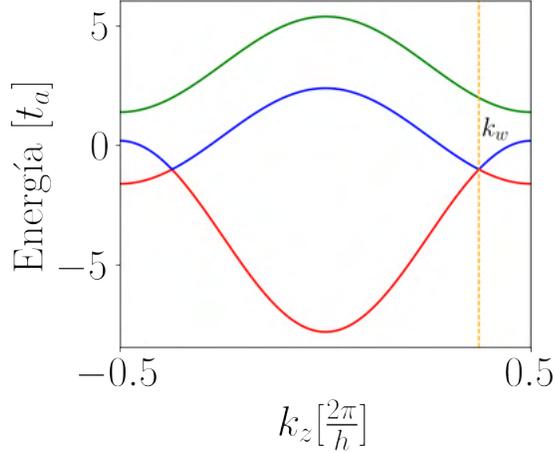


Fig. 3.5: Bandas energéticas del bulto como función de kz con $(k_x, k_y) = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$. El punto k_w representa el punto de degeneración en el eje z . Los parámetros de los hoppings fueron definidos como $t_a = -1.0$, $t_b = -2.4$ y $t_z = -1.0$ en unidades arbitrarias (u.a).

3.3. Cálculo del Wilson Loop y Polarización eléctrica

De los resultados obtenidos en la sección 3.2 nos enfocaremos en el caso semimetálico para el cual $t_a = t'_b$, en donde las dos bandas inferiores de la figura 3.5 exhiben degeneraciones en dos puntos. Para calcular el invariante topológico correspondiente a este sistema (es cual identificamos como la polarización) será necesario recurrir al cálculo de la fase de Berry para bandas degeneradas (consultar sección 2.5 y 2.6). Dicho valor se obtendrá a través del cálculo del operador Wilson

Loop [17].

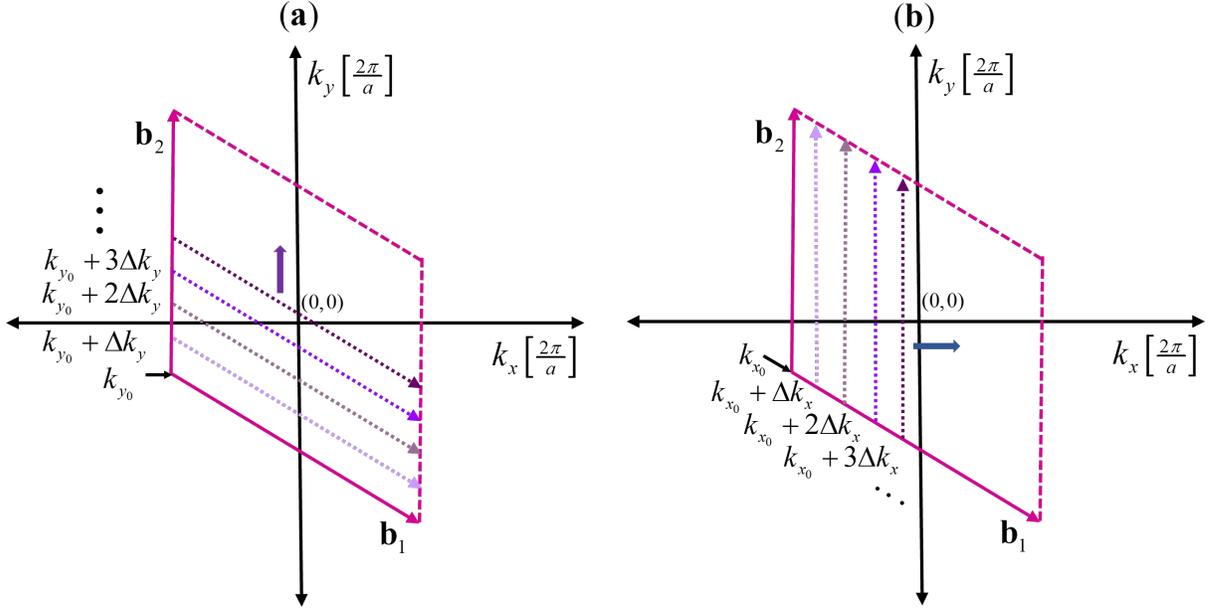


Fig. 3.6: Caminos a lo largo de k_x y k_y para el cálculo del operador Wilson Loop. Los vectores \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 denotan los vectores de red en el espacio recíproco trasladados de tal forma que la celda unitaria se encuentra centrada en el origen.

Para realizar el cálculo del Wilson Loop, de lo planteado en la sección 3.3 un primer paso es definir los caminos que se recorrerán en el espacio recíproco $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$. La estrategia planteada en este trabajo es la siguiente: primero fijamos un valor para $k_z = k_{z_0}$ y discretizamos la celda unitaria que forman los vectores de la red recíproca \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 centrada en el origen (ver Fig. 3.6). Esta celda unitaria tendrá la misma área que la primer zona de Brillouin. La discretización se realiza en 300×300 puntos en el espacio $k_x k_y$, de esta forma para una k_y dada k_x se dividirá en un arreglo de $k_{x0}, k_{x2}, \dots, k_{xN}$ con $N = 301$ y viceversa.

En el modelo de amarre fuerte, la parte periódica de la función de Bloch $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ es idéntica a la función de Bloch, por lo que, una vez extraídas las eigenfunciones $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ del sistema, el cálculo del Wilson Loop puede realizarse directamente utilizando la ecuación 2.33. Primero consideramos el operador Wilson Loop para caminos a lo largo de la dirección x paralelos a \mathbf{b}_1 para una k_y dada (véase Fig. 3.6). Utilizamos la ecuación (2.32) que nos permite computar las matrices overlap $[M]^{mn} = \langle u_{m,\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}+\Delta\mathbf{k}} \rangle$ con $m, n = 0, 1$ ya que éstos índices corresponden a las dos bandas inferiores degeneradas de la figura 3.5 y al realizar la multiplicación de las matrices overlap a lo largo de todo un camino utilizando la ecuación (2.33) obtenemos el operador Wilson Loop dependiente de k_y que denotamos como $W_x(k_y)$.

Al diagonalizar la matriz que representa el operador $W_{x,\mathbf{k}} |v_{x,\mathbf{k}}^j\rangle = e^{i2\pi v_x^j(k_y)} |v_{x,\mathbf{k}}^j\rangle$, donde $j = 0, 1$ denota el índice de banda y extraer la fase $v_x^j(k_y)$ de los eigenvalores obtenemos los centros de Wannier (las fases de Berry) de las dos bandas que están degeneradas utilizando la ecuación (2.35). De forma análoga obtenemos las fases de Berry para caminos a lo largo del eje y paralelos a \mathbf{b}_2 (ver Fig. 3.6) de donde extraemos $W_y(k_x)$ y las fases de sus eigenvalores $v_y^j(k_x)$. De la sección 2.6 sabemos que la fase de Berry y los centros de Wannier se encuentran relacionados a

la polarización por medio de la ecuación (2.42). De esta forma obtenemos $p_y^{v_x^j}(k_x)$ y $p_x^{v_y^j}(k_y)$ para una k_{z0} fija. Eventualmente se procede a realizar el mismo procedimiento para distintos valores de k_z .

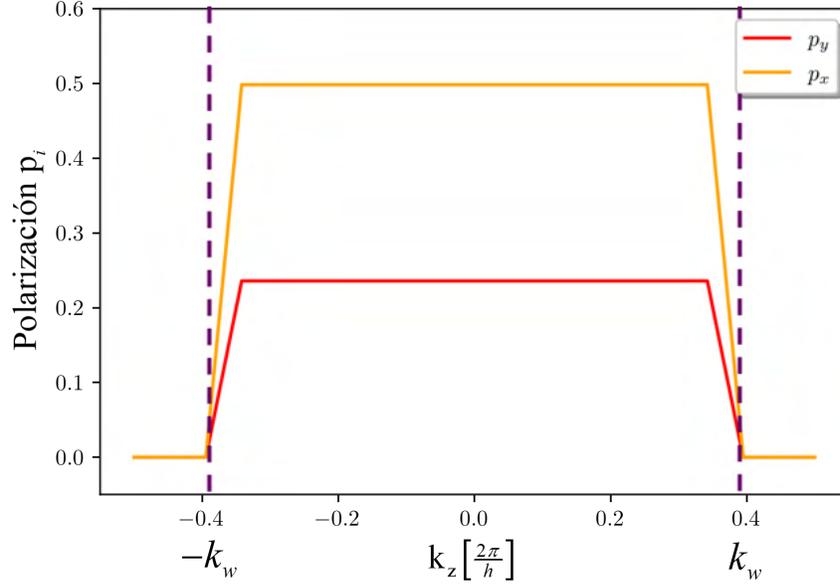


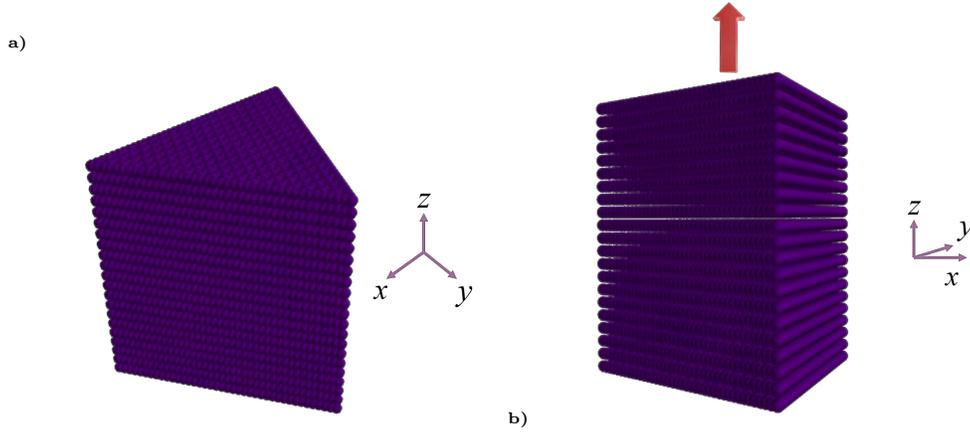
Fig. 3.7: Cálculo de la polarización del bulto. Valor de la polarización a lo largo de la dirección k_z

Al calcular la polarización para distintos valores de k_z se obtuvo la gráfica de la figura 3.7 de donde identificamos dos valores cuantizados de la polarización que están relacionados a dos fases distintas en el sistema. La primera que identificaremos como la *fase topológica* en el intervalo $-0.37\pi < k_z < 0.37\pi \approx k_w$ en el cual la polarización adquiere el valor de $\mathbf{P} = (p_x, p_y) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)$ y la que identificamos como la *fase trivial* que mantiene un valor para la polarización de $\mathbf{P} = (0, 0)$ fuera del intervalo $-0.37\pi < k_z < 0.37\pi$. Es importante identificar que estos valores de la polarización se encuentran protegidos por las simetrías del sistema y la transición de fase se llevará a cabo justo en los puntos degenerados k_w .

3.4. Sistema finito triangular

Con el fin de identificar los efectos de la existencia de fases topológicas en el sistema periódico será necesario imponer condiciones de borde. Esto se consigue modelando un arreglo que sea finito en alguna de las direcciones de nuestro sistema tridimensional. Análogo a los trabajos realizados previamente en [17] y [37] consideraremos un arreglo con bordes que continuará siendo periódico en el eje z y tendrá una sección transversal triangular en el plano xy , la esquematización gráfica de este sistema se exhibe en la figura 3.8. La estructura cristalina que conforma el arreglo serán capas bidimensionales construidas a partir de la red de Kagome apiladas a lo largo del eje z .

La correspondencia entre el arreglo con bordes y el bulto puede visualizarse a través del análisis de la dispersión de las bandas electrónicas del arreglo finito. Estas bandas se muestran en



la figura 3.9 en donde se consideró un camino a lo largo de k_z con $(k_x, k_y) = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$ considerando que la base del triángulo contiene 40 celdas unitarias. En el gráfico 3.9b) se observan 3 bandas degeneradas (en color rojo) que poseen un comportamiento plano en el valor de energía $E = 0$ dentro del intervalo $-0.37\pi < k_z < 0.37\pi \approx k_w$. Este intervalo corresponde al que identificamos en la sección 3.3 como aquel en el cual nos encontramos en una fase topológica del sistema periódico cuyo invariante (la polarización) tenía el valor cuantizado $\mathbf{P} = (p_x, p_y) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}})$. El surgimiento de estas tres bandas planas al imponer bordes en nuestro sistema puede interpretarse, en primer instancia, como el surgimiento de tres estados con un comportamiento conductor (ya que no existe un *gap* entre ellos). Por otro lado, las bandas planas también se interpretan como valores energéticos del sistema que no dependen del momento y en los cuales la velocidad de grupo de sus portadores de carga será nula [6].

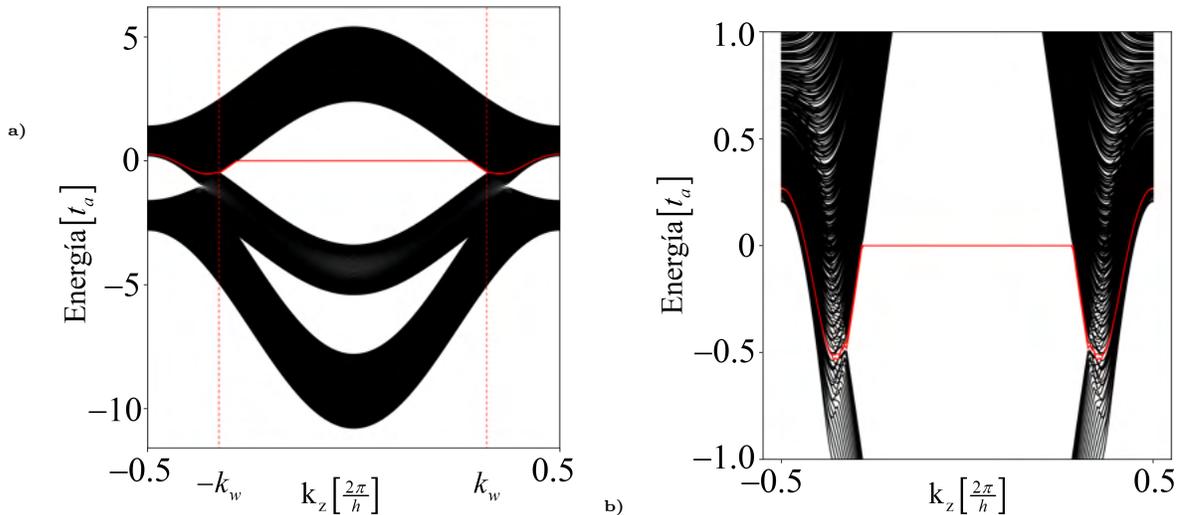


Fig. 3.9: Dispersión de las bandas energéticas para el arreglo finito triangular. El cálculo se realizó a lo largo de un camino en k_z . En (a) la banda roja exhibe estados conductores dentro del intervalo en el cual el sistema está en una fase topológica y en (b) se muestra que estos estados corresponden a tres bandas degeneradas cuyo valor en energía es cero. Los parámetros de los hoppings fueron definidos como $t_a = -1.0$, $t_b = -2.4$ y $t_z = -1.0$ en unidades arbitrarias (u.a).

Una vez que hemos identificado el surgimiento de estados conductores en el arreglo finito,

nos interesa visualizar de una forma intuitiva cuales serán los estados dentro de nuestra estructura de bandas que se encontrarán mayormente localizados. Es decir, cuantificar que estados tendrán una mayor probabilidad. Debido a esto en la figura 3.10a) se muestra la dispersión de las bandas electrónicas del arreglo finito dependiendo del valor del *índice de participación inversa* (o IPR, por sus siglas en inglés). En este gráfico es claro que los estados con mayor localización corresponden a las tres bandas planas. Esto quiere decir que los portadores de carga dentro de este arreglo tendrán una mayor probabilidad de encontrarse en estos estados respecto a todos los demás. Ya que también nos interesa saber a que zonas de nuestro arreglo finito corresponden estos estados, en la figura 3.10b) se exhibe el cálculo de la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ respecto a la posición de los sitios considerando una capa bidimensional del arreglo cristalino para el caso con energía $E = 0$ (ya que en este valor energético es en donde tenemos la mayor localización y la existencia de bandas planas). A través de este gráfico se concluye que estos estados corresponden a las tres esquinas de la base triangular del arreglo. En la figura 3.11 se realizó el mismo cálculo considerando la estructura tridimensional, en donde vemos que la mayor densidad de probabilidad se encuentra en las tres aristas del arreglo tridimensional.

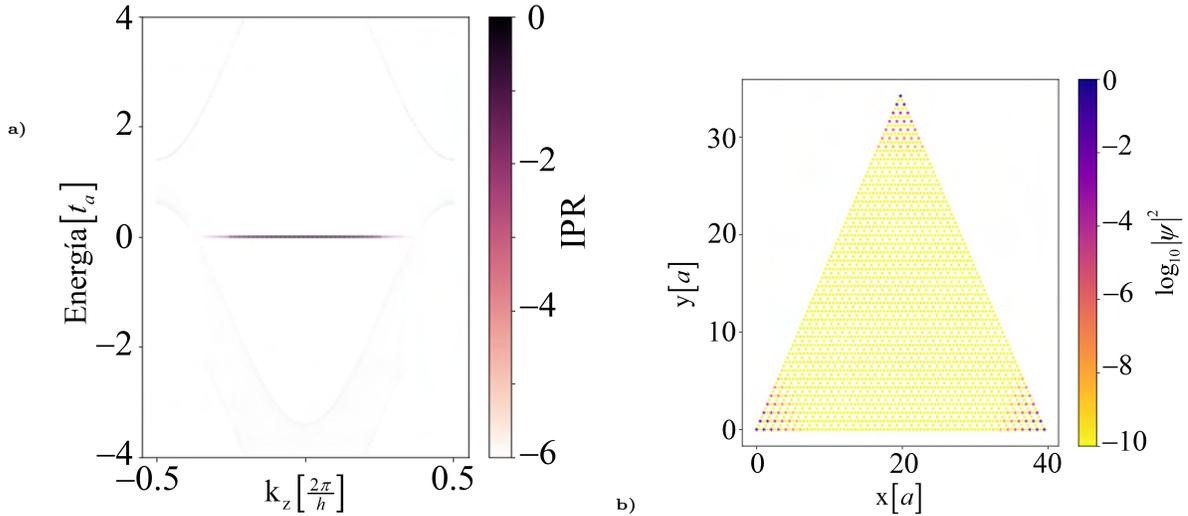


Fig. 3.10: IPR y densidad de probabilidad. En (a) se muestra la estructura de bandas para el arreglo finito triangular a lo largo de k_z dependiendo del valor del índice de participación inversa. En (b) se muestra la densidad de probabilidad como función de la posición de los sitios en el plano xy para la energía $E = 0$.

Del análisis de estos resultados se concluye que al imponer condiciones de borde a nuestro sistema periódico (el bulto) aparecerán estados conductores localizados en las aristas del arreglo finito, los cuales estarán protegidos por las simetrías subyacentes en el hamiltoniano del bulto. Estas aristas de forma independiente pueden ser tratadas como cadenas unidimensionales (a diferencia del sistema original que es tridimensional). De acuerdo con lo expuesto en la sección 2.1 este sistema corresponde a un *semimetal topológico tridimensional de segundo orden*.

Con el fin de complementar la correspondencia entre el bulto y los bordes se calculó la dispersión de las bandas energéticas del arreglo finito como función del radio entre los hoppings t_a y t_b (ver Fig. 3.12a)) en donde se observa que los estados con cero energía emergerán dentro del intervalo $-1 \leq \frac{t_a}{t_b} \leq \frac{1}{2}$. De acuerdo a los ejemplos expuestos en la figura 3.4 para las bandas energéticas del bulto, dentro de este intervalo se cumple la condición $t_a = t_b + 2t_z \cos(k_z h) = t'_b$

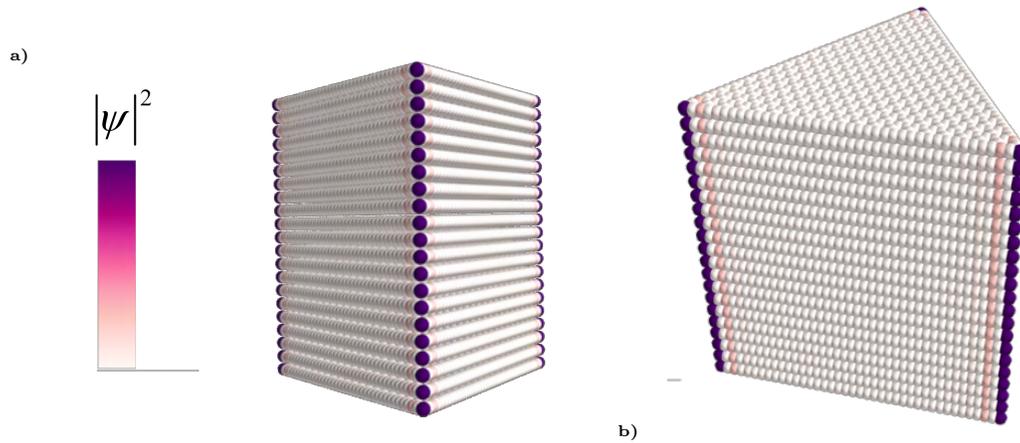


Fig. 3.11: Densidad de probabilidad tridimensional. Densidad de probabilidad dependiendo de la posición de los sitios para los estados con energía $E = 0$ para la estructura finita tridimensional. Se aprecia que la mayor densidad se encuentra localizada en las aristas del sistema.

con $t_z = -1.0$ para el cual el sistema periódico corresponde a un semimetal. De esta forma recuperamos la correspondencia de los estados del bulto con los estados de borde.

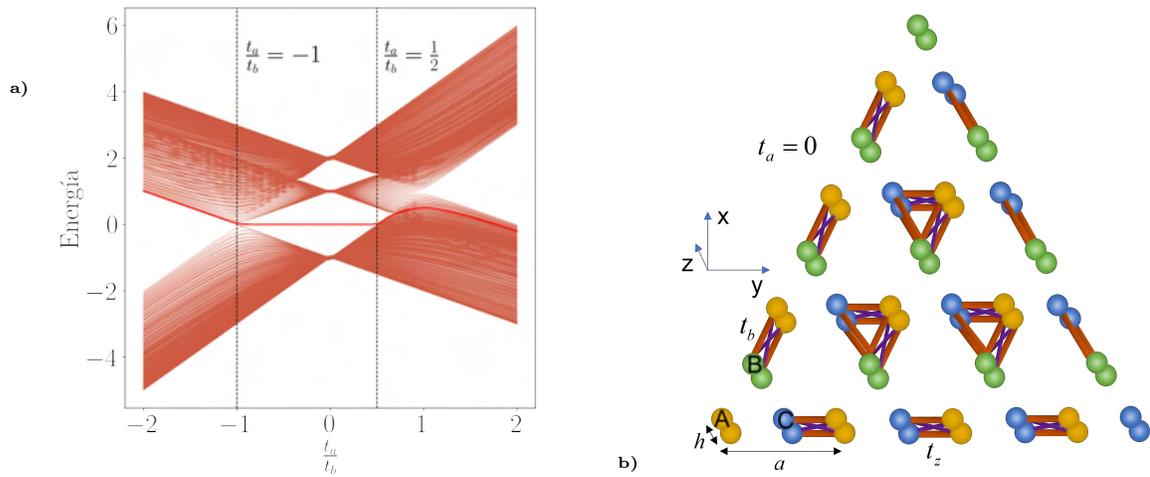


Fig. 3.12: Correspondencia del bulto con los estados de borde. En (a) se muestra el espectro de energía para el arreglo finito triangular dependiendo del valor de $\frac{t_a}{t_b}$ para un sistema en el cual se tienen 40 celdas unitarias en la base del triángulo. Las unidades de t_a y t_b serán unidades arbitrarias (u.a). (b) Esquemización de la base triangular del sistema finito para el caso en el cual $t_a = 0$.

Una pregunta que surge naturalmente es ¿Cuál es el origen de los estados topológicos en las aristas? Una vez que estamos seguros de que los estados con cero energía corresponden a estados topológicos del sistema como se mostró en las figuras 3.12a) y 3.9 y además que estos estados se encuentran localizados en las esquinas de la base triangular de cada capa del sistema como se mostró en la figura 3.11 entonces fijémonos en el caso particular representado en la figura 3.12b) en donde el hopping $t_a = 0$ (hay que notar que este caso se encuentra dentro del intervalo en el cual nos encontramos en una fase topológica del sistema de acuerdo a la figura 3.12a)). En este caso, se observa que los tres sitios localizados en las esquinas del arreglo triangular para una de las capas se encuentran completamente separados del bulto. Además, los tres bordes del

triángulo conforman cadenas dimerizadas unidimensionales. Estas cadenas dimerizadas pueden ser descritas a través del modelo Su-Schrieffer-Heeger (modelo SSH) [6] (consultar apéndice B) el cual exhibe transiciones de fase al imponer condiciones en el valor de sus hoppings, por lo que podemos concluir que los tres bordes de nuestro sistema finito para el caso $t_a = 0$ representan semimetales topológicos unidimensionales en donde los estados correspondientes a sus esquinas poseerán la mayor densidad de probabilidad. Dado que el espectro de energía en $t_a \neq 0$ esta conectado adiabáticamente con el caso $t_a = 0$, entonces concluimos que nuestros estados con cero energía también son topológicos para $t_a \neq 0$, particularmente para $t_a = 1$ (que es la amplitud del acoplamiento que impusimos en los gráficos expuestos en la figura 3.9). Finalmente recordemos que las esquinas en el arreglo bidimensional corresponden a las aristas en el arreglo tridimensional, y de esta forma se justifica el origen de estos estados topológicos.

Para poner a prueba la robustez de los estados topológicos con energía cero, se realizó el cálculo de la estructura de bandas para el arreglo finito imponiendo un desorden tipo Anderson. Este desorden consiste en imponer valores aleatorios a las energías de cada uno de los sitios del sistema dentro de un intervalo cuyo valor máximo denotamos como w . Este cálculo se muestra en la figura 3.13a) en donde se observa que los estados topológicos se conservan, sin embargo, el desorden rompe con la degeneración de las bandas. Esto significa que los estados correspondientes a las aristas continuarán siendo conductores, sin embargo, cada uno tendrá una energía diferente asociada. Es importante mencionar que a pesar del desorden una de las bandas permanecerá siendo plana con energía $E = 0$ que finalmente correspondería a una de las aristas del sistema. En la figura 3.13b) se muestra la dispersión de las bandas como función del índice de participación inversa en donde se observa que los estados conductores continuarán siendo los estados con mayor localización a pesar del desorden y esto se debe a la protección topológica de los estados la cual emana de las simetrías del hamiltoniano del bulto y no se ven afectadas por un cambio en las energías de sitio; en otras palabras, la aplicación del desorden no afectará en el valor cuantizado del invariante topológico en cual se definió como la polarización eléctrica.

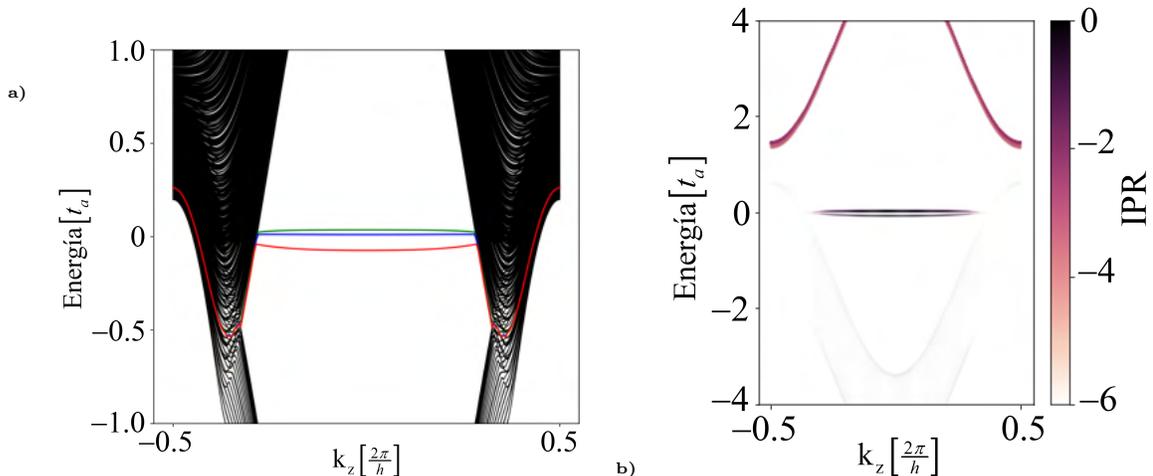


Fig. 3.13: Dispersión de las bandas energéticas con desorden. En (a) se muestra el espectro de energía para el arreglo finito triangular imponiendo un desorden tipo Anderson en las energías de los sitios en donde se observa el rompimiento de la degeneración de las bandas planas. Se ha considerado $w = 0.1$ u.a. como parámetro de desorden. En (b) se muestra el espectro de energía como función del IPR en donde se observa la conservación de la localización en las bandas correspondientes a las aristas. Los parámetros de los hoppings fueron definidos como $t_a = -1.0$, $t_b = -2.4$ y $t_z = -1.0$ en unidades arbitrarias (u.a).

3.5. Sistema finito hexagonal

Una vez que hemos caracterizado el comportamiento topológico del sistema finito triangular y hemos comprobado la obtención de estados conductores localizados en las aristas del sistema que han emergido gracias a la imposición de condiciones de borde protegidos por las simetrías del sistema, nos podemos preguntar en qué medida cambiará la localización y el surgimiento de estos estados debido a cambios en la geometría de los bordes mismos. Una estrategia para dar una respuesta a esta pregunta es modificar la geometría del arreglo finito. En esta sección estudiaremos el comportamiento de la dispersión de las bandas para un sistema periódico en el eje z (análogo a la sección anterior) pero considerando una geometría hexagonal sobre el plano xy . El esquema gráfico de este sistema se exhibe en la figura 3.14. Es importante mencionar que la construcción de este sistema continúa realizándose a partir del apilamiento de capas bidimensionales cuya base es la red de Kagome cuya celda unitaria se esquematizó en la figura 3.1.

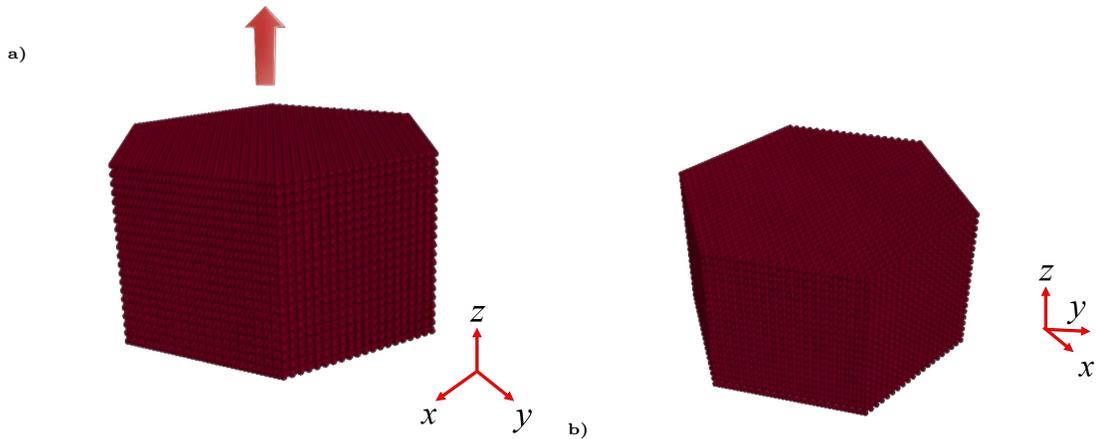


Fig. 3.14: Arreglo finito hexagonal. Esquemización del modelo tridimensional cuyo corte transversal en el plano xy tiene la geometría de un hexágono. La flecha indica periodicidad en el eje z .

Análogo a los cálculos realizados para el caso triangular, en la figura 3.15a) se muestra la dispersión de las bandas energéticas considerando una base hexagonal. Nuevamente se consideró un camino a lo largo de k_z con $(k_x, k_y) = (\frac{4\pi}{3a}, 0)$ considerando que cada uno de los lados que conforman el hexágono posee 30 celdas unitarias. El primer cambio notorio que se aprecia para esta nueva dispersión respecto a lo que se obtuvo para el caso triangular, es el aumento de los estados cerca de la energía cero lo que es contrastante con los tres estados que se observaron para el caso triangular en la figura 3.9. Sin embargo, la degeneración de los estados con energía igual a cero se conservó igual a 3 (ver Fig. 3.15b)), análogo al caso triangular. Para visualizar los estados con mayor localización se realizó el cálculo de la estructura de bandas como función del IPR, en donde se obtuvo que los tres estados con energía cero continúan poseyendo la mayor localización en el sistema (ver Fig.3.15c)), sin embargo, también se observa que para este caso comienzan a tomar relevancia otros estados con energía diferente de cero. En la figura 3.15d) se muestra el cálculo de la densidad de probabilidad para estados con energía $E = 0$ como función de las posiciones de los sitios en el plano xy de donde resultó que la mayor densidad se encuentra concentrada a lo largo de tres de los bordes que conforman la geometría hexagonal que define al sistema. Éste resultado difiere completamente del comportamiento obtenido para el caso triangular.

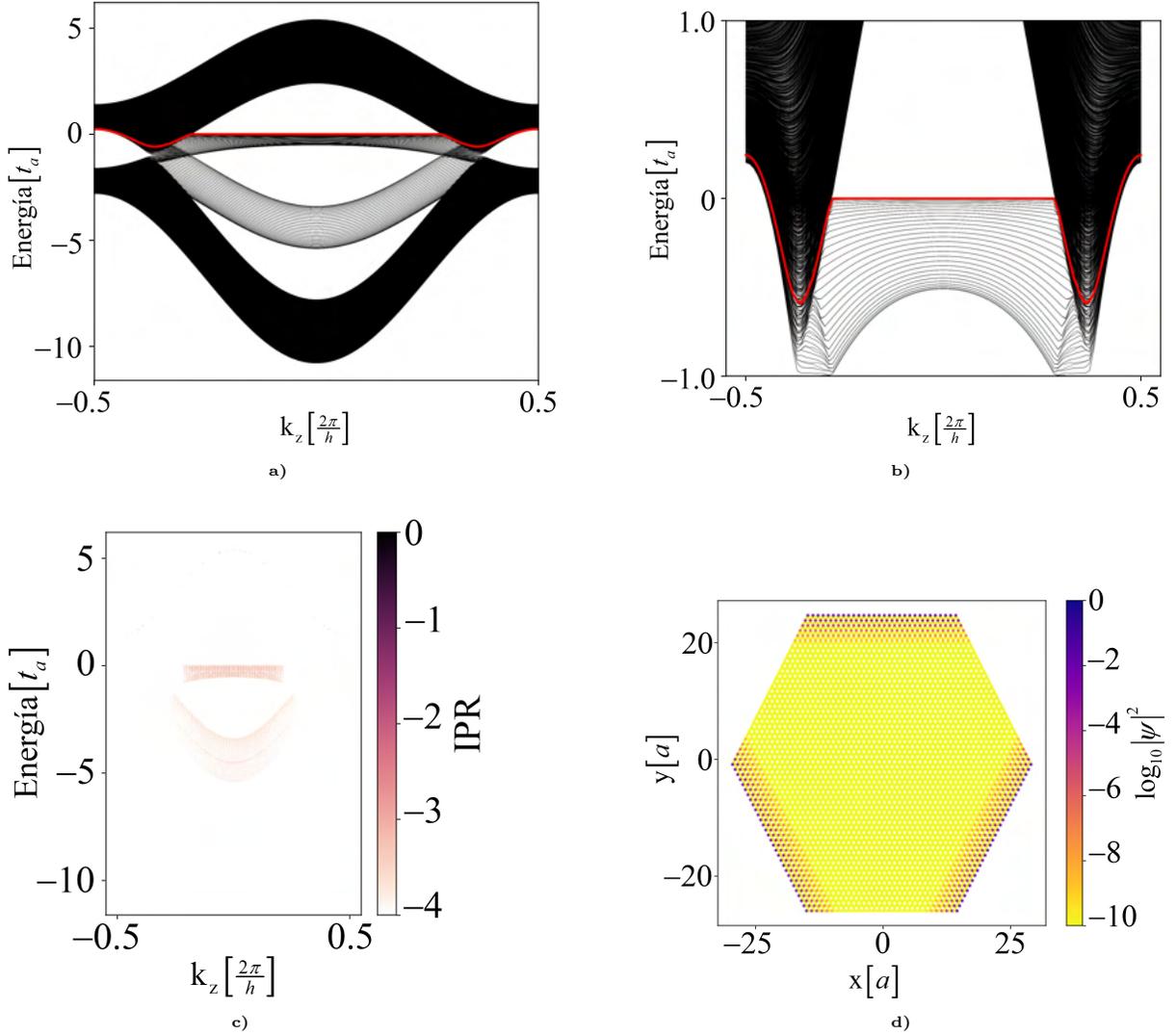


Fig. 3.15: Dispersión de las bandas energéticas para el arreglo finito hexagonal. El cálculo se realizó a lo largo de un camino en k_z . En (a) se muestra la dispersión de las bandas energéticas en donde se aprecia el aumento de los estados cerca de la energía cero, en (b) se observa la conservación de la degeneración de las bandas planas. En (c) se exhibe la estructura de las bandas como función del IPR en donde se aprecia la localización de los estados en $E = 0$. En (d) se muestra la densidad de probabilidad como función de las posiciones de los sitios. En este caso se observa que los estados correspondientes a las bandas planas se encuentran en tres de los seis bordes del arreglo finito bidimensional. Los parámetros de los hoppings fueron definidos como $t_a = -1.0$, $t_b = -2.4$ y $t_z = -1.0$ en unidades arbitrarias (u.a).

En la figura 3.16a) se muestra el cálculo de la densidad de probabilidad como función de las posiciones de los sitios en el sistema tridimensional con energía $E = 0$. En este gráfico comprobamos que la densidad $|\psi|^2$ ya no se encuentra mayormente localizada en las aristas del arreglo, si no que se extiende a lo largo de tres de las seis caras transversales que conforman el sistema. Para poder dar una explicación intuitiva de éstos nuevos resultados remontémoslos nuevamente a los argumentos utilizados para justificar el origen de los estados topológicos en las aristas en la sección 3.4 y fijémoslos en el sistema esquematizado en la figura 3.16b) en donde se muestra el arreglo hexagonal en el plano xy para el caso $t_a = 0$. En este caso se observa que no todos los bordes que conforman la geometría hexagonal pueden modelarse como cadenas unidimensionales dimerizadas. De hecho, solamente tres bordes pueden modelarse de esta forma

mientras que los tres bordes restantes corresponden a cadenas unidimensionales compuestas de sitios aislados. Las tres cadenas dimerizadas pueden modelarse utilizando el modelo SSH. De cada cadena resultarán dos estados topológicos conductores. Las tres cadenas conformadas por sitios aislados simplemente pueden tratarse como cadenas de sitios con energía igual a cero dado que no tienen integrales de salto asociadas y por lo tanto, también tendrán un comportamiento conductor. De esta forma se justifican los resultados expuestos en la figura 3.15 y además queda justificada la degeneración que a su vez se mantiene en concordancia con los resultados obtenidos para la geometría triangular. Es importante resaltar que en términos de las simetrías del sistema, el caso $t_a = 0$ rompe con la simetría C_6 conservando la simetría C_3 tanto para el caso triangular como para el caso hexagonal (consultar sección 3.2) ya que éstas simetrías provienen del bulto, recordando que $t_a \neq 0$ estará adiabáticamente conectado con el sistema con acomplamiento $t_a = 0$.

Finalmente, la modificación de la geometría en los estados de borde para este caso no tuvo ningún efecto que pudiera propiciar una transición de fase, ya que las bandas planas con cero energía continúan presentandose dentro del intervalo $-0.37\pi < k_z < 0.37\pi$ lo cual emana de la conservación de las simetrías en el arreglo periódico. Esto se debe a que las fases topológicas surgen debido a las propiedades que definen al bulto, y solamente muestran sus efectos al imponer condiciones de borde, pero mientras las propiedades que caracterizan el invariante topológico (las simetrías) se mantengan entonces no existirá un cambio de fase.

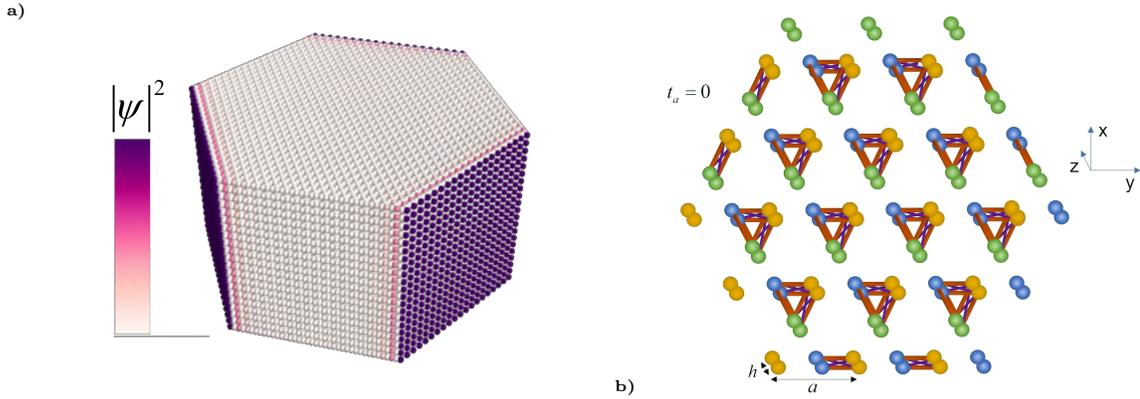


Fig. 3.16: Densidad de probabilidad tridimensional y arreglo finito hexagonal SSH. (a) Densidad de probabilidad para $E = 0$ dependiendo de la posición de los sitios en el caso tridimensional para una geometría hexagonal. (b) Esquemización del arreglo finito en el plano xy para el caso $t_a = 0$.

Con la intención de analizar la robuztez de los estados topológicos nuevamente se realizó el cálculo de la dispersión de las bandas energéticas imponiendo un desorden tipo Anderson en las energías de sitio asociadas al sistema. En la figura 3.17 se observa nuevamente el rompimiento de la degeneración, lo que continúa siendo análogo al caso triangular, aunque para este caso la degeneración es menos evidente.

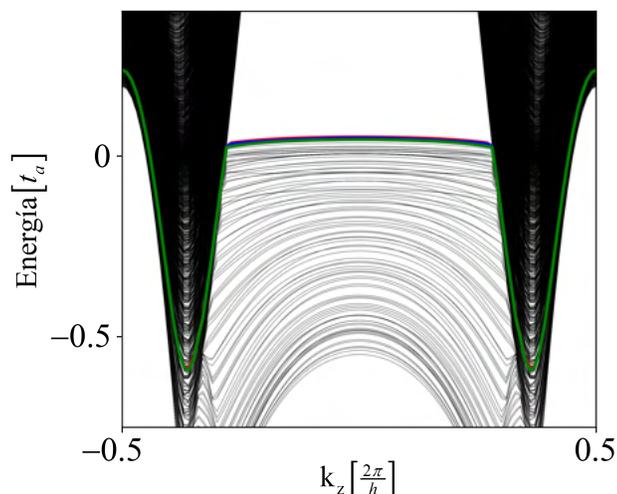


Fig. 3.17: Dispersión de las bandas energéticas con desorden en el arreglo hexagonal. Gráfico de bandas para el arreglo finito hexagonal al imponer desorden tipo Anderson en las energías de sitio del sistema. Se observa el rompimiento de la degeneración. Se ha considerado $w = 0.1$ u.a. como parámetro de desorden. Los parámetros de los hoppings fueron definidos como $t_a = -1.0$, $t_b = -2.4$ y $t_z = -1.0$ en unidades arbitrarias (u.a).

3.6. Sistema finito paralelogramo

En esta sección vamos a realizar el análisis del comportamiento de las bandas energéticas de los estados de borde tal y como se ha realizado en las dos secciones anteriores suponiendo ahora una geometría de paralelogramo en el plano xy con periodicidad en el eje z (ver Fig. 3.18).

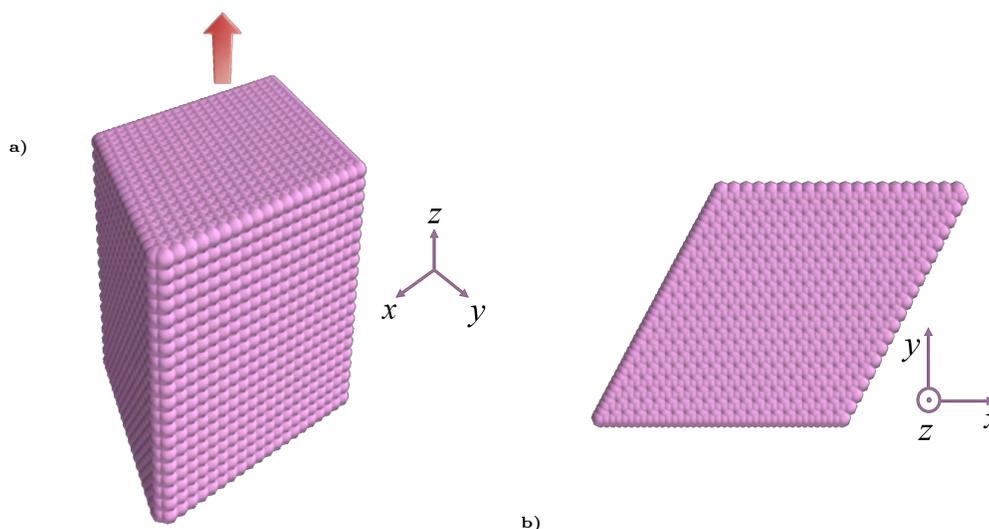


Fig. 3.18: Arreglo finito de paralelogramo. Esquemización del modelo tridimensional cuyo corte transversal en el plano xy tiene la geometría de un paralelogramo. La flecha indica periodicidad en el eje z .

Para este sistema primero partiremos del razonamiento propuesto en las dos secciones anteriores que nos ha permitido justificar de una forma intuitiva si un arreglo podría presentar estados conductores asociados a sus aristas. Fijémonos en la figura 3.19, en donde se muestra la esquematización de la geometría del arreglo finito en el plano xy para el caso $t_a = 0$ considerando únicamente dos capas apiladas (recordemos que el caso $t_a \neq 0$ estará adiabáticamente conectado

3.6 Sistema finito paralelogramo

con este caso). En dicha figura se puede apreciar que únicamente dos de los lados del paralelogramo pueden modelarse como cadenas dimerizadas mediante el modelo SSH y dado que estos dos lados están encontrados solamente hay un sitio aislado resultado de las dos cadenas dimerizadas unidas (esquina inferior izquierda de la figura 3.19). Del modelo SSH, este sitio aislado tendrá asociada una energía igual a cero y corresponderá a un estado conductor del sistema finito. Los dos lados restantes del paralelogramo están compuestos por cadenas unidimensionales de sitios aislados que, de acuerdo con lo obtenido en el caso hexagonal en la sección 3.5 también tendrán una energía igual a cero asociada. Sin embargo, en este caso particular hay que resaltar la existencia de dos sitios aislados que estarán encontrados en la esquina superior derecha del arreglo. La distancia entre estos dos sitios será distinta a la distancia entre sitios de todos los demás sitios aislados en la cadena unidimensional.

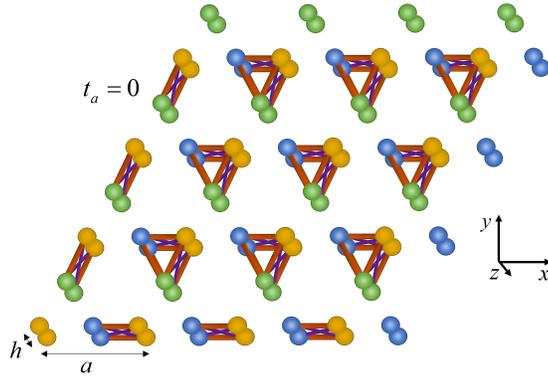


Fig. 3.19: Arreglo finito de capas bidimensionales con $t_a = 0$. Esquemización del arreglo finito con geometría de paralelogramo en el plano xy para el caso $t_a = 0$

En la figura 3.20 se muestra el cálculo de las bandas de energía para este arreglo finito. Lo primero que llama la atención es la aparición de dos bandas aisladas que no se habían obtenido con las dos geometrías propuestas anteriormente, dichas bandas se encuentran resaltadas de color verde y azul en la figura 3.20a) respectivamente. Por otro lado, al hacer el cálculo de la degeneración para las bandas con energía igual a cero, se determinó que ésta es igual a 2, lo que rompe con la degeneración igual a 3 obtenida para las geometrías triangular y hexagonal (ver Fig. 3.20b)).

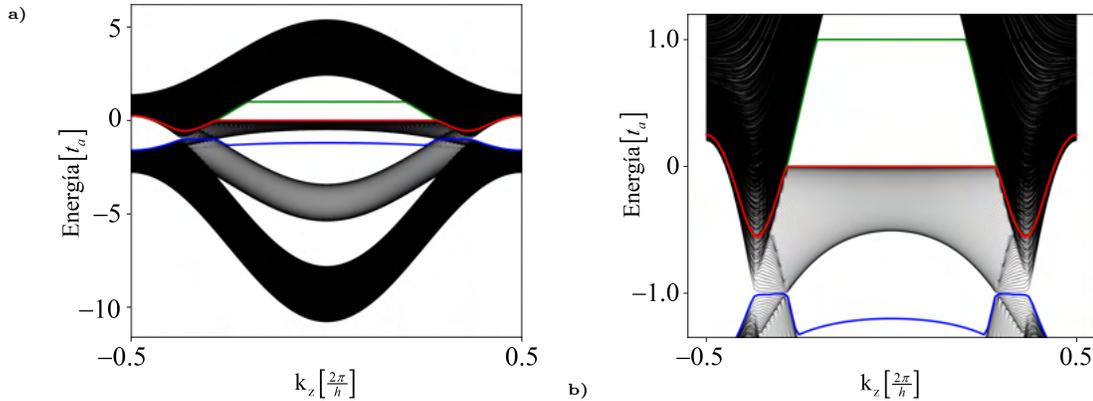


Fig. 3.20: Dispersión de las bandas de energía para el arreglo finito paralelogramo. Los valores de los hoppings para este sistema fueron escogidos como $t_a = -1, t_b = -2.4$ y $t_z = -1$ en unidades arbitrarias (u.a).

3.6 Sistema finito paralelogramo

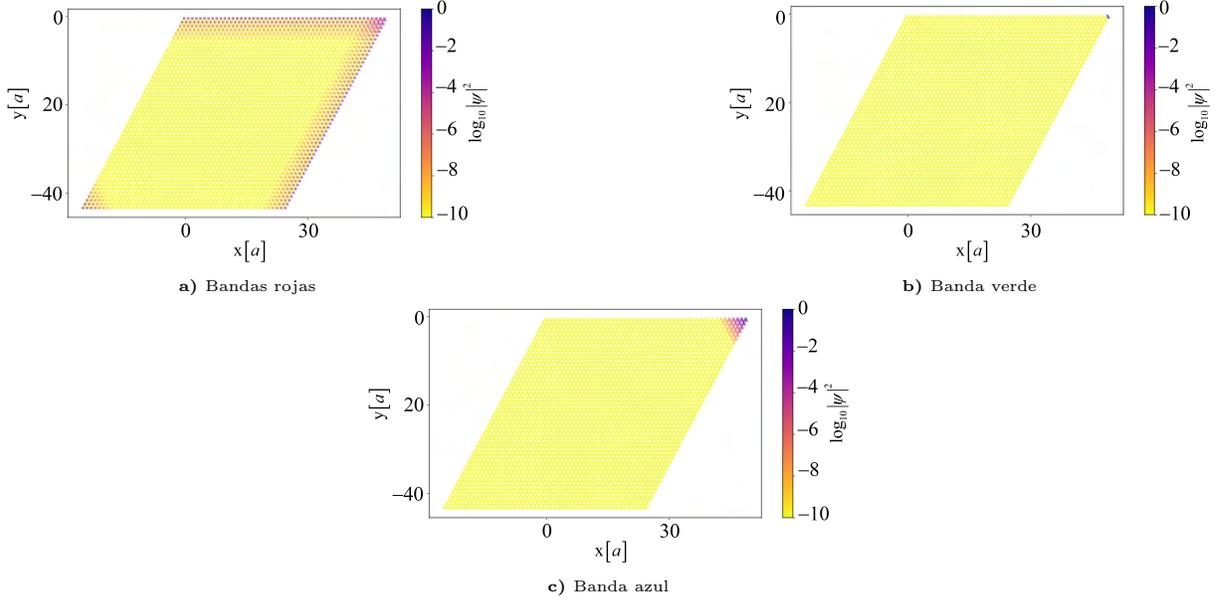


Fig. 3.21: Densidad de probabilidad dependiendo de la posición de los sitios para el arreglo de paralelogramo. En (a) se muestra la densidad de probabilidad para las dos bandas degeneradas con energía igual a cero, en b) para la banda aislada superior (banda verde) de la figura 3.15b) y en c) para la banda aislada inferior (color azul) de la figura 3.15b). Para los tres gráficos el arreglo finito en el plano xy posee 50 celdas unitarias en la base del paralelogramo y los valores de los hoppings fueron escogidos como $t_a = -1, t_b = -2.4$ y $t_z = -1$ en unidades arbitrarias (u.a).

Para hacer un análisis de lo que subyace en las dos bandas degeneradas de la figura 3.20a) así como también de las bandas aisladas que han resultado para este sistema se calculó la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ dependiente de la posición de los sitios para un corte en el plano xy del sistema finito. Los resultados se muestran en la figura 3.21. La densidad de probabilidad para las dos bandas degeneradas con energía igual a cero corresponde a la figura 3.21a), donde se aprecia que para este caso la densidad se encuentra mayormente concentrada en la esquina inferior izquierda del paralelogramo y en dos de los lados opuestos del mismo. Éste resultado se encuentra en concordancia con el razonamiento propuesto anteriormente que ha permitido explicar si un sistema presentará o no estados de arista. Sin embargo, en las figuras 3.21b) y 3.21c) se muestra la densidad de probabilidad para cada una de las bandas aisladas de la figura 3.20b). Ambos gráficos muestran que éstas bandas corresponden a la esquina superior derecha del paralelogramo, particularmente en 3.21b) se puede apreciar que corresponde a los dos sitios encontrados en la esquina superior para este arreglo y que, como se mencionó anteriormente poseen la particularidad de tener una distancia entre ellos distinta a la constante de separación $\frac{a}{2}$ de todos los demás sitios en una misma cadena unidimensional. La existencia de estos estados aislados podría explicar el rompimiento de la degeneración.

Por otro lado, con finalidad de comprender a que estados les corresponde la mayor localización se realizó el cálculo del índice de participación inversa para las bandas energéticas asociadas a este sistema finito. Este resultado se muestra en la figura 3.22a) y puede observarse que los estados con mayor localización corresponderán a las cuatro bandas que hemos analizado anteriormente, es decir: a las dos bandas degeneradas con energía cero y a las dos bandas aisladas con energía diferente de cero. Éste resultado nos permite intuir que el rompimiento de la degeneración posiblemente se encuentra asociado a los dos sitios encontrados de la esquina

superior derecha. Al graficar la densidad de probabilidad como función de las posiciones de los sitios en el arreglo tridimensional como se muestra en la figura 3.22b) comprobamos que estas bandas corresponden a una de las aristas y a las dos caras transversales opuestas del arreglo tridimensional, el cual es un resultado distinto al caso triangular y al caso hexagonal.

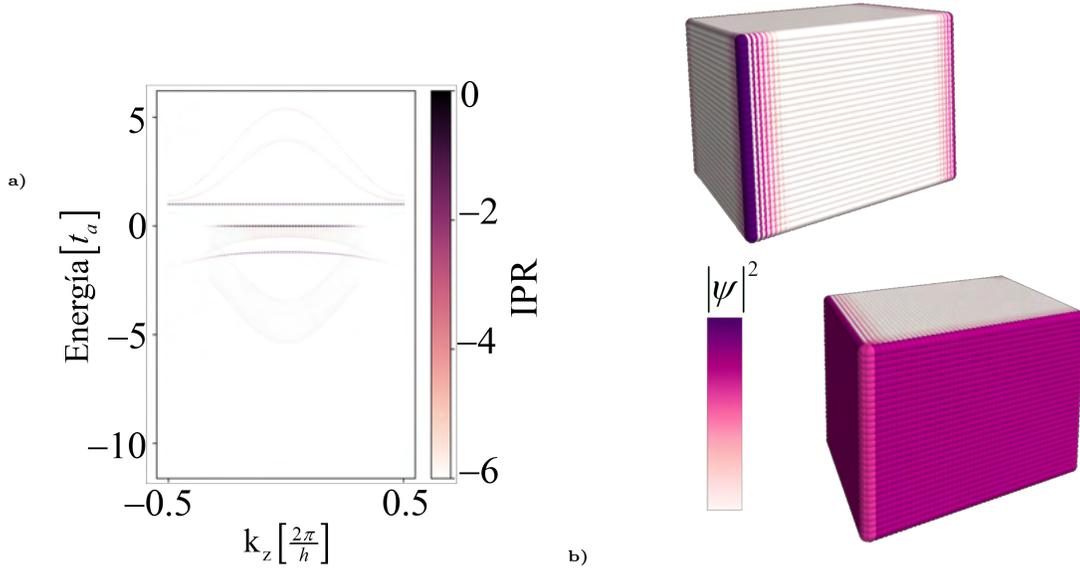


Fig. 3.22: (a) Bandas de energía como función del índice de participación inversa para el arreglo finito cuya base tiene geometría de paralelogramo. El cálculo se realizó considerando 50 celdas unitarias en la base del paralelogramo (b) Densidad de probabilidad como función de la posición de los sitios para el arreglo tridimensional propuesto. Se considera periodicidad en el eje z . Los valores de los hoppings fueron escogidos como $t_a = -1, t_b = -2.4$ y $t_z = -1$ en unidades arbitrarias (u.a).

3.7. Cálculo del transporte electrónico

El descubrimiento de estados de borde topológicamente protegidos tanto en aislantes como en semimetales topológicos ha abierto una nueva vía hacia la exploración de nuevos fenómenos de transporte. Particularmente ha llamado la atención el hecho de que los portadores de carga en estos estados superficiales estarán protegidos de los fenómenos de retrodispersión incluso a pesar de las impurezas en el material y esta característica podría tener un gran potencial en aplicaciones en dispositivos electrónicos.

Como se ha concluido de las secciones previas, el semimetal topológico de segundo orden cuya geometría en el plano xy es triangular albergará estados conductores en sus aristas. Sin embargo, para el caso hexagonal y paralelogramo no obtuvimos exactamente los mismos comportamientos, por lo que vale la pena analizar si también existirán cambios relevantes en el transporte en estas tres estructuras, ya que en la práctica, el transporte actuará como la huella de cada uno de los dispositivos.

A continuación se muestran los resultados del cálculo de la conductancia para los tres dispositivos electrónicos que se han presentado previamente (ver Fig. 3.23). Para realizar dichos cálculos se utilizó la paquetería computacional *kwant* [31] y la ecuación (2.52). En todos los

dispositivos los leads se conectaron a las caras transversales a lo largo del eje z . Los valores de los hoppings fueron $t_a = -1$, $t_b = -2.4$ y $t_z = -1$ en unidades arbitrarias mientras que las constantes de red se tomaron como $a = 1$ y $h = 1$.

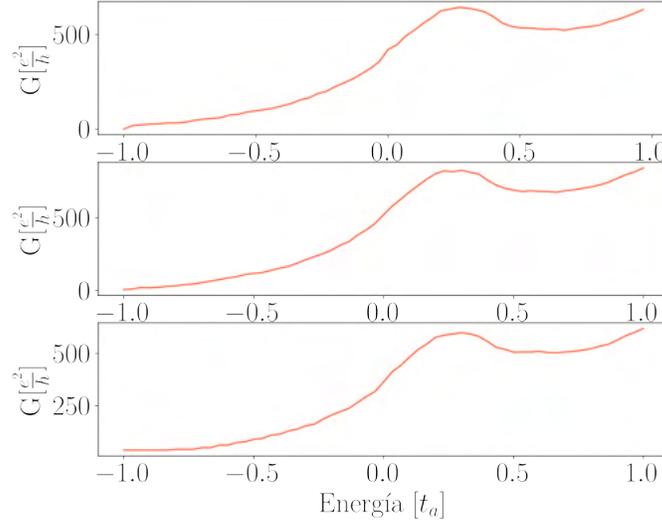


Fig. 3.23: Conductancia para los tres casos geométricos. Panel superior: geometría de paralelogramo considerando 30 celdas unitarias en la base, Panel medio: geometría hexagonal considerando 20 celdas unitarias en la base, Panel inferior: geometría triangular considerando 40 celdas en la base.

A través del análisis de la figura 3.23 puede observarse que el comportamiento de la conductancia para los 3 dispositivos propuestos se mantiene, sin embargo, como es de esperarse los rangos en conductancia varían, ya que éstos dependen del número de canales para cada dispositivo, mismos que dependen del número de sitios en cada estructura. Para poder tener mas claro que el comportamiento de la conductancia es el mismo para los tres casos, se graficó la derivada de G respecto de la energía, este resultado se muestra en la gráfica de la figura 3.24.

Ya que el comportamiento de la conductancia y de su derivada es el mismo para los tres dispositivos, puede concluirse que estos dispositivos dejarán la misma huella de transporte a pesar de no compartir de forma estricta los mismos estados de borde localizados en sus aristas (como en el caso triangular).

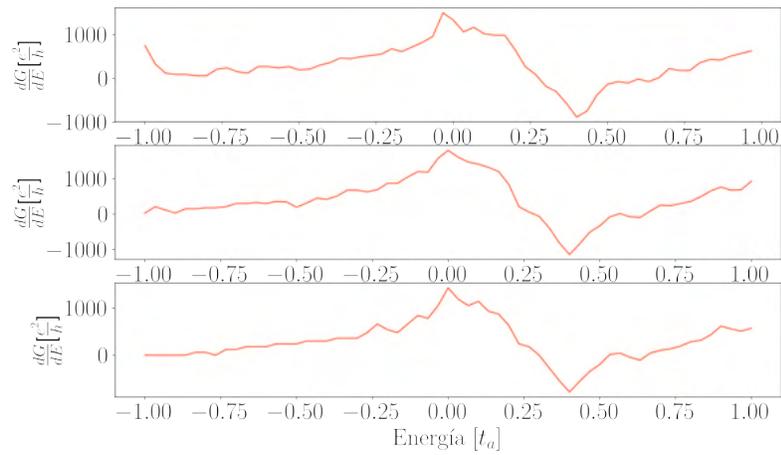


Fig. 3.24: Derivada de la conductancia para los tres casos geométricos. Panel superior: geometría de paralelogramo considerando 30 celdas unitarias en la base, Panel medio: geometría hexagonal considerando 20 celdas unitarias en la base, Panel inferior: geometría triangular considerando 40 celdas en la base.

Conclusiones

En esta tesis se analizó la dependencia de la geometría en los estados de arista para un semimetal topológico tridimensional de orden superior construido a través del apilamiento de redes bidimensionales usando como base la red Kagome. Este análisis nos ha permitido comprender a través de tres ejemplos distintos como la aparición de estados topológicos conductores asociados a las aristas de un sistema tridimensional dependerá de la geometría que posea la base del arreglo finito.

Como un paso previo, primero se realizó la caracterización de las bandas de energía y del invariante topológico asociado al bulto. Se determinó que el comportamiento de las bandas del bulto cambiará respecto al valor que se le asigne al radio entre hoppings $\alpha = \frac{t_a}{t_b}$. Dado que se eligió el radio $\alpha = 1.0$ para el cual las bandas exhiben un comportamiento semimetalico que posee degeneraciones, el invariante topológico (la polarización) se obtuvo a través del cálculo del Wilson Loop del sistema. Como consecuencia, se identificaron dos fases con clases topológicas diferentes: la fase trivial cuyo valor de polarización es $\mathbf{P} = (0, 0)$ y la fase topológica con valor de polarización $\mathbf{P} = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}}\right)$.

Los cambios correspondientes vistos al modificar la geometría de la base del sistema finito a través de los ejemplos propuestos en esta tesis son:

- En el caso en el que el sistema finito tiene una base hexagonal se mantuvieron tres estados degenerados conductores con energía $E = 0$ los cuales se encuentran localizados. Estos resultados coinciden con el caso de base triangular. Sin embargo, en el caso hexagonal la mayor densidad de probabilidad de los estados conductores estarán asociados a tres de las seis caras transversales del sistema tridimensional y no a las aristas del sistema como se obtuvo en el caso triangular.
- En el caso en el cual el sistema finito tiene una base de paralelogramo, a diferencia del caso triangular y hexagonal, se obtuvo una degeneración de dos estados con energía $E = 0$ y además se obtuvieron dos bandas aisladas en $E \neq 0$ que no se presentaron en las estructuras de bandas anteriores. La mayor densidad de probabilidad de estas bandas aisladas están asociadas a una de las aristas del sistema tridimensional. Por otro lado, la mayor densidad de probabilidad de los dos estados con energía $E = 0$ estará asociada a dos de las caras transversales y a una de las aristas del sistema.
- A pesar de las diferencias geométricas de los tres sistemas propuestos, la conductancia y la tasa de cambio de la misma en los tres casos mantuvo el mismo comportamiento. Por lo

que se concluye que la firma electrónica de los tres dispositivos será la misma.

Adicionalmente, con fin de visualizar la robustez de los estados conductores topológicamente protegidos, en los casos geométricos hexagonal y triangular se calcularon las bandas de energía correspondientes a los bordes aplicando un desorden tipo Anderson. En ambos casos el desorden rompió con la degeneración del sistema, conservando solamente una banda con energía $E = 0$ sin afectar en el comportamiento conductor de las bandas, por lo que se concluyó que un desorden en las energías de sitio del sistema no provoca un cambio de fase.

En conclusión, los resultados obtenidos en esta tesis, nos proporcionan información relevante sobre el comportamiento de los dispositivos electrónicos basados en semimetales topológicos de orden superior, cuyo modelado experimental está jugando un papel importante hoy en día. Existen muchas posibilidades para continuar con la investigación, por ejemplo, podrían probarse otros tipos de desordenes en el sistema para poner a prueba la rigidez de los estados de borde; también pueden implementarse otras geometrías en los bordes más complejas.

Apéndice A

Hamiltoniano de amarre fuerte del sistema

Basándonos en los vectores base que definen la red de Kagome descritos en las ecuaciones (3.3) así como las posiciones de los sitios dados por las ecuaciones (3.6) (véase Fig. 3.1) es posible construir el hamiltoniano de amarre fuerte en el espacio real utilizando la notación de Dirac, de la forma:

$$\begin{aligned}\hat{H} = & t_a \sum_{n,m,s} (|n, m, s, A\rangle \langle n, m, s, B| + h.c.) + t_a \sum_{n,m,s} (|n, m, s, A\rangle \langle n, m, s, C| + h.c.) \\ & + t_a \sum_{n,m,s} (|n, m, s, B\rangle \langle n, m, s, C| + h.c.) + t_b \sum_{n,m,s} (|n, m + 1, s, A\rangle \langle n, m, s, B| + h.c.) \\ & + t_b \sum_{n,m,s} (|n + 1, m, s, A\rangle \langle n, m, s, C| + h.c.) + t_b \sum_{n,m,s} (|n + 1, m - 1, s, B\rangle \langle n, m, s, C| + h.c.) \\ & + t_z \sum_{n,m,s} (|n, m + 1, s + 1, A\rangle \langle n, m, s, B| + h.c.) \\ & + t_z \sum_{n,m,s} (|n, m + 1, s - 1, A\rangle \langle n, m, s, B| + h.c.) \\ & + t_z \sum_{n,m,s} (|n + 1, m, s + 1, A\rangle \langle n, m, s, C| + h.c.) \\ & + t_z \sum_{n,m,s} (|n + 1, m, s - 1, A\rangle \langle n, m, s, C| + h.c.) \\ & + t_z \sum_{n,m,s} (|n + 1, m - 1, s + 1, B\rangle \langle n, m, s, C| + h.c.) \\ & + t_z \sum_{n,m,s} (|n + 1, m - 1, s - 1, B\rangle \langle n, m, s, C| + h.c.),\end{aligned}\tag{A.1}$$

donde $|n, m, s, A\rangle$, $|n, m, s, B\rangle$ y $|n, m, s, C\rangle$ denotan los estados de los sitios en la celda unitaria cuya posición es (n, m, s) tal que $n, m, s \in \mathbb{Z}/\{-\infty < n, m, s < \infty\}$. Además t_a, t_b y t_z denotan los hoppings o integrales de salto del sistema.

Resulta mas conveniente escribir este hamiltoniano utilizando su forma equivalente en segunda cuantización, relacionando los kets con los operadores de creación y aniquilación:

$$\begin{aligned}\hat{c}_{n,m,s;A}^\dagger &\rightarrow |n, m, s, A\rangle & \text{y} & \hat{c}_{n,m,s;A} \rightarrow \langle n, m, s, A|, \\ \hat{c}_{n,m,s;B}^\dagger &\rightarrow |n, m, s, B\rangle & \text{y} & \hat{c}_{n,m,s;B} \rightarrow \langle n, m, s, B|, \\ \hat{c}_{n,m,s;C}^\dagger &\rightarrow |n, m, s, C\rangle & \text{y} & \hat{c}_{n,m,s;C} \rightarrow \langle n, m, s, C|.\end{aligned}\tag{A.2}$$

Por lo tanto, el hamiltoniano de amarre fuerte en el espacio real escrito en segunda cuantización es:

$$\begin{aligned}\hat{H} = \sum_{n,m,s} & [t_a (\hat{c}_{n,m,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + h.c) + t_a (\hat{c}_{n,m,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c) + t_a (\hat{c}_{n,m,s;B}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c) \\ & + t_b (\hat{c}_{n,m+1,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + h.c) + t_b (\hat{c}_{n+1,m,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c) + t_b (\hat{c}_{n+1,m-1,s;B}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c) \\ & + t_z (\hat{c}_{n,m+1,s+1;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + h.c) + t_z (\hat{c}_{n,m+1,s-1;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + h.c) + t_z (\hat{c}_{n+1,m,s+1;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c) \\ & + t_z (\hat{c}_{n+1,m,s-1;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c) + t_z (\hat{c}_{n+1,m-1,s+1;B}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c) \\ & + t_z (\hat{c}_{n+1,m-1,s-1;B}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c)].\end{aligned}\tag{A.3}$$

Deseamos transformar este hamiltoniano al espacio recíproco, por lo que escribimos los operadores de creación y aniquilación de los estados de Bloch utilizando las siguientes transformaciones:

$$\begin{aligned}\hat{c}_{n,m,s;A}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{n,m,s}} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger, \\ \hat{c}_{n,m,s;A} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{n,m,s}} \hat{c}_{\mathbf{k};A}.\end{aligned}\tag{A.4}$$

con $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ y $N = N_x N_y N_z$ el número de sitios en la dirección x, y y z respectivamente. Las transformaciones al espacio recíproco para B y C son análogas. Sustituyendo estas ecuaciones en el primer término del hamiltoniano de la ecuación (A.3) se obtiene:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n,m,s} t_a \left(\hat{c}_{n,m,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + \hat{c}_{n,m,s;B}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;A} \right) = \\
& = \frac{1}{N} t_a \sum_{n,m,s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \left(e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n,m,s}} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}';B} + e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n,m,s}} \hat{c}_{\mathbf{k}';B}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};A} \right).
\end{aligned} \tag{A.5}$$

Ahora, utilicemos la siguiente propiedad:

$$\frac{1}{N} \sum_{n,m,s} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n,m,s}} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \tag{A.6}$$

y tomando $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, finalmente se obtiene:

$$\sum_{n,m,s} t_a \left(\hat{c}_{n,m,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + \hat{c}_{n,m,s;B}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;A} \right) = t_a \left(\hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};B} + \hat{c}_{\mathbf{k};B}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};A} \right). \tag{A.7}$$

De forma análoga se transforman los primeros tres terminos del hamiltoniano de la ecuación (A.3). Ahora, fijémonos en el cuarto término del hamiltoniano y realicemos la misma transformación.

$$\begin{aligned}
& t_b \left(\hat{c}_{n,m+1,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + h.c \right) = \\
& \frac{1}{N} t_b \sum_{n,m,s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \left(e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n,m+1,s}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n,m,s}} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}';B} + h.c \right).
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Notemos que $\mathbf{r}_{n,m+1,s} = \mathbf{r}_{n,m,s} + \mathbf{a}_2$ por lo tanto:

$$\begin{aligned}
& t_b \left(\hat{c}_{n,m+1,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + h.c \right) = \\
& \frac{1}{N} t_b \sum_{n,m,s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \left(e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n,m,s}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}';B} + h.c \right).
\end{aligned} \tag{A.9}$$

y utilizando la propiedad (A.6) finalmente se obtiene:

$$t_b \left(\hat{c}_{n,m+1,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;B} + h.c \right) = t_b \left(e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};B} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \hat{c}_{\mathbf{k};B}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};A} \right). \tag{A.10}$$

De forma análoga se realiza la transformación para el quinto y sexto término del hamiltoniano A.3, utilizando que $\mathbf{r}_{n+1,m,s} = \mathbf{r}_{n,m,s} + \mathbf{a}_1$ y $\mathbf{r}_{n+1,m-1,s} = \mathbf{r}_{n,m,s} + \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. Los términos

transformados se escriben como:

$$\begin{aligned}
t_b \left(\hat{c}_{n+1,m,s;A}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c. \right) &= t_b \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} \hat{c}_{\mathbf{k};C}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};A} \right) \\
t_b \left(\hat{c}_{n+1,m-1,s;B}^\dagger \hat{c}_{n,m,s;C} + h.c. \right) &= t_b \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} \hat{c}_{\mathbf{k};B}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} \hat{c}_{\mathbf{k};C}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};B} \right).
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Los últimos seis términos del hamiltoniano (A.3) que se encuentran multiplicados por el hopping t_z se obtienen siguiendo el mismo procedimiento, finalmente el hamiltoniano transformado al espacio recíproco se escribe como:

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\mathbf{k}) &= t_a \left(\hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};B} + h.c. \right) + t_a \left(\hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + h.c. \right) + t_a \left(\hat{c}_{\mathbf{k};B}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + h.c. \right) \\
&+ t_b \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};B} + h.c. \right) + t_b \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + h.c. \right) + t_b \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_2)} \hat{c}_{\mathbf{k};B}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + h.c. \right) \\
&+ t_z \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_2+\mathbf{a}_3)} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};B} + h.c. \right) + t_z \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_2-\mathbf{a}_3)} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};B} + h.c. \right) \\
&+ t_z \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_3)} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + h.c. \right) + t_z \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_3)} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + h.c. \right) \\
&+ t_z \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_2-\mathbf{a}_1+\mathbf{a}_3)} \hat{c}_{\mathbf{k};B}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + h.c. \right) + t_z \left(e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_2-\mathbf{a}_1-\mathbf{a}_3)} \hat{c}_{\mathbf{k};B}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k};C} + h.c. \right)
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Reescribiendo este hamiltoniano en su forma matricial:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k};A}^\dagger & \hat{c}_{\mathbf{k};B}^\dagger & \hat{c}_{\mathbf{k};C}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_a + t'_b e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2)a} & t_a + t'_b e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1)a} \\ t_a + t'_b e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2)a} & 0 & t_a + t'_b e^{i(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_2-\mathbf{a}_1))a} \\ t_a + t'_b e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1)a} & t_a + t'_b e^{-i(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_2-\mathbf{a}_1))a} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k};A} \\ \hat{c}_{\mathbf{k};B} \\ \hat{c}_{\mathbf{k};C} \end{pmatrix} \tag{A.13}$$

Con lo que recuperamos el resultado de la ecuación (3.10) con $t'_b = t_b + t_z (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3})$ con $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$.

Apéndice B

Modelo SSH unidimensional

En esta sección mostraremos las características generales del modelo Su-Schrieffer-Heager (SSH) para el caso unidimensional.

Como punto de partida consideremos una cadena con N celdas unitarias, cada celda está compuesta por dos sitios (ver Fig.B.1) separadas por los acoplamientos v y w . Identifiquemos a los dos sitios con las etiquetas A y B . En este modelo se desprecia la interacción entre los electrones y se considera unicamente un orbital por sitio. El hamiltoniano de amarre fuerte del sistema se escribe como:

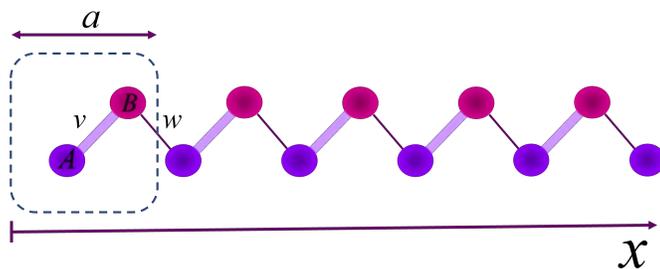


Fig. B.1: Esquematización del modelo SSH unidimensional. La línea punteada indica la celda unitaria para este sistema.

$$\hat{H} = v \sum_{n=0}^{N-1} \left(|n, B\rangle \langle n, A| + |n, A\rangle \langle n, B| \right) \quad (\text{B.1})$$

$$+ w \sum_{n=0}^{N-2} \left(|n+1, A\rangle \langle n, B| + |n, B\rangle \langle n+1, A| \right). \quad (\text{B.2})$$

$|n, A\rangle$ y $|n, B\rangle$ (con $n \in \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$) denotan los estados de la cadena donde los electrones están en la celda unitaria n en la subred A y B , respectivamente. La degeneración de espín está ausente en el modelo SSH, ya que ningún término del Hamiltoniano actúa sobre el espín. Por simplicidad, consideramos las amplitudes de los hoppings como reales y no negativas, esto es,

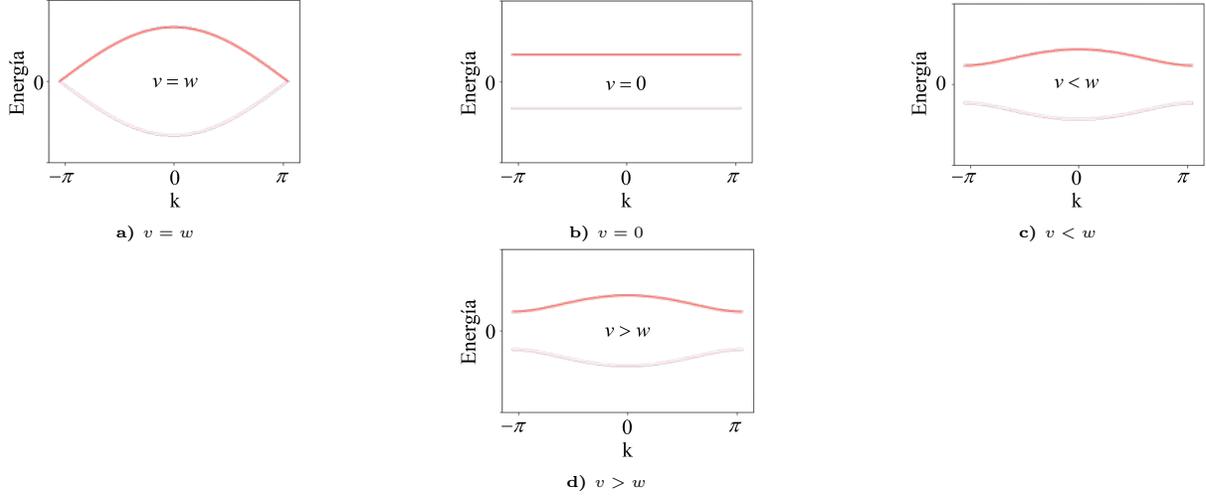


Fig. B.2: Relación de dispersión del modelo SSH unidimensional. El comportamiento de las bandas se modifica dependiendo de la relación entre los valores de los acoplamientos v y w .

$v, w \geq 0$.

La matriz Hamiltoniana del modelo de SSH, en la base del espacio real, para una cadena de $N = 3$ celdas unitarias, es:

$$H = \begin{bmatrix} \langle 0, A | \hat{H} | 0, A \rangle & \langle 0, A | \hat{H} | 0, B \rangle & \langle 0, A | \hat{H} | 1, A \rangle & \langle 0, A | \hat{H} | 1, B \rangle & \langle 0, A | \hat{H} | 2, A \rangle & \langle 0, A | \hat{H} | 2, B \rangle \\ \langle 0, B | \hat{H} | 0, A \rangle & \langle 0, B | \hat{H} | 0, B \rangle & \langle 0, B | \hat{H} | 1, A \rangle & \langle 0, B | \hat{H} | 1, B \rangle & \langle 0, B | \hat{H} | 2, A \rangle & \langle 0, B | \hat{H} | 2, B \rangle \\ \langle 1, A | \hat{H} | 0, A \rangle & \langle 1, A | \hat{H} | 0, B \rangle & \langle 1, A | \hat{H} | 1, A \rangle & \langle 1, A | \hat{H} | 1, B \rangle & \langle 1, A | \hat{H} | 2, A \rangle & \langle 1, A | \hat{H} | 2, B \rangle \\ \langle 1, B | \hat{H} | 0, A \rangle & \langle 1, B | \hat{H} | 0, B \rangle & \langle 1, B | \hat{H} | 1, A \rangle & \langle 1, B | \hat{H} | 1, B \rangle & \langle 1, B | \hat{H} | 2, A \rangle & \langle 1, B | \hat{H} | 2, B \rangle \\ \langle 2, A | \hat{H} | 0, A \rangle & \langle 2, A | \hat{H} | 0, B \rangle & \langle 2, A | \hat{H} | 1, A \rangle & \langle 2, A | \hat{H} | 1, B \rangle & \langle 2, A | \hat{H} | 2, A \rangle & \langle 2, A | \hat{H} | 2, B \rangle \\ \langle 2, B | \hat{H} | 0, A \rangle & \langle 2, B | \hat{H} | 0, B \rangle & \langle 2, B | \hat{H} | 1, A \rangle & \langle 2, B | \hat{H} | 1, B \rangle & \langle 2, B | \hat{H} | 2, A \rangle & \langle 2, B | \hat{H} | 2, B \rangle \end{bmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

La matriz hamiltoniana asociada al bulto es:

$$H(k) = \begin{bmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

cuyas eigenenergías asociadas son:

$$E(k) = \pm |v + e^{-ik}w| = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k} \quad (\text{B.5})$$

En la figura B.2 se muestran diferentes gráficos de la relación de dispersión del bulto para diferentes casos de los valores de v y w .

Analizaremos el caso particular en el cual se anula el acoplamiento v expuesto en la figura

B.2b). En este caso el sistema del bulto exhibe un comportamiento aislante. Como cualquier material, al hamiltoniano del modelo SSH también se le pueden imponer condiciones de borde, en la figura B.3 se muestra una esquematización del modelo finito considerando $v = 0$ y considerando $N = 5$ celdas unitarias, este sistema se denomina *modelo SSH dimerizado*.

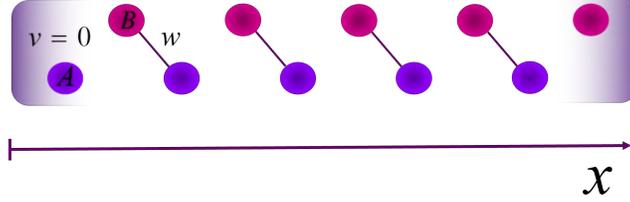


Fig. B.3: Límite dimerizado del modelo SSH finito. Se identifican dos sitios aislados en los dos bordes del sistema completamente separados del bulto.

Las bandas energéticas del modelo finito como función del parámetro de hopping v se muestran en la figura B.4a), en donde se ha tomado $w = 1.0$. En primer lugar, se identifican dos intervalos: uno en donde surgen dos estados conductores con energía $E = 0$; particularmente para el caso $v = 0$ todos los estados restantes tendrán energías ± 1 respectivamente. A este intervalo se le reconocerá como la *fase topológica* del sistema. En el segundo intervalo (al que identificaremos como la *fase trivial*) el sistema continúa teniendo un comportamiento aislante para todos los valores de v . Al graficar la estructura de bandas como función de la densidad de probabilidad (ver Fig.B.4b)) se observa que la mayor densidad para este caso se encuentra concentrada en los dos estados con energía $E = 0$ dentro de la fase topológica que además representan estados conductores del sistema, mientras que todos estados restantes del sistema tienen densidad nula. Los estados conductores corresponden a los dos sitios de los bordes de la figura B.3 [6]. En resumen, este modelo representa un *aislante topológico unidimensional*.

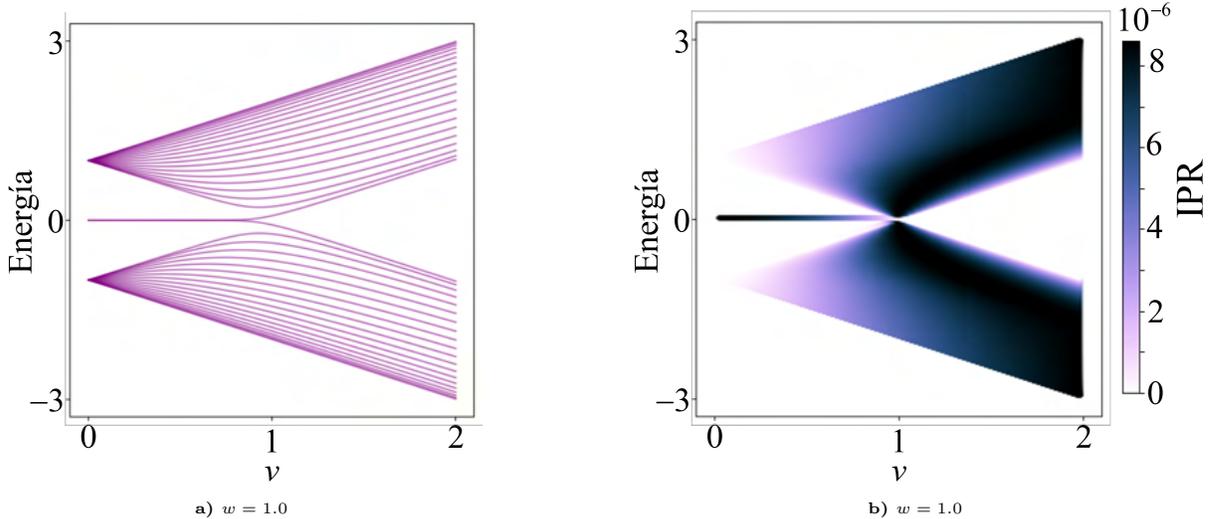


Fig. B.4: Relación de dispersión del modelo SSH finito. En a) se muestra la relación de dispersión como función del parámetro de hopping v . En b) se muestra la relación de dispersión como función del índice de participación inversa. Las unidades de los hoppings se toman como unidades arbitrarias. Se han considerado 20 celdas unitarias.

Bibliografía

- [1] C. L. Kane y E. J. Mele. “**Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect**”. *Physical Review Letters*, 95(14):226801, 2005 (citado en las págs. 1, 2).
- [2] A. G. Grushin. “Algo más que sociología de electrones: semi-metales topológicos de Weyl”. *Revista Española de Física*, 30(4), 2016 (citado en las págs. 1, 2).
- [3] K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper. “**New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance**”. *Phys. Rev. Lett.*, 45:494-497, 6, 1980 (citado en la pág. 2).
- [4] X.-L. Qi y S.-C. Zhang. “**Topological insulators and superconductors**”. *Reviews of Modern Physics*, 83(4):1057-1110, 2011 (citado en la pág. 2).
- [5] G. Tkachov. *Topological Insulators: The Physics of Spin Helicity in Quantum Transport*. Jenny Stanford Publishing, 2015. ISBN: 9789814613262 (citado en la pág. 2).
- [6] J. K. Asbóth. *A short course on Topological Insulators*. Springer, 2016 (citado en las págs. 2, 10-12, 15, 16, 26, 31, 34, 52).
- [7] N. Armitage, E. Mele y A. Vishwanath. “**Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids**”. *Reviews of Modern Physics*, 90(1):015001, 2018 (citado en la pág. 2).
- [8] B. Q. Lv, T. Qian y H. Ding. “**Experimental perspective on three-dimensional topological semimetals**”. *Rev. Mod. Phys.*, 93:025002, 2, 2021 (citado en la pág. 2).
- [9] W. A. Benalcazar, B. A. Bernevig y T. L. Hughes. “**Quantized electric multipole insulators**”. *Science*, 357(6346):61–66, 2017 (citado en las págs. 2, 4, 5).
- [10] B. Xie, H.-X. Wang, X. Zhang, P. Zhan, J.-H. Jiang, M. Lu e Y. Chen. “**Higher-order band topology**”. en. *Nature Reviews Physics*, 3(7):520–532, 2021 (citado en las págs. 4, 5).
- [11] W. A. Benalcazar, B. A. Bernevig y T. L. Hughes. “**Electric multipole moments, topological multipole moment pumping, and chiral hinge states in crystalline insulators**”. en. *Physical Review B*, 96(24):245115, 2017 (citado en las págs. 4, 5).
- [12] S. Mittal, V. V. Orre, G. Zhu, M. A. Gorlach, A. Poddubny y M. Hafezi. “**Photonic quadrupole topological phases**”. *Nature Photonics*, 13(10):692-696, 2019 (citado en la pág. 5).
- [13] B.-Y. Xie, H.-F. Wang, H.-X. Wang, X.-Y. Zhu, J.-H. Jiang, M.-H. Lu e Y.-F. Chen. “**Second-order photonic topological insulator with corner states**”. *Phys. Rev. B*, 98:205147, 20, 2018 (citado en la pág. 5).
- [14] B.-Y. Xie, G.-X. Su, H.-F. Wang, H. Su, X.-P. Shen, P. Zhan, M.-H. Lu, Z.-L. Wang e Y.-F. Chen. “**Visualization of Higher-Order Topological Insulating Phases in Two-Dimensional Dielectric Photonic Crystals**”. *Phys. Rev. Lett.*, 122:233903, 23, 2019 (citado en las págs. 5, 6).

-
- [15] W. A. Benalcazar, T. Li y T. L. Hughes. “Quantization of fractional corner charge in symmetric higher-order topological crystalline insulators”. *Physical Review B*, 99(24), 2019 (citado en la pág. 6).
- [16] H. Xue, Y. Yang, F. Gao, Y. Chong y B. Zhang. “Acoustic higher-order topological insulator on a kagome lattice”. *Nature Materials*, 18(2):108-112, 2018 (citado en la pág. 6).
- [17] Q. Wei, X. Zhang, W. Deng, J. Lu, X. Huang, M. Yan, G. Chen, Z. Liu y S. Jia. “Higher-order topological semimetal in acoustic crystals”. *Nature Materials*, 20(6):812-817, 2021 (citado en las págs. 6, 24, 26, 28-30).
- [18] S. Pancharatnam. “Generalized theory of interference, and its applications”. *Proc. Indian Acad. Sci.*, 44:247-262, 8, 1956 (citado en la pág. 7).
- [19] M. Berry. “Quantal phase factors accompanying adiabatic changes”. *Proc. R. Soc. London Ser. A*, 392:45-57, 8, 1983 (citado en la pág. 7).
- [20] D. J. Griffiths. *Introduction to electrodynamics*. Pearson, 4^o edición, 2013 (citado en las págs. 7, 16).
- [21] T. Kato. “On the Adiabatic Theorem of Quantum Mechanics”. *Journal of the Physical Society of Japan*, 5(6):435-439, 1950 (citado en la pág. 7).
- [22] J. Zak. “Berry’s phase for energy bands in solids”. *Phys. Rev. Lett.*, 62:2747-2750, 23, 1989 (citado en la pág. 10).
- [23] G. H. Wannier. “The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals”. *Phys. Rev.*, 52:191-197, 3, 1937 (citado en la pág. 12).
- [24] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza y D. Vanderbilt. “Maximally localized Wannier functions: Theory and applications”. *Reviews of Modern Physics*, 84(4):1419-1475, 2012 (citado en las págs. 12, 13).
- [25] R. D. King-Smith y D. Vanderbilt. “Theory of polarization of crystalline solids”. *Phys. Rev. B*, 47:1651-1654, 3, 1993 (citado en las págs. 14, 16).
- [26] D. Vanderbilt. *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators*. Cambridge University Press, 2018 (citado en las págs. 14, 15, 18).
- [27] N. A. Spaldin. “A beginner’s guide to the modern theory of polarization”. *Journal of Solid State Chemistry*, 195:2-10, 2012. ISSN: 0022-4596. Polar Inorganic Materials: Design Strategies and Functional Properties (citado en las págs. 17, 18).
- [28] R. Landauer. “Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction”. *IBM Journal of Research and Development*, 1(3):223-231, 1957 (citado en la pág. 19).
- [29] D. Dresen. “Quantum Transport of Non-interacting electrons in 2d systems of arbitrary geometries.” *Master Thesis in Physics*, 2014 (citado en la pág. 19).
- [30] D. Ryndyk. *Theory of Quantum Transport at Nanoscale: An Introduction*, volumen 42 de número 1. Cambridge University Press, 2017, 74–75 (citado en las págs. 19-22).
- [31] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov y X. Waintal. “Kwant: a software package for quantum transport”. *New Journal of Physics*, 16(6):063065, 2014 (citado en las págs. 20, 41).
- [32] L. Medina. *Método Recursivo de la Matriz de Dispersión para el Estudio del Transporte Electrónico en Nanocintas con Variaciones Transversales Mediante Renormalización*. Tesis Licenciatura en Física, UNAM, 2021 (citado en la pág. 20).
- [33] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press, 2005 (citado en la pág. 21).
-

- [34] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer y S. Pinhas. “Generalized many-channel conductance formula with application to small rings”. *Phys. Rev. B*, 31:6207-6215, 10, 1985 (citado en la pág. 21).
- [35] A. Tapia. *Transporte cuántico en billares bidimensionales con campo magnético*. Tesis Licenciatura en Física, UNAM, 2021 (citado en la pág. 21).
- [36] M. Mekata. “Kagome: The Story of the Basketweave Lattice”. *Physics Today*, 56(2):12-13, 2003. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.1564329> (citado en la pág. 23).
- [37] M. Ezawa. “Higher-Order Topological Insulators and Semimetals on the Breathing Kagome and Pyrochlore Lattices”. *Phys. Rev. Lett.*, 120:026801, 2, 2018 (citado en las págs. 26-28, 30).