



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

AISLANTES TOPOLÓGICOS DE ORDEN SUPERIOR PARA SU  
APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

QUÍMICO

PRESENTA

KEAN ATZIN CASTAÑEDA DÍAZ



CDMX

2023



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:

PRESIDENTE: Dr. Cosío Castañeda Carlos

VOCAL: Dr. Martín del Campo Ramírez Jorge

SECRETARIO: Dr. Barrios Vargas José Eduardo

1er. SUPLENTE: Dr. Cortés Arce Abel Humberto

2º SUPLENTE: Dr. Franco Pérez José Marco Antonio

## SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

CUBÍCULO 222 DEL ÁREA DE POSGRADO, EDIFICIO B, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM.

## ASESOR DEL TEMA:

DR. BARRIOS VARGAS JOSÉ EDUARDO

## SUPERVISOR TÉCNICO:

DRA. JIMÉNEZ DÍAZ LAURA MICHELLE

## SUSTENTANTE:

CASTAÑEDA DÍAZ KEAN ATZIN

# Resumen

Debido a la marcada tendencia de miniaturización de los sistemas electrónicos, donde los efectos cuánticos son cada vez más relevantes, una descripción acertada del transporte electrónico en nanosistemas debe contemplar una descripción cuántica de la estructura electrónica del material. Gracias a la llegada de los aislantes topológicos se han descubierto propiedades cuánticas que brindan nuevas posibilidades dentro de los dispositivos electrónicos.

Fenomenológicamente, estos materiales se comportan en su interior como aislantes mientras que su superficie es conductora. Los HOTIs (por sus siglas en inglés, Higher Order Topological Insulators), por su parte, son una nueva clasificación dentro de estos materiales. Los HOTIs tienen la característica peculiar de ser aislantes en su interior o bulto y a la vez tener estados de borde conductores en dimensiones diferentes, donde, de acuerdo a la dimensión  $d$  del material, los estados conductores de borde son clasificados. En el presente trabajo exploramos el espectro electrónico de un HOTI de orden dos, usando un Hamiltoniano de amarre fuerte. Centramos este estudio en un CHOTI (por sus siglas en inglés, Chiral Higher Order Topological Insulator) donde se presentan estados conductores de arista con direcciones en un solo sentido. Para caracterizar los estados, usamos el IPR (por sus siglas en inglés, Inverse Participation Ratio) e identificamos las variaciones en la relación de dispersión al modificar el tamaño del sistema. Posteriormente, estudiamos las propiedades de transporte electrónico en un dispositivo formado por una nanobarra conectada a dos terminales usando la relación de Landauer entre la conductancia y la transmisión, empleando la paquetería KWANT.

Con el fin de generar más estados conductores, simulamos un agujero cuadrado dentro del sistema de la nanobarra. Encontramos que se generan estados conductores de arista al realizar un agujero de un tamaño mayor al de la celda unitaria. Gracias a los avances experimentales, se han encontrado pruebas de que el  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  dopado con  $\text{S}_M$  presenta las características de un CHOTI, por lo que constituye un material en el cual se pueden contrastar los resultados de este trabajo.



# Agradecimientos

En primera instancia agradezco a mis padres: María Alejandra Díaz Camaño y Carlos Martín Castañeda Torres por todo el apoyo, esfuerzo y cariño que me brindaron en esta etapa, sin ustedes nada de esto hubiera sido posible, los amo. Agradezco a mi hermana Ana Ileri Castañeda Díaz por su compañía y ayuda en momentos vitales de mi vida. A mi familia, José Herrera, Ixchel Herrera, Guadalupe Castañeda y Gilberto Barona por su apoyo incondicional y amor. A mis abuelos, Evangelina Torres, María Camaño y Quintín Díaz por contribuir en mis valores como persona.

Agradezco a mi asesor, el Dr. José Eduardo Barrios Vargas por su amistad, consejos, esfuerzo y enseñanzas a lo largo de todo este tiempo, estoy infinitamente agradecido con usted. A mi asesora técnica, la Dra. Laura Michelle Jiménez Díaz, por compartir su amistad y sabiduría conmigo, así como por contribuir ampliamente en mi desarrollo académico. A mis sinodales el Dr. Carlos Cosío Castañeda y el Dr. Jorge Martín del Campo por revisar la presente tesis y brindarme sus comentarios al respecto.

Enseguida, quisiera agradecer a los topoamigos, por todas las risas, desveladas, congresos y pláticas juntos. En especial a Montserrat Navarro y Jazmín Tapia por contribuir a la realización de esta tesis y por hacerme pasar ratos inigualables, las quiero mucho. A Eduardo Calep, Diego Bautista y Omero Hernández por sus consejos y ocurrencias.

Por otro lado, a mis amigos de la carrera Eduardo Suárez, Reynaldo Villanueva, Israel Lule, Giovanny Torres, Estefanía Torija y David Insúa quisiera agradecerles por estar junto a mí a lo largo de esta etapa, sin ustedes nada hubiera sido lo mismo. A mis amigas de primer semestre Gabriela Reyes y Laura Martínez, por todas esas prácticas y ratos libres juntos que me hicieron muy feliz. A mis amigos de toda la vida, Alexis Rangel, Angie Neira, Angela Mayen, Odette Flores, Eduardo Durazno, Kenya Granda y Pablo Díaz, por siempre ser un apoyo en los momentos más difíciles.

También agradezco a la Facultad de Química por todas las herramientas brindadas, a la UNAM por todas las facilidades ofrecidas en la licenciatura y al departamento de Física y Química Teórica por darme un espacio para realizar esta tesis.

Finalmente, agradezco al programa 127 de la Facultad de Química por apoyarme económicamente para la realización de este trabajo.

# Índice general

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	Materiales cuánticos . . . . .	1
1.2	Aislantes topológicos . . . . .	3
1.3	Aislantes topológicos de orden superior . . . . .	4
1.4	Conductancia cuantizada . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Marco teórico</b>	<b>7</b>
2.1	Hamiltoniano de amarre fuerte . . . . .	7
	Hamiltoniano SSH . . . . .	11
	Hamiltoniano de Schindler . . . . .	13
2.2	Transporte electrónico . . . . .	15
2.3	Partícula atravesando una barrera de potencial . . . . .	17
2.3.1	Matriz de dispersión . . . . .	23
	Método de diferencias finitas . . . . .	24
2.3.2	Densidades locales y densidad de corriente . . . . .	27
	Densidades locales . . . . .	28
	Densidades de corriente . . . . .	28
2.4	Desorden tipo Anderson . . . . .	28
<b>3</b>	<b>Descripción del trabajo</b>	<b>31</b>
3.1	Objetivo general . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>33</b>
4.1	HOTI . . . . .	33
4.1.1	Celda unitaria . . . . .	33
4.1.2	Hamiltoniano . . . . .	36
4.1.3	Espacio de fases topológicas . . . . .	37
4.1.4	Bulto . . . . .	38
4.1.5	Densidad de estados . . . . .	41
4.1.6	Monocristal . . . . .	42
4.1.7	Conductancia . . . . .	44
	Densidad de estados . . . . .	45



4.1.8	IPR	49
4.1.9	Desorden tipo Anderson	50
4.1.10	Tamaño	51
4.2	HOTI con agujero	52
4.2.1	Conductancia	54
4.2.2	Desorden tipo Anderson y tamaño	55
4.2.3	Densidad de estados	58
5	Conclusiones	59
	Bibliografía	61

# Introducción

## 1.1 Materiales cuánticos

La materia condensada combina la química y la física de las partículas a una densidad finita y a una temperatura baja. Dependiendo de otros factores como lo son la presión o el espín de las partículas podemos distinguir ciertas fases de la materia. Clásicamente tenemos fases de la materia como la fase sólida, líquida o gaseosa, sin embargo, en el régimen cuántico esto cambia radicalmente [1]. La mecánica cuántica predice numerosas fases de la materia como lo son los materiales ferromagnéticos, los condensados, superconductores, entre otras. Asimismo, dentro de estas nuevas fases se encuentran las llamadas fases electrónicas, las cuales, deben su nombre al comportamiento de los electrones. Desde sus inicios y debido a la naturaleza cuántica del electrón fue necesario crear una teoría para predecir el comportamiento y propiedades para estas nuevas fases electrónicas. Fue así entonces que gracias al trabajo de Felix Bloch, se formuló el concepto de bandas electrónicas en sólidos, describiendo la función de onda en términos de su momento cristalino ( $\vec{k}$ ) y dando origen a la teoría de bandas. Esta teoría predice continuos de niveles de energía llamados bandas que describen los niveles permitidos de los electrones en función del momento cristalino [2]. Por otra parte, dentro de la teoría cuántica se tiene otro aspecto esencial, la energía de Fermi. La energía de Fermi es el último nivel energético que puede ser ocupado por los electrones dentro de un sólido. Desde este punto de vista, la relación entre estas bandas y la energía de Fermi permite explicar las propiedades electrónicas de transporte del material en cuestión [3]. Comúnmente al pensar en fases electrónicas es típico pensar en las fases de aislante eléctrico y de conductor eléctrico. Por un lado la fase de aislante tiene la peculiaridad de tener una brecha energética a la energía de Fermi; es decir, su última banda ocupada (banda de valencia) y su primera banda desocupada (banda de conducción) están separadas. Por otro lado, la fase de conductor eléctrico posee la característica de que su energía de Fermi se sitúa entre una misma banda; en otras

palabras, la energía necesaria para una excitación electrónica es infinitesimal. Los materiales cuánticos son una nueva clase especial de materiales que exhiben propiedades electrónicas peculiares debido a su estructura de bandas. Estos materiales son de suma relevancia hoy en día ya que estos tienen propiedades únicas, pudiendo ser fuertemente útiles en la creación y desarrollo de nuevas tecnologías e innovaciones futuras [4]. La historia de los materiales cuánticos topológicos comienza con el descubrimiento del efecto Hall cuántico. El efecto Hall es un fenómeno del siglo XX en donde se tiene un material bidimensional conductor. A este sistema se le hace pasar un campo magnético externo y perpendicular a su superficie, dando como resultado la aparición de una corriente asociada en los bordes y por lo tanto un campo eléctrico asociado. Posteriormente al efecto Hall, en 1985, Klaus von Klitzing ganó el premio nobel por el descubrimiento del efecto hall cuántico (QHE). Este descubrimiento se basa en la versión cuántica del fenómeno del efecto Hall. La corriente producida por añadir el campo magnético externo, esta vez aparece cuantizada.

Este experimento incentivó a la comunidad científica a explorar a detalle la naturaleza cuántica de la cuantización de la conductancia Hall en múltiplos enteros de  $e^2/h$ . La explicación final de esta cuantización pudo entenderse en términos de un objeto matemático construido a través de las propiedades del material en el "bulto", el cual es un invariante topológico conocido como número de Chern [5].

La palabra topología viene del griego "τοπος" que significa posición o localización. Siendo este nombre apropiado para la topología, ya que es la rama de las matemáticas que estudia las propiedades geométricas que solamente son dependientes de las posiciones relativas de los componentes y no de conceptos como la longitud, magnitud o tamaño. Asimismo, la topología no toma en cuenta las propiedades que no son destruidas por transformaciones continuas o suaves, como el cortar, rasgar o perforar los espacios [6].

Como mencionamos al inicio de esta sección, las fases electrónicas pueden ser descritas por las funciones de onda en términos del momento  $\vec{k}$ ; ahora el espacio generado por dichas funciones puede ser un haz fibrado no trivial al cual es posible asignarle un invariante topológico [7]. La topología comenzó a tener mucha relevancia dentro de la ciencia de la materia condensada con la llegada de materiales cuánticos topológicos.

## 1.2 Aislantes topológicos

Como mencionamos anteriormente, un constante objetivo de la ciencia en la materia condensada es el encontrar nuevas fases electrónicas de la materia. En 1988, Haldane [8] propuso replicar el efecto Hall cuántico sin el uso de un campo magnético mediante un modelo de juguete en una red de panel de abeja, la misma del grafeno. En 2005, Kane y Mele [9], propusieron duplicar el modelo de Haldane por las interacciones espín-órbita dentro de las monocapas de grafeno, surgiendo así el Quantum Spin-Effect (QSE). Los aislantes topológicos tridimensionales aparecieron en 2007 [10] como un novedoso campo de la física de sólidos y captaron la atención de la comunidad científica rápidamente. Estos materiales comenzaron como la generalización en tres dimensiones del efecto Hall cuántico, es decir, un aislante tridimensional en su interior que posee superficies conductoras, dando como resultado estados de borde de dimensión dos. En estos aislantes, se encontró de nueva cuenta la presencia de un invariante topológico. Este invariante está fuertemente relacionado con las simetrías, brindando al material de características especiales. Por ejemplo, una de las implicaciones que tiene la topología directamente en el material es la permanencia de estados conductores, presentes aún pese a deformaciones o perturbaciones en el material.

Posteriormente a este descubrimiento, se presentaron los primeros candidatos experimentales para estos materiales como lo son el  $\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x}$  [11],  $\text{HgTe}$  [12, 13]. El método utilizado para descubrir generalmente estos materiales es llamado ARPES (por sus siglas en inglés "Angle-resolved photoemission spectroscopy"). Esta espectroscopia emplea un fotón para expulsar un electrón del cristal con el fin de determinar la estructura electrónica con un análisis del momento del electrón expulsado. Esto comprueba directamente la existencia de los estados conductores metálicos de la superficie y por consiguiente los invariantes topológicos [14].

## 1.3 Aislantes topológicos de orden superior

Hace apenas unos años, un nuevo descubrimiento llegó a impactar en la comunidad científica del área del estado sólido. Este descubrimiento arrojó un nuevo tipo de material en el área de materia condensada: los aislantes topológicos de orden superior. Estos HOTI (por sus siglas en inglés), a diferencia de los aislantes topológicos clásicos, poseen sus estados de borde en dimensiones menores de la dimensión de su frontera [15]. Para ejemplificar esto, imaginemos un cubo. La dimensión del cubo es tres, mientras para un aislante topológico clásico los estados conductores de borde aparecen en las caras, en un aislante topológico de orden superior es capaz de tener estos estados hasta en los vértices, en otras palabras, los estados cuánticos se restringen en mayor grado.

De acuerdo al grado al que se restrinjan estos estados, es el orden que se le asignará al material. Si se tiene un sistema de dimensión  $n = 3$ , los estados de borde de un aislante superior de orden 2 aparecerán en  $n - 1$ . En el aislante superior de orden tres en  $n - 2$  y así sucesivamente. Estos aislantes han sido fuertemente sustentados teóricamente y experimentalmente a través de cálculos de primeros principios y argumentos topológicos, y de técnicas experimentales complementarias como el interferómetro de Josephson respectivamente. Además, se han encontrado materiales que presentan estas características; ejemplos son el bismuto como un HOTI [16, 17] o el  $\text{Bi}_{2-x}\text{Sm}_x\text{Se}_3$  como un CHOTI [18, 19].

## 1.4 Conductancia cuantizada

La conductancia eléctrica es un fenómeno de la física que describe la capacidad de un material para permitir el flujo de corriente eléctrica. Clásicamente hablando, la conductancia se describe gracias a la ley de Ohm. Esta establece que para crear una corriente es necesario mover a los electrones. Qué tan rápido estos se puedan mover depende de la naturaleza del material.

Así entonces, existe una relación lineal entre la corriente eléctrica ( $I$ ) y la diferencia de potencial ( $V$ ) a través de un material conductor, representada por la relación  $V = IR$ , donde  $R$  es la resistencia del material. La conductancia del material está definida como el inverso de la resistencia, es decir:  $G = R^{-1}$ . Esta conductancia clásica se caracteriza por ser un fenómeno continuo, donde la resistencia puede tomar valores de manera gradual sin ser restringida a valores específicos [20]. Por otro lado, la conductancia cuantizada es un fenómeno notable que se manifiesta en sistemas a escalas muy reducidas, como nanoestructuras y materiales de dimensiones atómicas. En estos sistemas, se observa que la conductancia eléctrica se presenta en valores discretos o "cuantizados", en contraste con la conductancia continua de la física clásica.

Un ejemplo notable de conductancia cuantizada se encuentra en el antes mencionado efecto Hall cuántico entero, descubierto por Klaus von Klitzing en 1980. Este efecto muestra que la conductancia en ciertos materiales bidimensionales se cuantiza en múltiplos de una constante, la constante de von Klitzing ( $R_K = h/e^2$ ), donde  $h$  es la constante de Planck y  $e$  la carga elemental [21]. La conductancia cuantizada se manifiesta sobre todo en sistemas altamente controlados, como en dispositivos de efecto Hall cuántico o estructuras nanoescaladas [22]. Este fenómeno reveló a la comunidad cómo se comporta verdaderamente la naturaleza de los electrones, teniendo así implicaciones significativas en el área de la física de la materia condensada y el desarrollo de dispositivos electrónicos.

En la primera parte de esta tesis abordamos conceptos esenciales dentro del área de la materia condensada; como las fases electrónicas, materiales cuánticos, topología y un resumen de cómo fue el descubrimiento de los aislantes topológicos de orden superior y sus detalles. Además, con el fin de posteriormente abordar el tema de transporte electrónico, introducimos el concepto de conductancia cuántica. En la sección del marco teórico, comenzamos describiendo la metodología empleada en el trabajo con la construcción del hamiltoniano de amarre fuerte y por consiguiente el hamiltoniano de Schindler [15] empleado en este trabajo.

Debido a la importancia de los dispositivos electrónicos, presentamos la teoría involucrada dentro del transporte electrónico como es la formulación de Landauer-Buttiker, el problema cuántico de una partícula atrave-

sando una barrera de potencial finita, el método de diferencias finitas y la construcción de la matriz de dispersión, método que emplea la paquetería KWANT. Asimismo presentamos las expresiones para calcular las cantidades de la densidad de probabilidad como la de la densidad de corriente. En la sección de resultados presentamos las bases y la caracterización de la estructura electrónica de nuestro cristal mostrando el diagrama de fases topológicas. Posterior a ello y como parte de nuestro trabajo realizamos el análisis de transporte para un nanodispositivo de dos terminales empleando el hamiltoniano previamente mencionado. Finalmente para ahondar más dentro del comportamiento de los estados conductores de superficie de nuestro material caracterizamos estos mismos estados de borde con la adición de un agujero dentro de la nanobarra. Al término de la tesis se mencionan las conclusiones obtenidas de esta última sección.

## Marco teórico

El estudio del transporte electrónico en aislantes topológicos de orden superior conlleva el uso de varios conceptos clave para el buen entendimiento de sus propiedades electrónicas. Por ello, en este capítulo se presentan los conceptos de: hamiltoniano de amarre fuerte, la formulación de Landauer-Buttiker, el problema de una partícula atravesando una barrera de potencial finita, la matriz de dispersión y el cálculo de las cantidades de las densidades de probabilidad y corriente de la paquetería de KWANT [23], empleados en el presente estudio.

### 2.1 Hamiltoniano de amarre fuerte

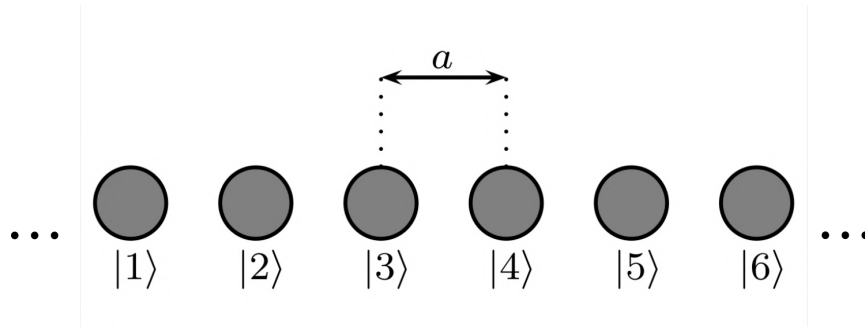
El hamiltoniano de amarre fuerte recibe su nombre debido a que en el modelo los electrones sienten una interacción fuerte con los núcleos. Este modelo es muy útil para dar un panorama general de las consideraciones empleadas dentro de nuestro análisis con el fin de describir el comportamiento electrónico de un aislante topológico de orden superior. El modelo de amarre fuerte en una dimensión para una cadena monoatómica toma en consideración un electrón interactuando con muchos núcleos. Además, se aplica la aproximación Born-Oppenheimer, es decir, los núcleos se consideran fijos con respecto al movimiento del electrón, debido a que el núcleo es aproximadamente dos mil veces más masivo que el electrón [24, 25]. Así entonces el hamiltoniano es:

$$H_{\text{elec}} = K + \sum_j V_j; \quad V_j = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{R}_j - \vec{r}|} \quad (2.1)$$

Siendo  $K = \frac{p^2}{2m}$  la energía cinética y,  $\vec{r}$  y  $\vec{R}_j$  la posición del electrón y la posición del núcleo, respectivamente.



En adición, consideramos que en la cadena monoatómica infinita donde existe un estado por sitio designado por  $n$ .



**Fig. 2.1:** Cadena monoatómica donde cada sitio corresponde a un estado designado por  $|n\rangle$  [26].

Para resolver este hamiltoniano proponemos una función de onda de prueba de la forma:

$$|\phi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle \quad (2.2)$$

Donde  $|n\rangle$  es un orbital centrado en la posición  $n$ . Por conveniencia consideramos que todos los orbitales son ortogonales.

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \quad (2.3)$$

Finalmente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo queda como:

$$\sum_m H_{n,m} \phi_m = E \phi_n \quad (2.4)$$

donde cada elemento de matriz  $H_{n,m}$  es:

$$\langle n|H|m\rangle = H_{n,m} \quad (2.5)$$

Asimismo el problema lineal a solucionar es el siguiente:

$$\begin{bmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix} H_{n,m} \begin{bmatrix} \vdots \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \\ \vdots \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \vdots \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

Una vez con todas estas definiciones, se tiene que:

$$H_{\text{elec}} |m\rangle = \underbrace{(K + V_m) |m\rangle}_{\text{hamiltoniano de orbital centrado en m}} + \sum_{j \neq m} V_j |m\rangle \quad (2.7)$$

En esto, se puede notar que aparece  $K + V_m$ , es decir el hamiltoniano que describe un electrón interactuando con un núcleo; y como estamos considerando que  $|m\rangle$  es un orbital atómico:

$$H_{\text{elec}} |m\rangle = \epsilon_{\text{atómico}} |m\rangle + \sum_{j \neq m} V_j |m\rangle \quad (2.8)$$

En función para obtener los elementos de matriz (2.5):

$$H_{n,m} = \epsilon_{\text{atómico}} \langle n|m\rangle + \sum_{j \neq m} \langle n| V_j |m\rangle \quad (2.9)$$

Este último término representa que, exceptuando el  $m$ -ésimo núcleo, un electrón en el  $m$ -ésimo átomo puede transferirse al  $n$ -ésimo átomo. Este valor es más cercano cuando  $n$  y  $m$  son iguales.

Entonces escribimos:

$$\sum_{j \neq m} \langle n| V_j |m\rangle = \begin{cases} V_0 & n = m \\ -t & n = m \pm 1 \\ 0 & \text{En otro caso} \end{cases} \quad (2.10)$$

En seguida, definimos que:

$$\epsilon_0 = \epsilon_{\text{atómico}} + V_0 \quad (2.11)$$

Con la consideración anterior (2.10) los elementos de matriz quedan:

$$H_{n,m} = \epsilon_0 \delta_{n,m} - t(\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m}) \quad (2.12)$$

La matriz  $H$  tridiagonal es:

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & & \\ & \epsilon_0 & -t & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & -t & \epsilon_0 & -t & 0 & \dots & 0 \\ & 0 & -t & \epsilon_0 & -t & \dots & 0 \\ & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ & 0 & 0 & 0 & -t & \epsilon_0 & -t \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

El teorema de Bloch nos dice que dentro de un sistema que es invariante traslacionalmente los eigenestados pueden ser expresados de la forma:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.14)$$

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.15)$$

Para darle solución a la ecuación (2.4), se propone una solución que cumpla con el antes mencionado teorema de Bloch (2.15):

$$\phi_n = b e^{-ikna}; \quad b : \text{Constante de normalización.} \quad (2.16)$$

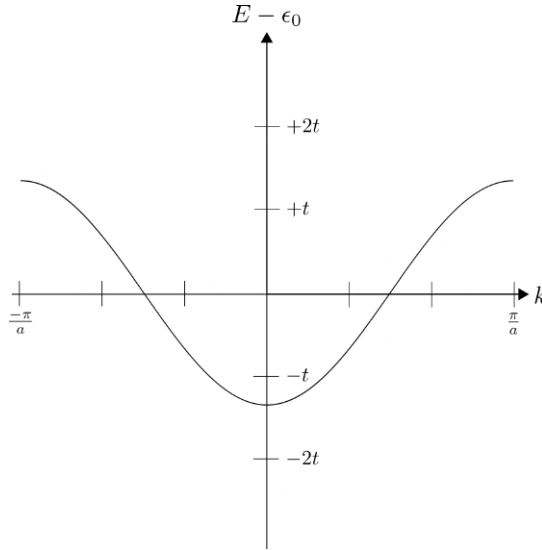
La constante  $b$  viene de normalizar los  $N$  sitios que hay en el sistema. Sustituyendo en la ecuación de Schrödinger (2.4) tenemos:

$$\begin{aligned} \sum_m H_{n,m} \phi_m &= \sum_m (\epsilon_0 \delta_{n,m} \phi_m - t \delta_{n+1,m} \phi_m - \delta_{n-1,m} \phi_m) \\ \sum_m H_{n,m} \phi_m &= \epsilon_0 \phi_n - t \phi_{n+1} - t \phi_{n-1} \\ \sum_m H_{n,m} \phi_m &= \epsilon_0 b e^{-ikna} - t (b e^{-ik(n+1)a} + b e^{-ik(n-1)a}) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Finalmente el espectro:

$$\begin{aligned}
 E\phi_n &= \epsilon_0\phi_n - t \left( e^{-ika} b e^{ikna} + e^{ika} b e^{-ikna} \right) \\
 E(k) &= \epsilon_0 - t \underbrace{(e^{-ika} + e^{ika})}_{2\cos(ka)} \\
 E(k) &= \epsilon_0 - 2t \cos(ka)
 \end{aligned}
 \tag{2.18}$$

Graficando la relación de dispersión:

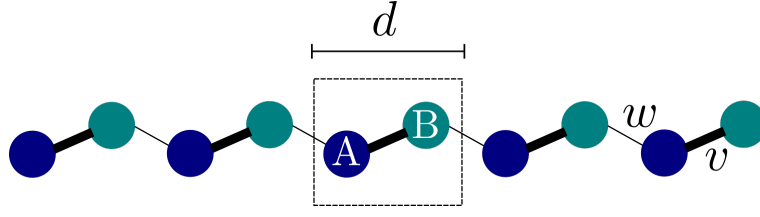


**Fig. 2.2:** Relación de dispersión para la mono-cadena de amarre fuerte. Energía en función del vector de onda  $k$  en la primera zona de Brillouin.

## Hamiltoniano SSH

Una vez resuelto el problema de una cadena monoatómica infinita es necesario conocer la manera de pasar de un hamiltoniano definido en el espacio real a un hamiltoniano en términos del momento cristalino  $\vec{k}$ . Ejemplificamos el camino a seguir con el modelo de Su-Schrieffer-Heeger [27, 28].

Para comenzar el modelo se contempla una cadena con  $N$  celdas unitarias, la celda unitaria está compuesta por dos sitios A y B, y dos hoppings  $v$  y  $w$  (véase figura 2.3). Además, este modelo hace la aproximación de solo considerar un orbital por sitio y despreciar la interacción electrónica. La dinámica



**Fig. 2.3:** Esquema de la cadena para el modelo de SSH. Línea punteada indica la celda unitaria, las líneas finas indican los hoppings intracelda, las líneas gruesas los hoppings extracelda.

de cada electrón está descrito por el hamiltoniano de una sola partícula de la forma:

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N \left( |m, B\rangle\langle m, A| + |m, A\rangle\langle m, B| \right) \quad (2.19)$$

$$+ w \sum_{m=1}^{N-1} \left( |m+1, A\rangle\langle m, B| + |m, B\rangle\langle m+1, A| \right) \quad (2.20)$$

En las ecuaciones (2.19) y (2.20) los términos  $|m, A\rangle$  y  $|m, B\rangle$  con  $m \in 1, 2, \dots, N$  denotan el estado de la cadena donde el electrón es en la celda  $m$  en el sitio de la subred A y B, respectivamente. Por simplicidad, tomaremos las amplitudes de los hoppings como reales y no negativas, es decir:  $v, w \geq 0$ . Así entonces la matriz con  $N = 3$  queda de la forma:

$$H = \begin{bmatrix} \langle 0, A|\hat{H}|0, A\rangle & \langle 0, A|\hat{H}|0, B\rangle & \langle 0, A|\hat{H}|1, A\rangle & \langle 0, A|\hat{H}|1, B\rangle & \langle 0, A|\hat{H}|2, A\rangle & \langle 0, A|\hat{H}|2, B\rangle \\ \langle 0, B|\hat{H}|0, A\rangle & \langle 0, B|\hat{H}|0, B\rangle & \langle 0, B|\hat{H}|1, A\rangle & \langle 0, B|\hat{H}|1, B\rangle & \langle 0, B|\hat{H}|2, A\rangle & \langle 0, B|\hat{H}|2, B\rangle \\ \langle 1, A|\hat{H}|0, A\rangle & \langle 1, A|\hat{H}|0, B\rangle & \langle 1, A|\hat{H}|1, A\rangle & \langle 1, A|\hat{H}|1, B\rangle & \langle 1, A|\hat{H}|2, A\rangle & \langle 1, A|\hat{H}|2, B\rangle \\ \langle 1, B|\hat{H}|0, A\rangle & \langle 1, B|\hat{H}|0, B\rangle & \langle 1, B|\hat{H}|1, A\rangle & \langle 1, B|\hat{H}|1, B\rangle & \langle 1, B|\hat{H}|2, A\rangle & \langle 1, B|\hat{H}|2, B\rangle \\ \langle 2, A|\hat{H}|0, A\rangle & \langle 2, A|\hat{H}|0, B\rangle & \langle 2, A|\hat{H}|1, A\rangle & \langle 2, A|\hat{H}|1, B\rangle & \langle 2, A|\hat{H}|2, A\rangle & \langle 2, A|\hat{H}|2, B\rangle \\ \langle 2, B|\hat{H}|0, A\rangle & \langle 2, B|\hat{H}|0, B\rangle & \langle 2, B|\hat{H}|1, A\rangle & \langle 2, B|\hat{H}|1, B\rangle & \langle 2, B|\hat{H}|2, A\rangle & \langle 2, B|\hat{H}|2, B\rangle \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

$$H = \begin{bmatrix} 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w & 0 & v \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

En el caso de un número infinito de celdas, la ecuación de Schrödinger para el modelo de SSH es de la forma:

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & & & & & & \\ & 0 & v & 0 & 0 & 0 & \\ & v & 0 & w & 0 & 0 & \\ & 0 & w & 0 & v & 0 & \\ & 0 & 0 & v & 0 & w & \\ & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v \\ & 0 & 0 & 0 & 0 & v & \\ & & & & & & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ A(k)e^{ik} \\ B(k)e^{ik} \\ A(k)e^{2ik} \\ B(k)e^{2ik} \\ A(k)e^{3ik} \\ B(k)e^{3ik} \\ \vdots \end{bmatrix} = E(k) \begin{bmatrix} \vdots \\ A(k)e^{ik} \\ B(k)e^{ik} \\ A(k)e^{2ik} \\ B(k)e^{2ik} \\ A(k)e^{3ik} \\ B(k)e^{3ik} \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

Gracias a la consecuencia del teorema de Bloch (2.15), podemos notar que los estados dentro de la ecuación de Schrödinger en el espacio real para el modelo de SSH (2.23) son los mismos con una fase distinta. Esto nos permite reescribir nuestra ecuación de Schrödinger en términos del momento  $\vec{k}$  como los estados de este sistema de la siguiente forma:

$$H(\vec{k}) = \begin{bmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

$$H(\vec{k}) \begin{bmatrix} A(k) \\ B(k) \end{bmatrix} = E(k) \begin{bmatrix} A(k) \\ B(k) \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

Con las eigenenergías asociadas para la ecuación (2.25):

$$E(k) = \pm |v + e^{-ik}w| = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k} \quad (2.26)$$

## Hamiltoniano de Schindler

Así entonces podemos plantear que nuestro hamiltoniano empleado para describir al aislante superior de orden dos, el cual se plantea a partir de conocer las conexiones dentro y fuera de nuestra celda unitaria, es decir los hoppings [15].

$$H_c(k) = \left( M + \sum_i \cos k_i \right) \tau_z \sigma_0 + \Delta_1 \sum_i \sin k_i \tau_x \sigma_i + \Delta_2 (\cos k_x - \cos k_y) \tau_y \sigma_0 \quad (2.27)$$

Con:

$$\begin{aligned}\tau_x = \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; & \tau_y = \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \\ \tau_z = \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; & \tau_0 = \sigma_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Desarrollando el hamiltoniano, multiplicando los términos de las matrices tenemos:

$$\tau_z \otimes \sigma_0 = \begin{pmatrix} \tau_z & 0 \\ 0 & \tau_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

$$\tau_x \otimes \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & \tau_x \\ \tau_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.29)$$

$$\tau_x \otimes \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\tau_x \\ i\tau_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

$$\tau_x \otimes \sigma_z = \begin{pmatrix} \tau_x & 0 \\ 0 & -\tau_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

$\tau_z \sigma_x$  se multiplica por la parte de  $\left(M + \sum_i \cos k_i\right)$ . Mientras tanto los términos de  $\tau_x \sigma_y, \tau_x \sigma_y, \tau_x \sigma_z$  se multiplican por  $\Delta_1 \sin k_x, \Delta_1 \sin k_z, \Delta_1 \sin k_z$  respec-

tivamente. Finalmente al aplicar la suma de matrices de  $4 \times 4$  obtenemos la matriz.

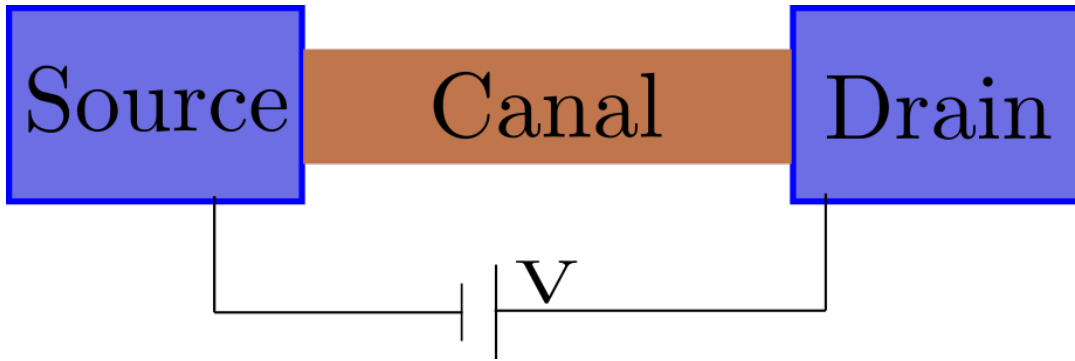
$$H(\vec{k}) = \begin{bmatrix} \left( M + t \sum_i \cos k_i \right) & \Delta_1 \sin k_z - i\Delta_2(\cos k_x - \cos k_y) \\ i\Delta_1 \sin k_z + i\Delta_2(\cos k_x - \cos k_y) & -\left( M + t \sum_i \cos k_i \right) \\ 0 & i\Delta_1 \sin k_x + \Delta_1 \sin k_y \\ \Delta_1 \sin k_x + \Delta_1 \sin k_y & 0 \\ 0 & \Delta_1 \sin k_x - i\Delta_1 \sin k_y \\ \Delta_1 \sin k_x - i\Delta_1 \sin k_y & 0 \\ -i\Delta_1 \sin k_z + \Delta_2(\cos k_x - \cos k_y) & -\left( M + \sum_i \cos k_i \right) \\ \left( M + \sum_i \cos k_i \right) & -i\Delta_1 \sin k_z - i\Delta_2(\cos k_x - \cos k_y) \end{bmatrix} \quad (2.32)$$

Es relevante contemplar la inclusión de los parámetro del hamiltoniano (2.32)  $M, t, \Delta_1$  y  $\Delta_2$ . Estos serán de suma importancia para crear o no las fases topológicas dentro de la sección de resultados. En el trabajo mapearemos este hamiltoniano a una red cúbica.

## 2.2 Transporte electrónico

El transporte electrónico es un área fundamental en el tratamiento de dispositivos electrónicos del estado sólido, que como su nombre lo indica, refiere al movimiento de los electrones. Por ende, estudiar su formalismo nos brindará una manera adecuada de comprender el comportamiento de los estados conductores de borde exóticos en nuestro presente trabajo. Para comenzar, es necesario mencionar que existen varios formalismos dentro de la física clásica que brindan una descripción adecuada a la descripción del movimiento de los electrones. Sin embargo, la electrónica propuesta dentro de nuestro trabajo involucra el uso de sistemas nanoscópicos donde la mecánica cuántica juega un papel importante. Por ello, la teoría de la conductancia de Landauer-Buttiker fue la necesaria para desempeñar un análisis adecuado. A continuación ahondaremos dentro de su formalismo. Primeramente consideraremos un sistema que consta de tres partes principales. Dos electrodos, dos contactos llamados "source" y "drain" y un con-





**Fig. 2.4:** Esquema del sistema electrónico.

ducto llamado canal, como se muestra en la figura 2.4. Estos electrodos están descritos en términos de la función de Fermi:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)/kT}} \quad (2.33)$$

Donde  $E$  es la energía,  $\mu$  el potencial químico,  $k$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura. De esta manera los electrones contenidos generarán una corriente a través del canal desde el "source" hasta el "drain", debido a la diferencia en el potencial químico. El modelo de Landauer-Buttiker hace varias consideraciones, la primera es la de tomar que el transporte electrónico que se lleva dentro del canal es coherente, es decir que los electrones dentro de él se pueden considerar como una onda. Además, los contactos llevan la función de servir como guías de onda. Por otra parte se emplea un régimen balístico, haciendo alusión a que el movimiento de los electrones dentro del canal se asemeja a trayectorias rectas [29]. Además es importante mencionar que un régimen balístico se caracteriza por poseer un tiempo de transmisión lineal, es decir:

$$\text{tiempo} \propto L \quad (2.34)$$

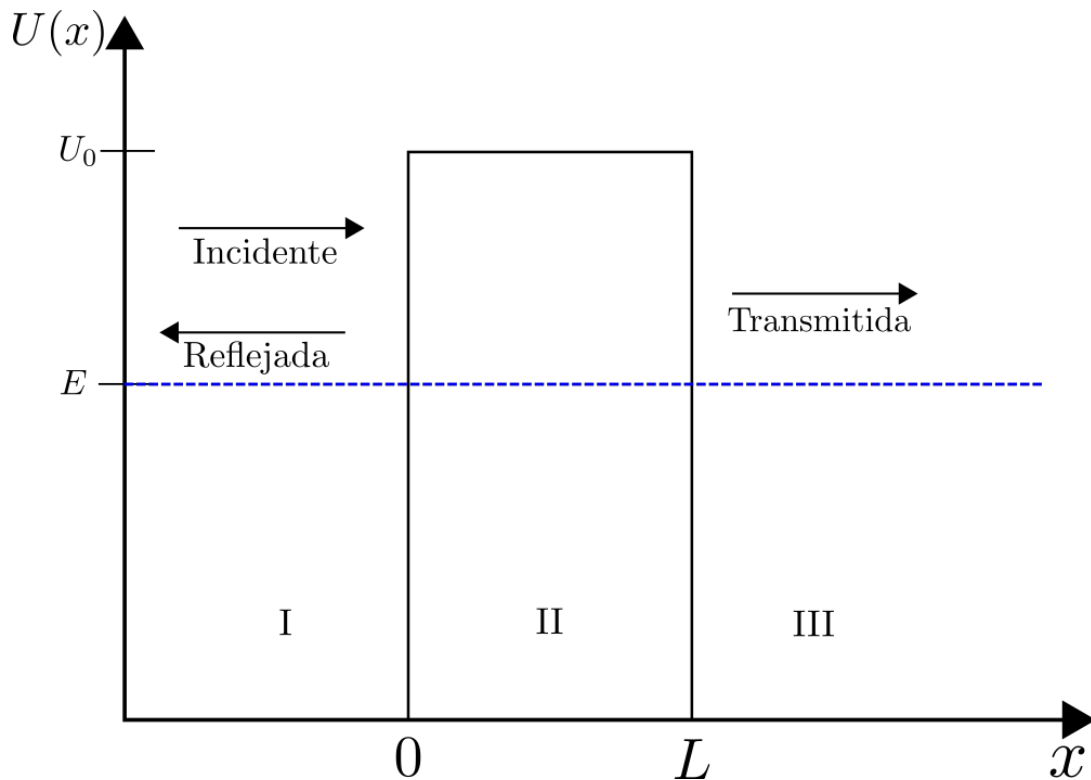
Con  $L$  como la longitud del material. Matemáticamente el desarrollo de este modelo comienza con la relación de la conductancia, la cual está definida a pequeñas diferencias de potencial (órdenes de meV) como:

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n=1}^N T_n \quad (2.35)$$

Con  $T_n$  como la probabilidad de transmisión de un electrón y  $e$  la carga fundamental. Al calcularse la conductancia gracias a la contribución de cada electrón se hace indispensable conocer la transmisión del sistema.

## 2.3 Partícula atravesando una barrera de potencial

Una buena manera de ejemplificar sencillamente el transporte electrónico dentro de un material es la de pensar en el problema de una partícula atravesando un potencial finito. El problema consta de una barrera de potencial cuadrado de altura finita definida por  $U(x)$ :



**Fig. 2.5:** Barrera de potencial de altura  $U_0$ , da origen a tres soluciones distintas. Región I con  $x < 0$  la onda incidente se propaga libremente en la dirección  $x$ , la parte reflejada de esta onda se mueve igualmente libre pero con dirección  $-x$ . Región II, la parte transmitida de la onda incidente es transmitida a través del potencial  $U(0) = U_0$ . Región III, para  $x > L$  la onda transmitida que logra atravesar la barrera de potencial se propaga en la dirección  $x$  libremente.

Suponiendo que  $L$ , el parámetro del ancho de la barrera de potencial y la altura de la misma  $U_0$  son finitas, se tiene un haz uniforme de electrones independiente del tiempo con una energía  $E$  moviéndose en la dirección  $x$ . Además, es de notarse que existen tres casos dentro de este problema. Cuando  $E > 0$ ,  $E = 0$  y cuando cumple la condición que  $E < U_0$ , siendo este último caso el más interesante desde el punto de vista que, clásicamente, la partícula no podría traspasar el potencial, sin embargo, al ser este un caso cuántico la expectativa es que exista un tunelaje [24, 30]. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este problema es la siguiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad ; \quad -\infty < x < \infty \quad (2.36)$$

En orden de responder a nuestro problema, dividiremos las soluciones de acuerdo a las regiones propuestas en la figura 2.5. Así entonces tenemos tres ecuaciones de la forma:

$\Psi_I(x)$  para la solución en la región I con  $-\infty < x < 0$ , es decir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_I(x)}{dx^2} = E\Psi_I(x) \quad ; \quad -\infty < x < 0 \quad (2.37)$$

$\Psi_{II}(x)$  para la solución en la región II con  $0 \leq x \leq L$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_{II}(x)}{dx^2} + U_0\Psi_{II}(x) = E\Psi_{II}(x) \quad ; \quad 0 \leq x \leq L \quad (2.38)$$

$\Psi_{III}(x)$  para la solución en la región III con  $L < x < \infty$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_{III}(x)}{dx^2} = E\Psi_{III}(x) \quad ; \quad L < x < \infty \quad (2.39)$$

Para proseguir con la solución de las ecuaciones es necesario hacer notar que es necesario que se cumplan las siguientes condiciones:

1.- Condición de continuidad:

$$\Psi_{\text{I}}(0) = \Psi_{\text{II}}(0) \quad (2.40)$$

$$\Psi_{\text{II}}(L) = \Psi_{\text{III}}(L) \quad (2.41)$$

2.- Condición de lisura:

$$\left. \frac{d\Psi_{\text{I}}(x)}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\Psi_{\text{II}}(x)}{dx} \right|_{x=0} \quad (2.42)$$

$$\left. \frac{d\Psi_{\text{II}}(x)}{dx} \right|_{x=L} = \left. \frac{d\Psi_{\text{III}}(x)}{dx} \right|_{x=L} \quad (2.43)$$

Al ser la ecuación de Schrödinger una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden homogénea podemos resolverla mediante el método del polinomio característico, es decir para la solución dentro de la zona (I) tenemos:

$$\frac{d^2\Psi_{\text{I}}(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi_{\text{I}}(x) \quad ; \quad -\infty < x < 0 \quad (2.44)$$

Nombramos  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ , con lo cual:

$$\frac{d^2\Psi_{\text{I}}(x)}{dx^2} = -k^2\Psi_{\text{I}}(x) \quad ; \quad -\infty < x < 0 \quad (2.45)$$

Proponiendo la solución:  $\psi_{\text{I}} = Ae^{ax}$  y sustituyendo:

$$Aa^2e^{ax} = -k^2e^{ax} \quad ; \quad -\infty < x < 0 \quad (2.46)$$

Factorizando y obteniendo el polinomio característico tenemos:

$$e^{ax}(a^2 + k^2) = 0 \quad ; \quad -\infty < x < 0 \quad (2.47)$$

Sabiendo que la función  $e^{ax}$  nunca se hace cero para argumentos reales, podemos obtener que  $a = \pm i\sqrt{k}$ . Por lo tanto, la solución general para la

ecuación diferencial de la zona I y III son una combinación lineal de la forma:

$$\Psi_{\text{I}} = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (2.48)$$

$$\Psi_{\text{III}} = \xi e^{ikx} + Fe^{-ikx} \quad (2.49)$$

Recordando que  $k = \sqrt{2mE/\hbar}$ .

Aplicando la fórmula de Euler para obtener las soluciones de una forma oscilatoria se tiene que:

$$e^{\pm ikx} = \cos(kx) \pm i \sin(kx) \quad (2.50)$$

Donde las constantes dentro de las ecuaciones (2.49) pueden ser complejas. Sin embargo, al observar el problema podemos notar que las soluciones dentro de la región I cumplen con la descripción de que existen dos ondas propagándose, una incidente en  $x$  y otra reflejada en  $-x$  (esto se puede comprobar aplicando el operador  $\hat{p}$  a la función y verificando si el valor propio es negativo o positivo) por lo que las dos constantes  $A$  y  $B$  son diferentes de cero. Con esto podemos escribir que la onda incidente es  $\Psi_{\text{incidente}}(x) = Ae^{+ikx}$  y la onda reflejada es  $\Psi_{\text{reflejada}}(x) = Be^{-ikx}$

Por lo tanto la amplitud de la onda incidente es:

$$|\Psi_{\text{incidente}}(x)|^2 = \Psi_{\text{incidente}}^*(x)\Psi_{\text{incidente}}(x) = (Ae^{+ikx})^*(Ae^{ikx}) = A^*A = |A|^2 \quad (2.51)$$

siguiendo el mismo camino podemos determinar que las amplitudes de la onda reflejada y transmitida son:  $|\Psi_{\text{reflejada}}(x)|^2 = |B|^2$  y  $|\Psi_{\text{transmitida}}(x)|^2 = |E|^2$  respectivamente. Por otro lado, en la región III observamos que solo existe una onda que se propaga en la dirección  $x$ , esto nos indica que la constante  $F = 0$ .

Con todo esto podemos saber que la transmisión de la onda está dado por estas amplitudes de la forma:

$$T(L, E) = \frac{|\Psi_{\text{transmitida}}(x)|^2}{|\Psi_{\text{incidente}}(x)|^2} = \frac{|\xi|^2}{|A|^2} \quad (2.52)$$

con  $L$  como el ancho de la barrera de potencial y  $E$  la energía total de la partícula.

Por otra parte, en la región II la solución a (2.38) se obtiene reorganizando la ecuación de Schrödinger como:

$$\frac{d^2\Psi_{II}(x)}{dx^2} = \beta^2\Psi_{II}(x) \quad ; \quad -\infty < x < 0 \quad (2.53)$$

donde  $\beta^2$  es un número real positivo debido a que  $U_0 > E$ . Así, entonces:

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) \quad (2.54)$$

La solución general a la ecuación diferencial de la región II es la siguiente:

$$\Psi_{II} = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \quad (2.55)$$

$|\xi|^2/|A|^2$

El siguiente paso será encontrar dicha expresión. Recordando las condiciones de continuidad y lisura:

1.- Condición de continuidad:

$$A + B = C + D \quad (2.56)$$

$$Ce^{\beta L} + De^{-\beta L} = \xi e^{ikL} \quad (2.57)$$

2.- Condición de lisura:

$$ik(A - B) = \beta(C - D) \quad (2.58)$$

$$C\beta e^{\beta L} - D\beta e^{-\beta L} = ik\xi e^{ikL} \quad (2.59)$$

Multiplicando  $ik((2.56)) + ((2.58))$  obtenemos:

$$2ikL = (ik + \beta)C + (ik - \beta)D \quad (2.60)$$

$$A = \frac{ik + \beta}{2ik}C + \frac{ik - \beta}{2ik}D \quad (2.61)$$

Multiplicando  $\beta((2.57)) \pm ((2.59))$  obtenemos:

$$2\beta C e^{\beta L} = (\beta + ik)\xi e^{ikL} \quad (2.62)$$

$$C = \frac{ik + \beta}{2\beta} e^{ikL - \beta L} \xi \quad (2.63)$$

$$2\beta C e^{-\beta L} = (\beta - ik)\xi e^{ikL} \quad (2.64)$$

$$D = \frac{-ik + \beta}{2\beta} e^{ikL + \beta L} \xi \quad (2.65)$$

Sustituyendo las ecuaciones ((2.63)) y ((2.65)) en ((2.61))

$$A = \frac{ik + \beta}{2ik} \left( \frac{ik + \beta}{2\beta} e^{ikL - \beta L} \xi \right) + \frac{ik - \beta}{2ik} \left( \frac{-ik + \beta}{2\beta} e^{ikL + \beta L} \xi \right) \quad (2.66)$$

Factorizando:

$$A = \left[ \frac{(\beta + ik)^2}{4ik\beta} e^{(ik - \beta)L} - \frac{(\beta - ik)^2}{4ik\beta} e^{(ik + \beta)L} \right] \xi \quad (2.67)$$

Asignando las identidades:  $\beta \pm ik = \alpha e^{\pm i\theta}$  con:  $\alpha = \sqrt{\beta^2 + k^2}$  y  $\theta = \tan^{-1}\left(\frac{k}{\beta}\right)$ :

$$A = \left[ \frac{\beta^2 + k^2}{4ik\beta} e^{(ik - \beta)L + i2\theta} - \frac{\beta^2 + k^2}{4ik\beta} e^{(ik + \beta)L - i2\theta} \right] \xi \quad (2.68)$$

Reordenando y factorizando:

$$\frac{A}{\xi} = \frac{\beta^2 + k^2}{4ik\beta} \left[ e^{-\beta L} e^{ikL + 2i\theta} - e^{\beta L} e^{ikL - 2i\theta} \right] \quad (2.69)$$

Calculando el modulo al cuadrado:

$$\begin{aligned} \frac{|A|^2}{|\xi|^2} &= \left( \frac{A}{\xi} \right) \left( \frac{A}{\xi} \right)^* \\ &= \frac{(\beta^2 + k^2)^2}{16k^2\beta^2} \left[ e^{-\beta L} e^{ikL + 2i\theta} - e^{\beta L} e^{ikL - 2i\theta} \right] \left[ e^{-\beta L} e^{-ikL - 2i\theta} - e^{\beta L} e^{-ikL + 2i\theta} \right] \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$\frac{|A|^2}{|\xi|^2} = \frac{(\beta^2 + k^2)^2}{16k^2\beta^2} \left[ e^{-2\beta L} + e^{2\beta L} - e^{4i\theta} - e^{-4i\theta} \right] \quad (2.71)$$

Convirtiendo a funciones hiperbólicas:

$$\frac{|A|^2}{|\xi|^2} = \frac{(\beta^2 + k^2)^2}{16k^2\beta^2} [2 \cosh(\beta L) - \cos(4\theta)] \quad (2.72)$$

Teniendo que:  $\cos(4\theta) = 1 - \frac{8k^2\beta^2}{(k^2+\beta^2)^2}$ :

$$\frac{|A|^2}{|\xi|^2} = \frac{1}{16k^2\beta^2} \left[ 2(k^2 + \beta^2)^2 (\cosh(2\beta L) - 1) \right] + 1 \quad (2.73)$$

La identidad  $\cosh(2\theta) - 1 = 2\sinh^2(\theta)$  nos permite:

$$\frac{|A|^2}{|\xi|^2} = \frac{1}{16k^2\beta^2} \left[ 4(k^2 + \beta^2)^2 (\sinh(\beta L))^2 \right] + 1 \quad (2.74)$$

Obteniendo el inverso:

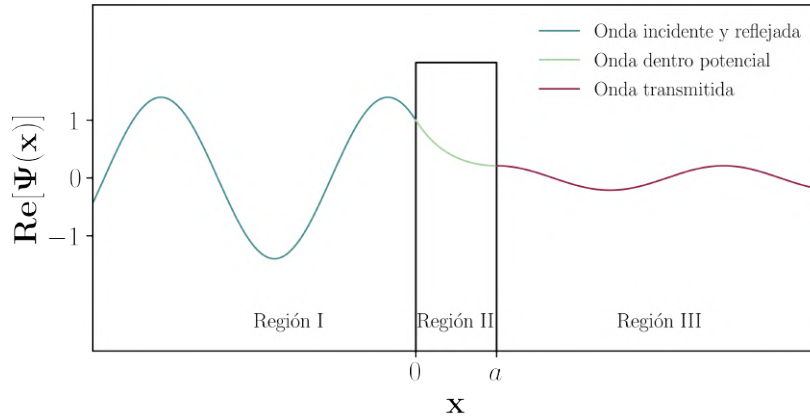
$$T(L, E) = \frac{|\xi|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \frac{(k^2+\beta^2)^2}{4k^2+\beta^2} \sinh^2(\beta L)} \quad (2.75)$$

Al tener los valores de las constantes dentro de las soluciones, podemos así graficar la parte real e imaginaria de la función de nuestro problema. Estas soluciones están representadas en la figura 2.6

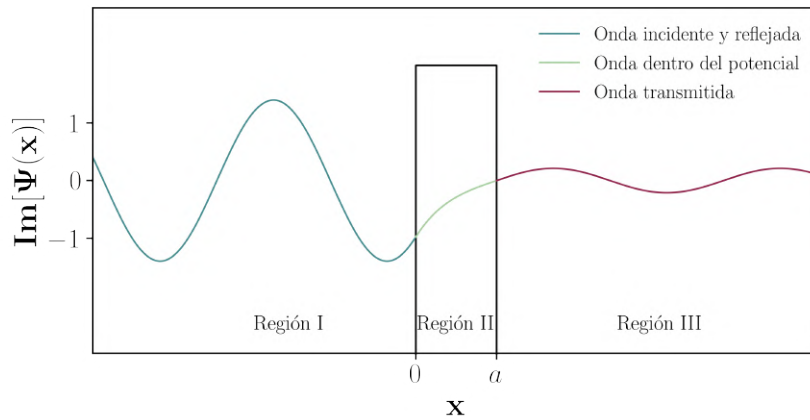
### 2.3.1 Matriz de dispersión

Una vez resuelto el problema de una partícula a través de una barrera de potencial, podemos pasar a nuestro problema central del trabajo; un aislante topológico de orden superior que funge como canal. Para resolver este problema, utilizamos la paquetería llamada KWANT [23]. Kwant hace uso de la matriz de dispersión para calcular la función de transmisión que obtuvimos en la sección anterior. Para obtener la matriz de dispersión son necesarios los siguientes pasos [31].





(a) Parte real de las eigenfunciones de onda.



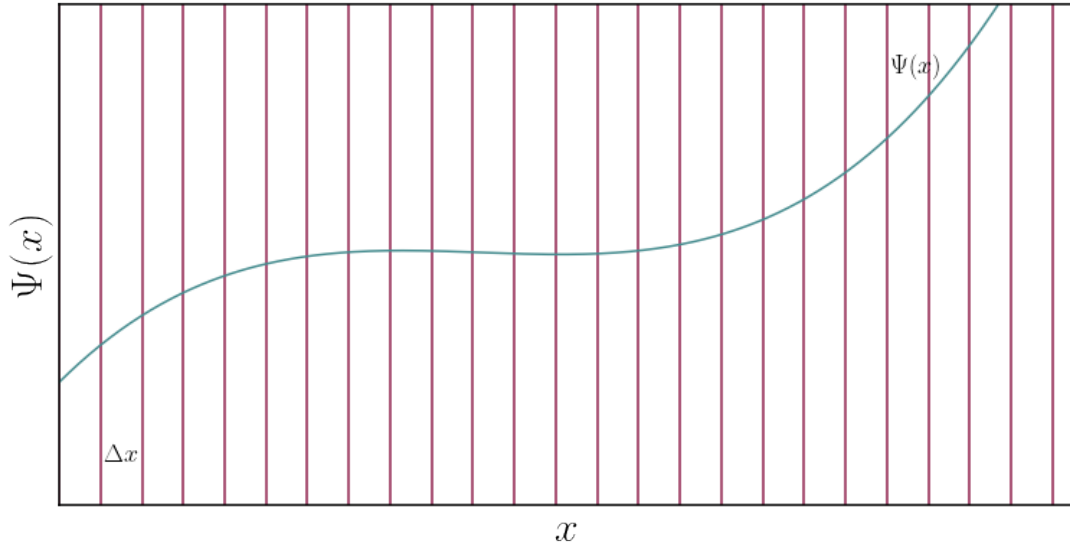
(b) Parte imaginaria de las eigenfunciones de onda.

**Fig. 2.6:** Las tres soluciones a la ecuación estacionaria de Schrödinger para el problema de una onda atravesando una barrera de potencial. Las regiones I y III poseen comportamiento oscilatorio donde la partícula se mueve libremente, además se nota una disminución de la amplitud. La región II posee una solución de tipo exponencial donde la onda se mueve a través del potencial  $U_0$ .

### Método de diferencias finitas

A partir de discretizar el espacio, la función de onda se vuelve un vector infinito, donde cada valor tiene a la función evaluada en un número  $n$  de  $\Delta x$  es decir:  $n\Delta x$ .

$$\Psi_{II} = \Psi_{II}(0), \Psi_{II}(\Delta x), \Psi_{II}(2\Delta x), \Psi_{II}(3\Delta x), \dots, \Psi_{II}(n\Delta x) \quad (2.76)$$



**Fig. 2.7:** Gráfica de Discretización de la función de onda  $\Psi(x)$  en trozos de tamaños  $\Delta x$ .

Así entonces recurrimos al método de diferencias finitas, el cual se basa en expresar las derivadas de una manera distinta como se presenta a continuación. A partir de la definición de derivada:

$$\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x_0} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Psi(x_0 + \Delta x) - \Psi(x_0)}{\Delta x} \approx \frac{\Psi(x_0 + \Delta x) - \Psi(x_0)}{\Delta x} \quad (2.77)$$

$$\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x_0} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Psi(x_0 + \Delta x/2) - \Psi(x_0 - \Delta x/2)}{\Delta x} \approx \frac{\Psi(x_0 + \Delta x/2) - \Psi(x_0 - \Delta x/2)}{\Delta x} \quad (2.78)$$

Aplicamos el mismo procedimiento para la segunda derivada:

$$\left. \frac{d^2\Psi}{dx^2} \right|_{x_0} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x_0 + \Delta x/2} - \left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x_0 - \Delta x/2}}{\Delta x} \quad (2.79)$$

$$\left. \frac{d^2\Psi}{dx^2} \right|_{x_0} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\frac{\Psi(x_0 + \Delta x/2 + \Delta x/2) - \Psi(x_0 - \Delta x/2 + \Delta x/2)}{\Delta x} - \frac{\Psi(x_0 + \Delta x/2 - \Delta x/2) - \Psi(x_0 - \Delta x/2 - \Delta x/2)}{\Delta x}}{\Delta x} \quad (2.80)$$

$$\left. \frac{d\Psi}{dx} \right|_{x_0} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Psi(x_0 + \Delta x) - 2\Psi(x_0) + \Psi(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \approx \frac{\Psi(x_0 + \Delta x) - 2\Psi(x_0) + \Psi(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \quad (2.81)$$

Una vez con esta última expresión es posible reescribir nuestro problema en términos lineales, es decir, pasar de una ecuación diferencial ( $\hat{H}\Psi = E\Psi$ ) a un sistema lineal ( $\mathcal{H}\vec{\Psi} = E\vec{\Psi}$ ) convirtiendo así el operador diferencial  $\hat{H}$  a una matriz  $\mathcal{H}$ . Sustituyendo la expresión de la segunda derivada en la ecuación de Schrödinger a través del siguiente desarrollo:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Psi_{II}''(x) + V_n(x) \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II} \quad (2.82)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\Psi_{II}(x+h) - 2\Psi_{II}(x) + \Psi_{II}(x-h)}{h^2} \right] + V_n(x) \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II} \quad (2.83)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2} [\Psi_{II}(x+h) - 2\Psi_{II}(x) + \Psi_{II}(x-h)] + V_n(x) \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II} \quad (2.84)$$

Para simplificar la notación introducimos:  $\Psi_{II}^n = \Psi_{II}(x+n\Delta x)$  con  $n = 0, 1, 2, 3, \dots, N$ . Teniendo entonces con la nueva notación:

$$\frac{-\hbar^2}{2m\Delta x^2} [\Psi_{II}^{n+1} - 2\Psi_{II}^n + \Psi_{II}^{n-1}] + V_n \Psi_{II}^n = E \Psi_{II}^n$$

Tomando en cuenta  $t = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$  como el parámetro energético y de salto. Debido a las condiciones de frontera vistas en la sección anterior tenemos una superposición de ondas planas en los contactos.

- Para  $n \leq 0$ :

$$\Psi_{II}^n = e^{ikn} + r e^{-ikn}$$

- Para  $n > L$ :

$$\Psi_{II}^n = t e^{ikn}$$

Ahora podemos escribir las funciones de onda para cada parte de la interfase del electrodo central.

$$n = 0 \quad r e^{-ik} \quad (2.85)$$

$$n = 1 \quad r + (E - V_1)\Psi_{II}^1 + \Psi_{II}^2 = -t \quad (2.86)$$

⋮

$$n = N \quad \Psi_{II}^{N-1} + (E - V_N)\Psi_{II}^N + t e^{ik(N+1)} = 0 \quad (2.87)$$

$$n = N + 1 \quad \Psi_{II}^N - r e^{ikN} = 0 \quad (2.88)$$

El sistema se vuelve una matriz tridiagonal de la forma:

$$\begin{bmatrix} e^{ik} & -t & 0 & \dots & \dots & \dots \\ t & E - V_1 & t & 0 & \dots & \dots \\ 0 & t & E - V_2 & t & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & t & E - V_N & e^{ik(N+1)} \\ \dots & \dots & \dots & 0 & t & -e^{ikN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ \Psi_{II}^1 \\ \Psi_{II}^2 \\ \dots \\ \Psi_{II}^N \\ t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -e^{ik} \\ -t \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.89)$$

Con las amplitudes  $r$  y  $t$  se etiquetan de la forma:  $r_f$  y  $t_f$  respectivamente para hacer alusión a las amplitudes de la onda reflejada y transmitida de una onda que se propaga de la dirección izquierda a derecha. Haciendo el mismo tratamiento se pueden calcular las amplitudes de una onda que se propaga de derecha a izquierda, teniendo así las amplitudes  $r'_f$  y  $t'_r$ . Finalmente esta expresión puede ser computada para calcular la matriz de dispersión de la forma:

$$s = \begin{bmatrix} r_f & t_r \\ t'_r & r'_f \end{bmatrix} \quad (2.90)$$

### 2.3.2 Densidades locales y densidad de corriente

Dentro de la documentación de la paquetería de KWANT [23] encontramos el cálculo de cantidades relevantes dentro del estudio de sistemas cristalinos, como lo son las densidades de probabilidad y las densidades de corriente.

## Densidades locales

Para calcular las densidades de probabilidad locales dentro de nuestro sistema, la paquetería KWANT utiliza un operador llamado densidad, definido como:

$$\rho_i = \psi_i^\dagger \mathbf{M} \psi_i \quad (2.91)$$

donde  $\mathbf{M}$  es una matriz que define opcionalmente la cantidad que deseamos calcular por cada sitio. Por otro lado,  $i$  indica un sitio en nuestro sistema y  $\psi_i$  es un vector consistente de los componentes de la función de onda.

## Densidades de corriente

Similar al caso mencionado anteriormente, para calcular las densidades de corriente de nuestro sistema es necesario utilizar la matriz  $\mathbf{M}$

$$J_{ab} = i \left( \psi_b^\dagger (H_{ab})^\dagger \mathbf{M} \psi_a - \psi_a^\dagger \mathbf{M} (H_{ab}) \psi_b \right) \quad (2.92)$$

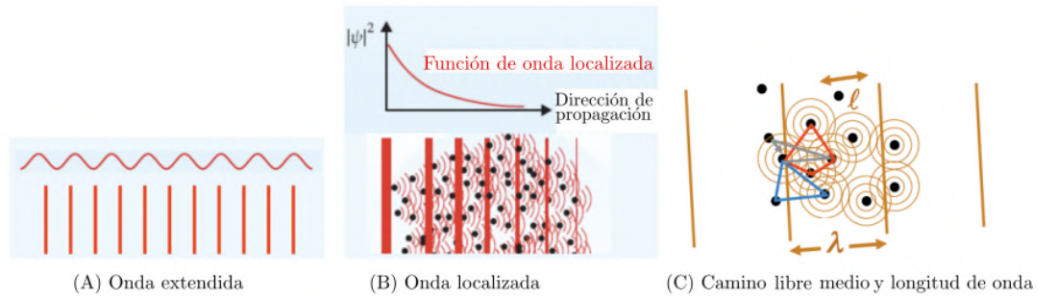
donde la matriz  $H_{ab}$  es la matriz de hopping entre el sitio  $a$  y  $b$ .

## 2.4 Desorden tipo Anderson

Con el fin de observar la robustez de los estados de arista dentro de nuestro material y por consiguiente comprobar una de las propiedades brindadas de la topología, introducimos un desorden dentro del sistema.

Los sistemas ordenados, gracias a su simetría y a su regularidad pueden ser estudiados matemáticamente desde diferentes acercamientos. Sin embargo, cuando existen impurezas, defectos y/o deslocalizaciones dentro de un material presenta una tarea compleja de abordar. Como vimos anteriormente en un cristal infinito, poseemos simetría traslacional donde las funciones de onda están descritas por funciones de Bloch. La adición de impurezas resulta en una corrección perturbativa a la conductancia dentro del material. Conforme el desorden sea mayor dentro del sistema la condición de periodicidad se va rompiendo. Esto conlleva a que la propagación

de los electrones es completamente cancelada y su función de onda empieza a ser exponencialmente localizada en el espacio. Esta localización espacial es llamada la localización de Anderson y es debida a la dispersión que existe dentro del material [32]. Considerando una onda plana Figura 2.8, el fenómeno de interferencia entre las ondas generadas por su dispersión es producida dentro de una cierta región, donde la amplitud de onda decrece exponencialmente.



**Fig. 2.8:** (A) Una onda extendida en un espacio libre y (B) una onda localizada en un desorden medio. (C) Definición de camino libre medio. (Imagen tomada de la referencia [33]).

El camino libre medio está definido como la distancia media que un partícula debe llevar para tener una colisión (dispersión) Figura 2.8. El fenómeno de que la conductancia disminuye debido a las impurezas aparece siempre y cuando la longitud de onda los electrones es menor que el camino libre medio [33].



## Descripción del trabajo

### 3.1 Objetivo general

Caracterizar las propiedades electrónicas de un aislante topológico de orden dos haciendo uso de un hamiltoniano de amarre fuerte empleando códigos propios en el lenguaje de programación de Python y las paquetería PythTB. Posteriormente, simular el transporte electrónico de un dispositivo electrónico de nanobarra con un aislante superior de orden dos funcionando como canal de transporte y dos contactos perpendiculares al eje Z. Calcular la conductancia y observar las diferentes fases electrónicas mediante el uso de la paquetería de Python KWANT [23] y su variación ante desorden de tipo Anderson. Finalmente simular un agujero al centro de la nanobarra para comparar los resultados de conductancia y bandas electrónicas al dispositivo sin agujero con el fin de encontrar posibles mejoras de transporte electrónico.

La principal motivación del trabajo es que debido a la tendencia de la miniaturización de los transistores para la creación de nuevas tecnologías en las últimas décadas es de relevancia explorar las propiedades electrónicas de estos nuevos materiales para dar pie a futuras implementaciones en el área de la nanoelectrónica.





## Resultados

### 4.1 HOTI

Los aislantes topológicos de orden superior son nuevas fases de la materia en el área de la física de la materia condensada, por ello, hemos estudiado el material de un aislante superior de orden dos (SOTI, por sus siglas en inglés), es decir, un aislante tridimensional con estados de borde en las aristas. Iniciamos con el análisis de la estructura electrónica del material y después caracterizamos el transporte electrónico en una nanobarra.

#### 4.1.1 Celda unitaria

Primeramente es necesario conocer la estructura cristalina de nuestro sistema; para ello, construimos una red cúbica en el espacio real del hamiltoniano de Bloch del SOTI (figura 4.1b). En esta red, los puntos infinitos se escriben a partir de:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3; \quad n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z} \quad (4.1)$$

Con  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  y  $\vec{a}_3$  como los vectores base de nuestra red real. Para nuestro caso, una red cúbica simple los vectores base se escriben como:

$$\vec{a}_1[\mathbf{a}] = (1, 0, 0) \quad \vec{a}_2[\mathbf{a}] = (0, 1, 0) \quad \vec{a}_3[\mathbf{a}] = (0, 0, 1) \quad (4.2)$$

Una vez definida nuestra red, determinamos la celda unitaria asociada a ella. En la figura 4.1a se presenta una representación de la celda unitaria, donde los puntos rojos demarcan los puntos de nuestra red  $\vec{R}$ . Por otro lado las esferas de color gris indican el decorado dentro de nuestra celda unitaria.

Las coordenadas espaciales de nuestro decorado son las siguientes:

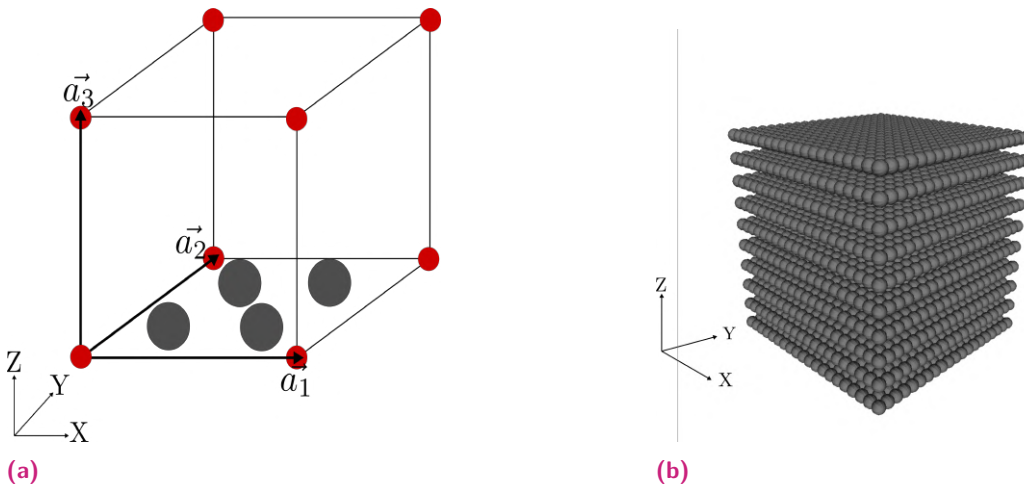
$$A = 0.25 \vec{a}_1 + 0.25 \vec{a}_2 + 0.0 \vec{a}_3 \quad (4.3)$$

$$B = 0.25 \vec{a}_1 + 0.75 \vec{a}_2 + 0.0 \vec{a}_3 \quad (4.4)$$

$$C = 0.75 \vec{a}_1 + 0.25 \vec{a}_2 + 0.0 \vec{a}_3 \quad (4.5)$$

$$D = 0.75 \vec{a}_1 + 0.75 \vec{a}_2 + 0.0 \vec{a}_3 \quad (4.6)$$

Una vez demarcado estos puntos, mediante la repetición de nuestra celda unitaria, podemos recrear un nanocristal. La figura 4.1b muestra la repetición de la celda unitaria diez veces en las direcciones X, Y y Z, provocando el origen del bulto de nuestro cristal. Por otro lado y para un estudio más



**Fig. 4.1:** (a) en el espacio real. Puntos de color rojo indican los puntos de la red  $\vec{R}$ . (b) Repetición de la celda unitaria diez veces en las tres direcciones X, Y y Z.

práctico, fue necesario definir nuestro material en el espacio recíproco. Esta nueva red es formada a partir de la red real con la relación siguiente: sea una red  $\vec{R}$ , su red recíproca  $\vec{G}$  cumple la relación:

$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1 \quad (4.7)$$

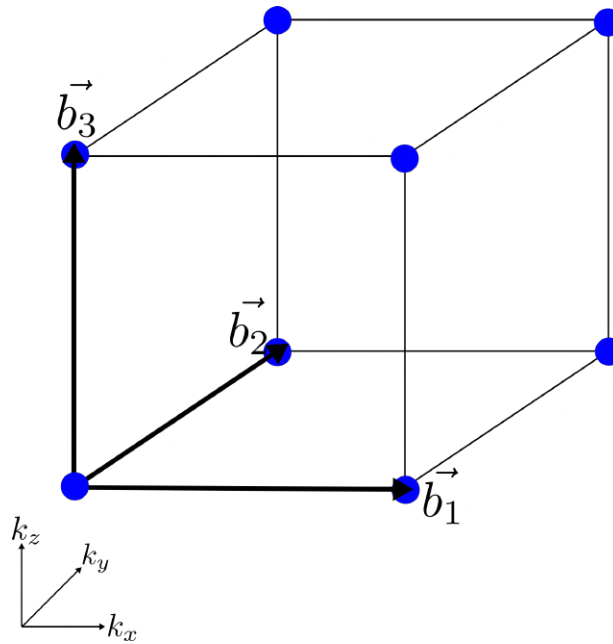
Por consiguiente, la red recíproca se expresa como:

$$\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3; \quad m_1, m_2, m_3 \in \mathbb{Z} \quad (4.8)$$

En el caso particular de una red de tres dimensiones en el espacio recíproco  $\vec{G}$ , cada vector base está definido como:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}; \quad \text{con : } i, j = 1, 2, 3 \quad (4.9)$$

Esta nueva red recíproca presenta las mismas dimensiones que la red real pero con dimensiones de  $\text{longitud}^{-1}$ . Esto nos permite analizar un sistema periódico, como es nuestro caso, mediante la resolución de un hamiltoniano dependiente de  $\vec{k}$ , es decir  $H(k_x, k_y, k_z)$ . Como consecuencia del teorema de Bloch, esto posibilita que nuestro problema de resolver una red gigantesca en el espacio real se reduzca a un problema de eigenvalores en la celda unitaria periódica en el espacio recíproco [34]. La imagen 4.2 nos muestra la primera zona de Brillouin en donde se definen los puntos de alta simetría del sistema.



**Fig. 4.2:** Red en el espacio recíproco  $\vec{G}$ . Puntos azules representan los puntos de la red recíproca.

## 4.1.2 Hamiltoniano

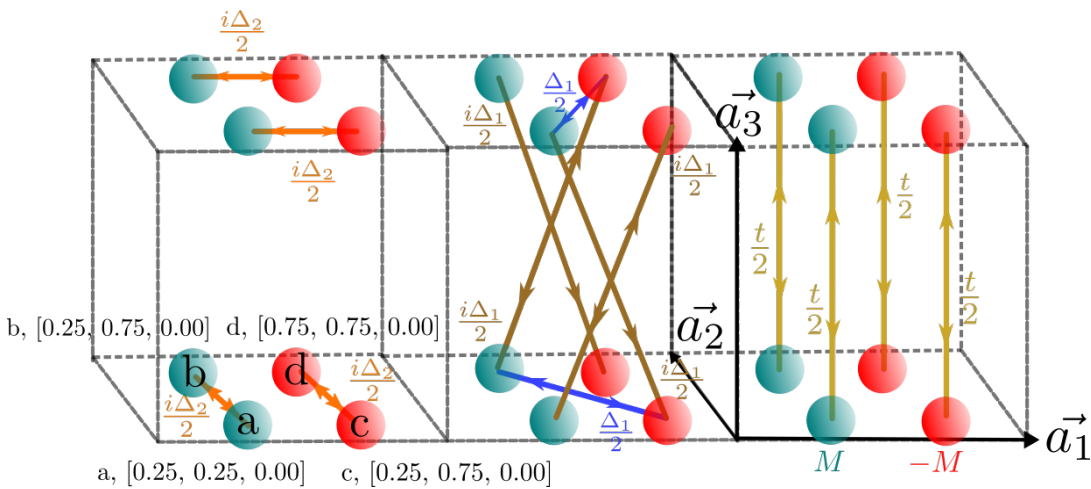
Empleamos como modelo el hamiltoniano de amarre fuerte (ecuación 2.27 [15]), este hamiltoniano describe un aislante topológico de orden dos en función de los puntos  $\vec{k}$  (espacio recíproco), haciendo uso del teorema de Bloch. El hamiltoniano cuenta con una simetría  $C_4^z T$ . Así pues, la simetría  $C_4^z$  refiere a que nuestro sistema tiene una invarianza rotacional cada  $90^\circ$  con respecto al eje Z. En cambio, la simetría de reversión temporal indica que el sistema posee una simetría en la cual el sistema tiene una invarianza independientemente del sentido del tiempo. Donde  $\sigma_i$  y  $\tau_i$  (con  $i = x, y, z$ ) son las tres matrices de Pauli y  $\Delta_2$  es el parámetro que habilita o no las simetrías del hamiltoniano.

$$H_4(k) = \left( M + \sum_i \cos k_i \right) \tau_z \sigma_0 + \Delta_1 \sum_i \sin k_i \tau_x \sigma_i + \Delta_2 (\cos k_x - \cos k_y) \tau_y \sigma_0$$

Con :  $M, t \in \mathbb{R}$  y  $\Delta_1, \Delta_2 \in \mathbb{R}$

(4.10)

Además, el hamiltoniano consta con los parámetros reales  $M, t$  y parámetros  $\Delta_1$  y  $\Delta_2$  asociados a las conexiones (hoppings) y las posiciones de los motivos (onsite). En particular,  $M$  representa el término en la diagonal, es

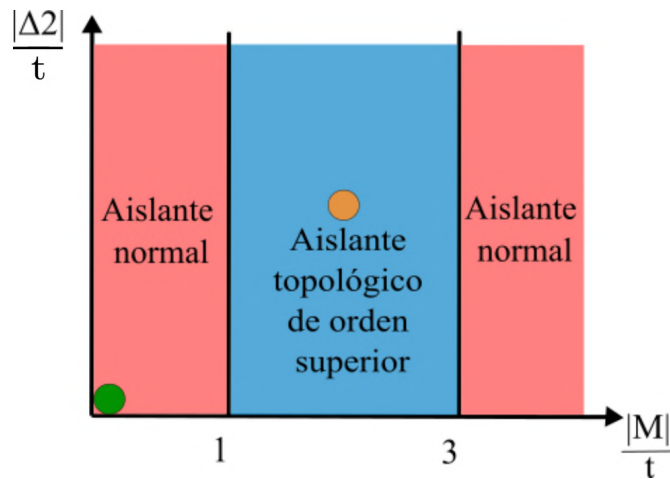


**Fig. 4.3:** Representación gráfica de los parámetros del hamiltoniano. La celda unitaria se encuentra marcada con línea rayada y los vectores de la red representados con  $\vec{a}_1, \vec{a}_2$  y  $\vec{a}_3$ . Parámetro  $M$  asociado a los átomos. Parámetros  $\Delta_2$  asociado con términos intracelda. Parámetro  $\Delta_1$  asociado con términos extracelda e intracelda. Parámetro  $t$  relacionado con términos extracelda.

decir, los átomos dentro de nuestra celda unitaria.  $t$ ,  $\Delta_1$  y  $\Delta_2$  representan los términos fuera de la diagonal (hoppings), que constituyen las conexiones entre nuestros átomos. Dentro de estos hoppings,  $\Delta_2$  figura los término intracelda, mientras  $\Delta_1$  y  $\Delta_2$  los términos extracelda. Es de relevancia señalar que estos parámetros están asociados de igual manera con la contribución del acoplamiento espín-órbita. La figura 4.3 nos muestra un esquema de los parámetros dentro de nuestra celda unitaria. Es de relevancia remarcar que la dirección brindará el signo positivo o negativo del valor del hopping.

### 4.1.3 Espacio de fases topológicas

Al ser nuestro modelo, un hamiltoniano de amarre fuerte, la variación de los parámetros del hamiltoniano juega un rol importante en la creación de la fase topológica. En el artículo de Schindler et al. [15] se menciona la creación de este espacio fase gracias al invariante topológico asociado. Concretamente,  $\frac{|M|}{t}$  permite la aparición de las fases de aislante convencional o de aislante topológico de orden dos, mientras que  $\Delta_2$  crea tanto la simetría traslacional ( $C_4^z$ ) como la simetría de reversión temporal ( $T$ ). Valores medios entre el rango de valores de  $1 < M/t < 3$  y valores de  $\Delta_2 > 0$  permiten la fase de aislante topológico de orden superior, mientras que otros crean la fase de aislante trivial o normal. Por esta razón, y a partir de ahora haremos uso de un valor de  $\frac{M}{t} = 2$  y de  $\Delta_2 = 2$  para ejemplificar la fase reportada de aislante topológico de orden dos. Por otro lado, usaremos  $\frac{M}{t} = 0$  y de  $\frac{t}{\Delta_2=0}$  para mencionar la fase de aislante trivial (ver figura 4.4).



**Fig. 4.4:** Espacio fase Figura 4.10. Círculo de color naranja indica la combinación de parámetros tomados en la fase de aislante topológico de orden dos. Círculo de color verde indica la combinación de parámetros tomados en la fase de aislante normal.

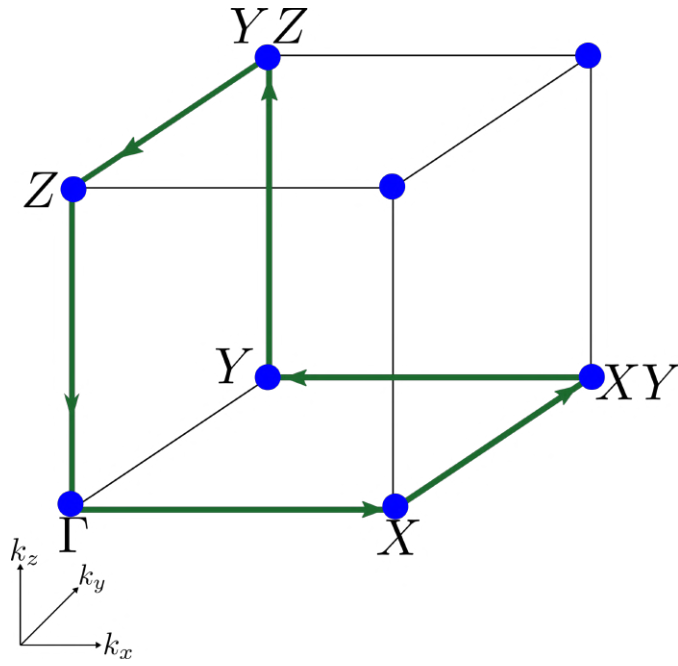
#### 4.1.4 Bulto

El bulto de un material es la parte interior de este y donde no existen fronteras. Por consiguiente, esperamos que las bandas de nuestro material, independientemente de la fase del hamiltoniano, no presenten estados conductores [34]. Para verificar este hecho, tomamos puntos de la red recíproca  $\vec{G}$  que forman un recorrido a través de los puntos de alta simetría dentro de la celda unitaria del espacio recíproco, figura 4.5.

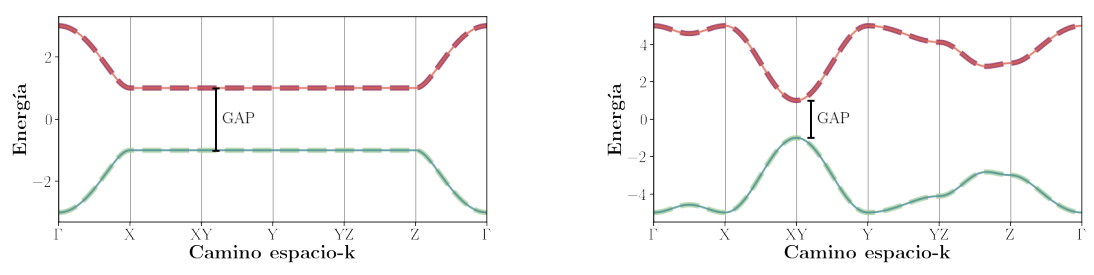
El primer paso fue obtener las eigenenergías; debido a que el bulto de nuestro material está descrito por el hamiltoniano (4.10), fue resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y obtener los eigenvalores de nuestro hamiltoniano (2.27) mediante la diagonalización de la matriz (2.32). La energía de Fermi está en  $E = 0.0[t]$

Este proceso se realizó con un código propio en el lenguaje de programación de Python y la paquetería PythTB [35]. La gráfica de las eigenenergías en función de los valores de  $k$  del recorrido por el espacio recíproco, mostrada en la figura 4.5, fue la siguiente:

Tanto en la figura 4.6a y la figura 4.6b observamos dos estados, los cuales están degenerados, provocando que existan en total cuatro estados. Estos



**Fig. 4.5:** Representación del recorrido en  $k$  mostrado en verde, en el espacio recíproco. Puntos de alta simetría marcados con puntos azules.



**(a)** Parámetros;  $\Delta_2 = 0.0$ ,  $\frac{M}{t} = 0.0$ .

**(b)** Parámetros:  $\Delta_2 = 2.0$ ,  $\frac{M}{t} = 2.0$ .

**Fig. 4.6:** Recorrido en puntos de alta simetría en el espacio recíproco en función de la energía. Cada línea de color rojo, negro, verde y amarillo representa un orbital dentro de nuestra celda unitaria (ver figura 4.1a).

estados cuánticos, están directamente relacionados con los cuatro motivos dentro de nuestro hamiltoniano, debido a que estamos considerando un orbital por sitio.

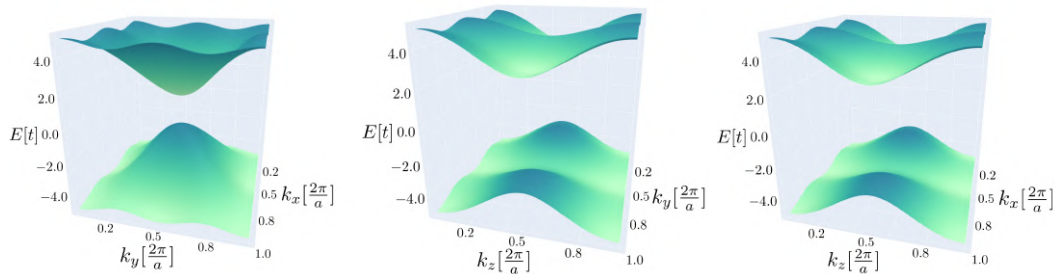
Por otro lado, y como mencionamos en la sección 4.1.3 empleamos dos combinaciones de parámetros para representar las fases que presenta nuestro hamiltoniano. La gráfica de la energía en función del recorrido realizado a través de los puntos de alta simetría en  $\vec{k}$ , nos confirma que para ambas



variaciones de parámetros se obtiene un brecha energética y por lo tanto dos aislantes. Esto, debido principalmente a que no existe ningún estado cruzando la energía de Fermi. Además, es de resaltar que en nuestro modelo consideramos  $E_F = 0.0[t]$  conveniente ya que nuestro estudio está enfocado en el transporte electrónico.

Para seguir confirmando el supuesto de que nuestro bulto es un aislante y con el objetivo de abarcar más puntos  $\vec{k}$  dentro de nuestra celda unitaria en el espacio recíproco, proseguimos a graficar las superficies de las mallas creadas mediante los tres vectores de momento: en concreto las mallas:  $\{(k_x, k_y)\}$ ,  $\{(k_y, k_z)\}$  y  $\{(k_z, k_x)\}$ . Una vez obtenidas estas mallas, proseguimos con la resolución de la ecuación de Schrödinger con nuestro hamiltoniano (4.10) y así obtener las eigenenergías.

Al igual que en la resolución de nuestro hamiltoniano con los puntos  $\vec{k}$



(a) Superficie de la malla  $\{(k_x, k_y)\}$  con un  $k_z = 1.0$ . (b) Superficie de la malla  $\{(k_y, k_z)\}$  con un  $k_x = 1.0$ . (c) Superficie de la malla  $\{(k_x, k_z)\}$  con un  $k_y = 1.0$ .

**Fig. 4.7:** Superficies formadas por las distintas mallas de  $k$  en función de la energía, parámetros:  $M = 2.0$ ,  $t = 1.0$ ,  $\Delta_1 = 1.0$  y  $\Delta = 2.0$ .

de alta simetría, la fase esperada de nuestro material es la de un aislante topológico de orden dos, por ello, obtuvimos las eigenenergías con los parámetros señalados en la figura 4.7. Esta figura, ilustra que en ninguna de las superficies graficadas se encuentran estados donde se cruce la energía de Fermi ( $E = 0.0[t]$ ), por lo cual y hasta ahora, con los puntos graficados del espacio recíproco, se puede concluir que nuestro material es un aislante trivial en su bulto.

## 4.1.5 Densidad de estados

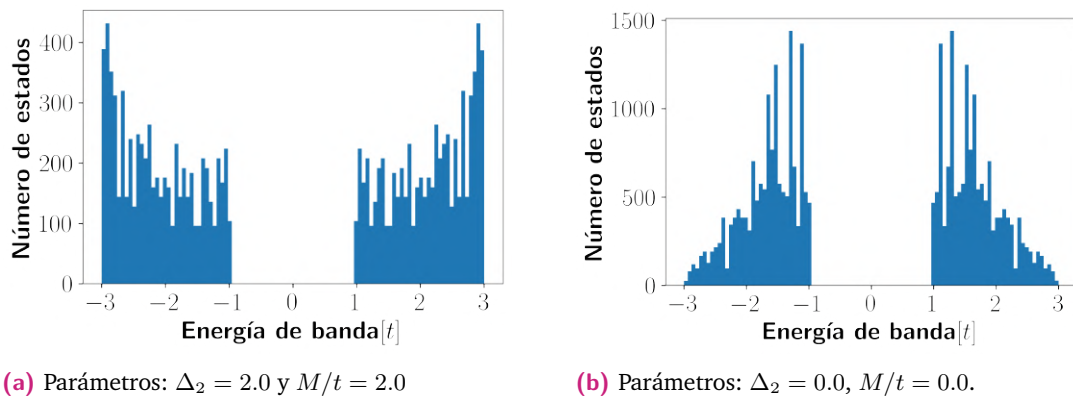
Siguiendo nuestra hipótesis de que el bulto es un aislante, realizamos un análisis complementario para verificar este hecho. La densidad de estados (DOS, por sus siglas en inglés) clasifica todos los estados cuánticos posibles de nuestro hamiltoniano (2.1) de acuerdo a su energía. Matemáticamente la densidad de estados está definida como:

$$D(E) = \sum_{ij} D_{ij}(E) \quad (4.11)$$

$$D_{ij}(E) = \frac{dN_{ij}}{d\vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dE} \quad (4.12)$$

con  $N_{ij}$  como el número de estados y  $\vec{k}$  vector de onda. La resolución de la ecuación de Schrödinger con nuestro hamiltoniano, nos permitió encontrar los eigenvalores y encontrar el número de estados por energía. Este cálculo lo realizamos con un código propio de pythtb [35].

El resultado de este cálculo queda mostrado en la figura 4.8. Esta, nos dic-



**Fig. 4.8:** Número de estados en función de la energía para el bulto de nuestro material.

ta que no existe ningún estado a la energía cero (Energía de Fermi), por lo cual, se puede concluir que el bulto de nuestro material, independientemente de la fase empleada, es un aislante trivial.

### 4.1.6 Monocristal

Posterior al estudio del bulto de nuestro material, se decidió explorar el mismo SOTI pero ahora con un sistema finito, es decir, creando bordes en el material. Para lograr esto, realizamos dos cortes al sistema de tres dimensiones en las direcciones de  $X$  y de  $Y$ . Para lograr esto, fue necesario crear fronteras en el sistema real haciendo finito el sistema en dos direcciones, volviendo así nuestro sistema un monocristal con repetición en el eje  $Z$ . Una vez rota esta simetría traslacional que existía en las tres direcciones, el espacio real  $\vec{R}$  se escribe como:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1; \quad n_1 \in \mathbb{Z} \quad (4.13)$$

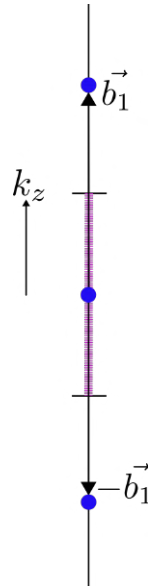
Debido a que conocemos que la red  $\vec{R}$  está definida como  $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1$ , podemos proponer que la red  $\vec{G}$  se componga de un vector base  $b_1$  y que este vector cumpla con la condición (4.9). Por lo tanto y suponiendo que los puntos en el espacio recíproco se definen como  $\vec{G} = m_1 \vec{b}_1$ , aplicamos la definición (4.7) para comprobar su veracidad:

$$e^{i\vec{R}\cdot\vec{G}} = e^{i(n_1 \vec{a}_1)\cdot(m_1 \vec{b}_1)} = e^{2\pi i(n_1 m_1)} \quad (4.14)$$

Es decir, la única manera en la que se cumpla esta igualdad es cuando  $m_1$  es un entero, por lo cual la red  $\vec{G}$  cumple con nuestras definiciones. Es decir su espacio recíproco asociado se vuelve en una red unidimensional de la forma:

$$\vec{G} = m_1 \vec{b}_1; \quad m_1 \in \mathbb{Z} \quad (4.15)$$

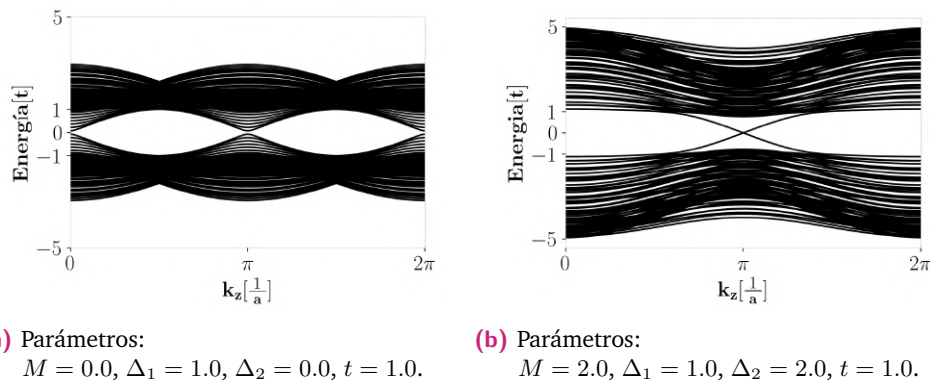
Al estar formada la red  $\vec{G}$  solamente por el vector base  $\vec{b}_1$ , la zona de Brillouin para esta nueva red son los puntos inmersos entre la mitad del vector  $\vec{b}_1$  y la mitad del vector  $-\vec{b}_1$ . Así, entonces la zona de Brillouin y la representación gráfica del espacio recíproco para nuestro monocristal están mostradas en la figura 4.9. Una vez este tratamiento, nuestro sistema real depende únicamente de valores de  $k_z$ . Entonces, para obtener los eigenvalores asociados a nuestro sistema, debemos resolver de nueva cuenta la ecuación de independiente del tiempo Schrödinger tomando como puntos la zona de Brillouin de  $\vec{G}$  asociada para la repetición unidireccional de cien veces la celda unitaria del espacio real en la dirección  $Z$ . Una vez esto, prosegui-



**Fig. 4.9:** Espacio recíproco asociado para el monocristal. Los puntos de la red están indicados por círculos azules. Zona de Brillouin señalada con franjas rosas.

mos con la diagonalización del hamiltoniano con la ayuda códigos propios de Python y la paquetería de KWANT [36]

La figura 4.10, muestra muchos estados; para ser precisos existen cien re-



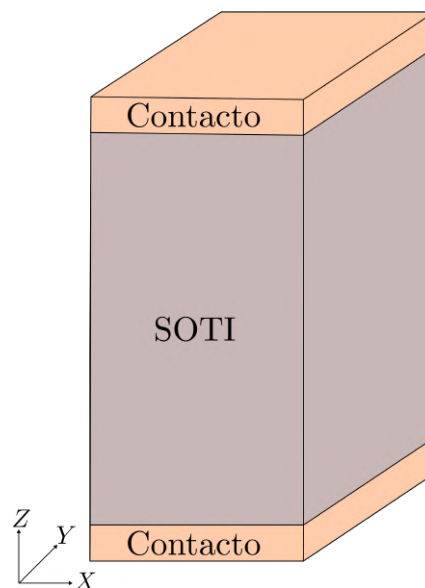
**Fig. 4.10:** Relación de dispersión para las dos fases permitidas en nuestro hamiltoniano para un sistema de nanobarra con simetría traslacional hacia el eje Z. Finito en los ejes X y Y; tamaño de  $(10 \times 10)a$ , con  $a =$  constante de red.

peticiones de la celda unitaria, debido a que existen cuatro átomos o motivos por celda unitaria, nuestra gráfica presenta cuatrocientos estados. Para la primera figura 4.10a observamos que no existen estados que crucen a través de la energía de Fermi, es decir, se tiene un aislante trivial en el monocristal, pese a la imposición de la frontera en el material. Esto, se debe

principalmente al rompimiento de las simetrías de  $C_4^zT$ , es decir, diferentes valores para el parámetro  $\Delta_2$ . En cambio, la figura 4.10b, presenta estados que cruzan la energía cero, provocando la existencia de estados conductores, correspondiente principalmente a la adición de las fronteras en nuestro material, lo que nos dice que se exhiben fases topológicas para esta fase en este sistema. Estos estados cruzan desde la banda de valencia hasta la banda de conducción de abajo hacia arriba y de arriba hacia abajo, es decir el material posee quiralidad en sus estados topológicos. Esto se comprueba gracias a la pendiente que presentan los mismos. Agregando a este último punto; sea  $m$  la pendiente a los estados, para  $m > 0$  tenemos que los estados conductores transitan de abajo hacia arriba. En el caso contrario, es decir  $m < 0$  el estado cruzaría de arriba hacia abajo.

#### 4.1.7 Conductancia

Otro eje importante en nuestro trabajo fue el del transporte electrónico. Para trabajar este ámbito, propusimos la distribución en el espacio real del monocristal de SOTI fungiendo como canal y dos contactos perpendiculares al eje  $Z$  como se ilustra en la figura 4.11. Una vez teniendo esta disposi-



**Fig. 4.11:** Representación gráfica de la distribución del sistema contactos-canal para el análisis de transporte electrónico.

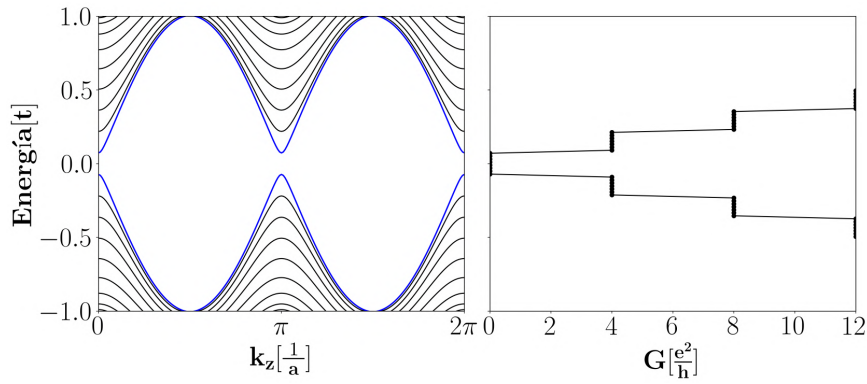
ción, aplicamos la fórmula de Landauer para dos terminales siguiente:

$$G_{2t} = M \frac{q^2}{h} T; \quad q = e \quad (4.16)$$

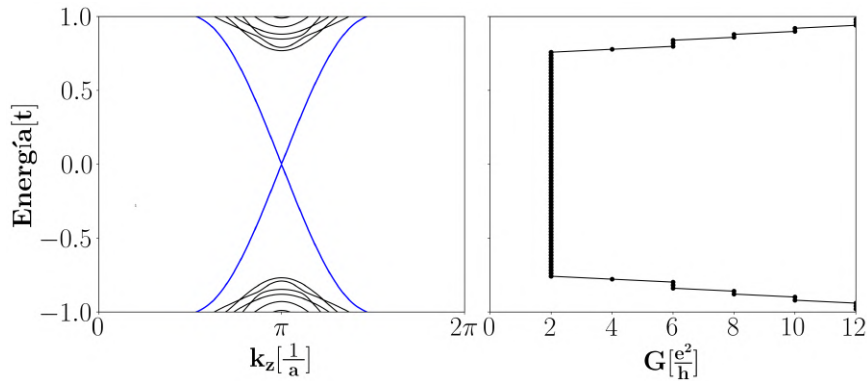
Esta expresión nos indica que la conductancia  $G_{2t}$  es igual al producto del número de canales  $M$  donde pueda fluir la corriente por el cociente de la carga (donde  $q = e$ ) al cuadrado entre la constante de Planck  $h$  por la transmisión  $T$ . Esta transmisión nos indica que tanto de la corriente logra transmitirse y no reflejarse. Una vez logrado esto, se prosiguió con la obtención de la conductancia  $G$  en función de la energía mediante códigos propios en el lenguaje de python y con la paquetería KWANT. Este análisis nos brindó la figura 4.12a. Entrando en profundidad a esta figura, se puede observar que en el valor de la energía de Fermi ( $E = 0.0[t]$ ), la conductancia tiene un valor de  $G = 0.0[e^2/h]$ , conforme se avanza en el valor absoluto de la energía, la conductancia tiende a aumentar, reflejando que, en efecto, el material es un aislante. Pasando a la figura 4.12b, donde aparece la fase topológica de aislante de orden dos, se muestra que la conductancia es constante en el valor de  $G = 2.0[e^2/h]$ , sobre todo en el intervalo de energías donde se tienen los estados conductores de borde, es decir ( $0.75[t] < E < 0.75[t]$ ) la energía a la cual nuestro aislante se comportará como conductor en las aristas. En efecto, la conductancia ( $G$ ) es dependiente del número de canales como lo indica la fórmula de Landauer (4.16), esto nos dice que se tienen dos canales degenerados en cada sentido.

### Densidad de estados

La densidad de estados para nuestro monocristal, siguiendo el razonamiento de la sección 4.1.5, nos sirve para identificar los estados conductores que aparecen a la energía de Fermi. Esta densidad se presenta en la figura 4.13, arrojando que existen dos estados a la energía cero. La principal diferencia entre un aislante topológico y un aislante topológico de orden superior es que los estados conductores que este último presenta, cuentan con una localización mayor. En nuestro caso, un aislante topológico de orden dos SOTI, tiene sus estados en las aristas del material. Para observar de una mejor manera esta afirmación, observamos su presencia y distribución



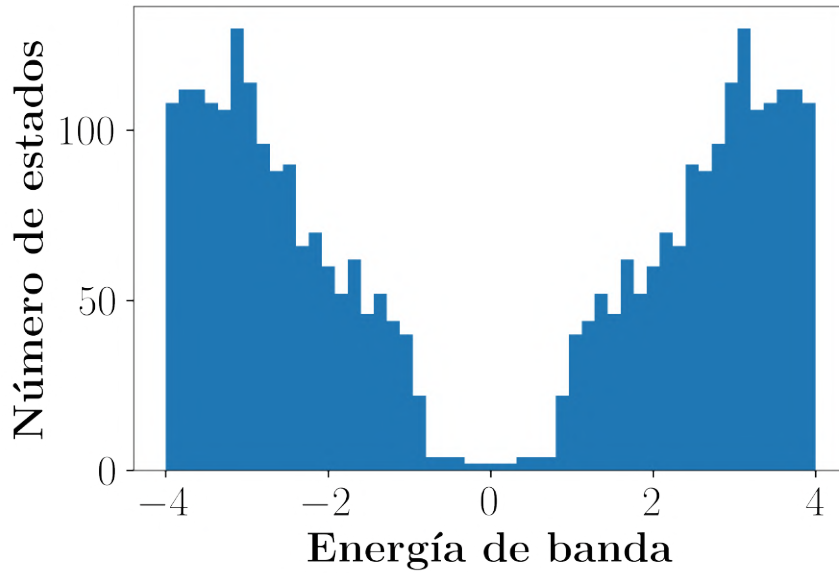
(a) Fase de aislante trivial con simetría traslacional en el eje Z. Ejes X y Y de tamaño  $(10 \times 10)a$ ,  $a =$  constante de red, parámetros:  $M = 0.0$ ,  $\Delta_1 = 1.0$ ,  $\Delta_2 = 0.0$ ,  $t = 1$ .



(b) Aislante topológico de orden dos con simetría traslacional en el eje Z. Ejes X y Y de tamaño  $(10 \times 10)a$ ,  $a =$  constante de red. Parámetros empleados:  $M = 2.0$ ,  $\Delta_1 = 1.0$ ,  $\Delta_2 = 2.0$ ,  $t = 1$ .

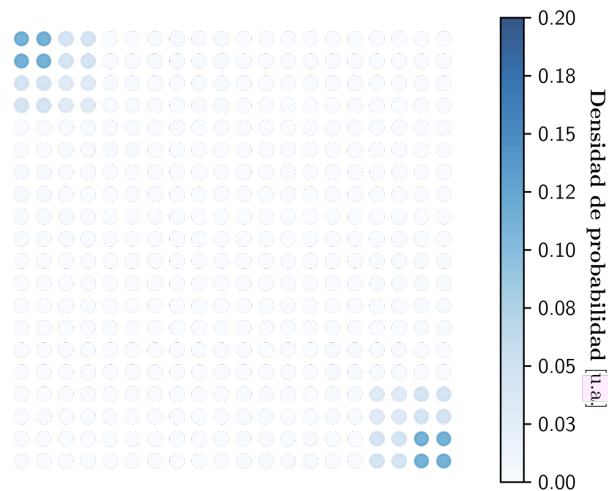
**Fig. 4.12:** Bandas asociadas junto a las conductancia.

calculando el número de estados en un corte perpendicular al eje  $Z$  del material. La densidad de probabilidad depende de la energía, por lo tanto a cada energía se tendrá una diferente distribución espacial del estado. En la figura 4.14 se empleó  $E = 0.5[t]$ , con lo cual, observamos que existe una localización precisa en las esquinas del material marcadas con un tono mayoritariamente azul. Otro punto a resaltar en la localización de estos estados es que estos aparecen de acuerdo al sentido o dirección que establezcamos la corriente eléctrica, es decir la interpretación que se le da a los contactos para la transmisión. En la figura 4.14 observamos que se tienen dos esquinas con un mayor valor en la función del número de estados, esto provocado al sentido en el que la corriente eléctrica fluye desde el contacto "source" hasta el contacto "drain" (figura 4.11. En otras palabras,



**Fig. 4.13:** Número de estados para una SOTI con simetría traslacional en el eje z. Ejes X y Y de tamaño  $(10 \times 10)a$ , con  $a =$  constante de red. Existen estados a la energía  $E = 0.0[t]$

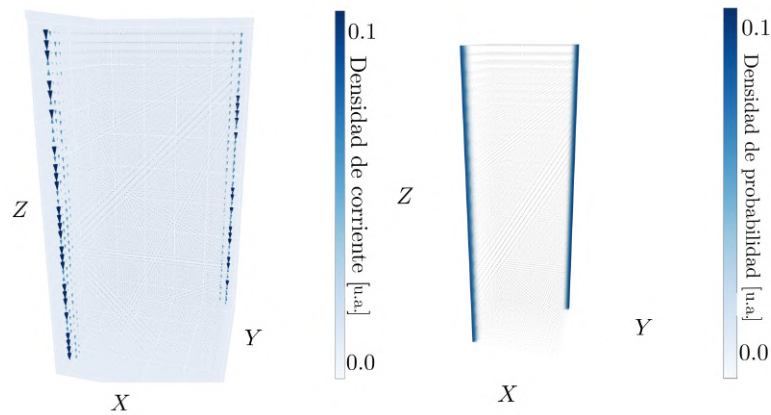
si se usará el otro sentido de transmisión los estados con un mayor valor serían los opuestos a los observados. Esta propiedad va directamente relacionada con la simetría de reversión temporal, puesto que es necesario poseer los estados conductores en ambos sentidos del desplazamiento del tiempo. Es por esto mismo que los estados son llamados quirales. Para



**Fig. 4.14:** Gráfica de densidad de estados local a  $E = 0.5[t]$  para un corte perpendicular al eje Z.



representar desde otra perspectiva estos estados conductores, asociamos una escala de color sobre la densidad de probabilidad para cada posición en tres dimensiones. La figura (izquierda 4.15), muestra el sistema con los canales en el espacio real, en ella observamos que la densidad de probabilidad, representada en azul, aparece especialmente en dos aristas opuestas del material. Cabe recalcar que asimismo como sucedió en el número de estados para un corte perpendicular del material, esto nos indica que solo se está tomando una dirección de la transmisión de acuerdo a la posición de los estados. Para analizar de una mejor manera este supuesto,

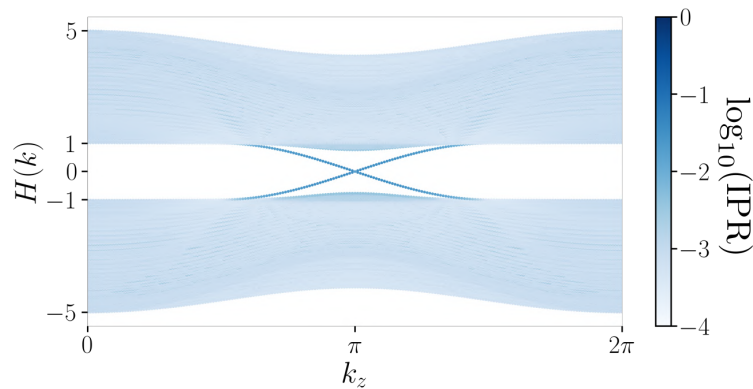


**Fig. 4.15:** Monocristal en el espacio real, Tamaño del sistema de  $(20 \times 20)$  a y a una energía de  $E = 0.5[t]$ . Parámetros:  $M = 2.0$ ,  $\Delta_1 = 1.0$ ,  $\Delta_2 = 2.0$ ,  $t = 1$ . (Izquierda) densidad de probabilidad. (Derecha) densidades de corriente representadas por conos azules.

graficamos los motivos para el monocristal con reciprocidad en  $Z$  junto a los vectores de la densidad de corriente asociada en el espacio real. Como podemos observar en la figura (derecha 4.15) cuando se tiene una dirección de propagación determinada existen dos canales orientados hacia el mismo sentido dentro del material. Por otra parte podemos comprobar que la simetría  $C_4^z T$  se conserva gracias a esta distribución.

## 4.1.8 IPR

Continuando con las propiedades del aislante topológico de orden superior, hasta ahora conocemos que este tiene estados conductores de borde en las aristas y quirales, pero ¿Qué características poseen estos estados? Una de las principales es la localización, en otras palabras, que los estados conductores presentan una alta restricción espacial. De acuerdo a la teoría de Anderson [37], los estados localizados corresponden a una disminución dentro de la conductancia. Para comprobar este hecho, calculamos el IPR (índice de partición inversa, por sus siglas en inglés), con la expresión (4.17), la cual nos indica si un estado cuántico está restringido (muy localizado) o no. Una mayor restricción espacial para los electrones corresponde a valores cercanos a  $E = 0.0[t]$ , mientras que valores que tienden a  $-\infty$  representan una menor localización, debido a que en nuestro caso, la figura 4.16 está graficada logarítmicamente. Por otro lado, esta imagen señala que los estados que cruzan de la banda de valencia a la banda de conducción poseen un fuerte restricción, lo que les otorga una buena propiedad para posibles futuras aplicaciones en nanodispositivos [38].



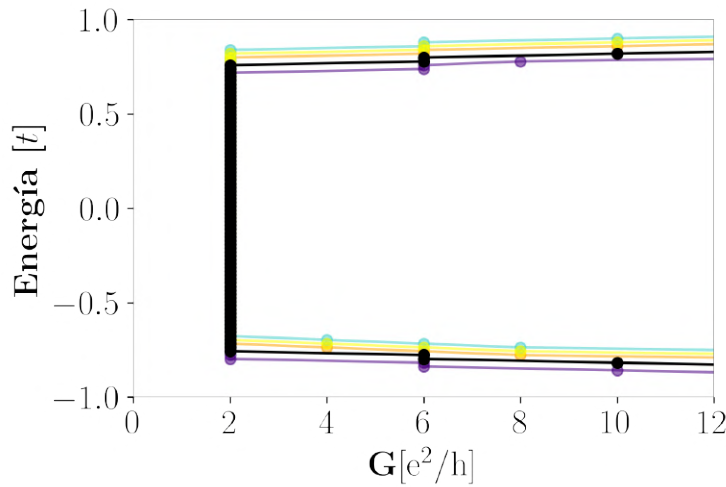
**Fig. 4.16:** Gráfica de las bandas para un aislante superior de orden dos con un mapa de color azul basado en el índice de partición inversa (IPR).

$$\text{IPR}_{\vec{k}}(E) = \sum_{\vec{i}}^{\text{Nsites}} \left( \frac{1}{N_g} \sum_{g=1}^{N_g} |\Psi_{\vec{k}g}(\vec{r}_{\vec{i}})|^2 \right)^2 \quad (4.17)$$

Con  $g$  como el número de degeneraciones y  $\vec{r}_{\vec{i}}$  como las posiciones de los centros de los sitios.

### 4.1.9 Desorden tipo Anderson

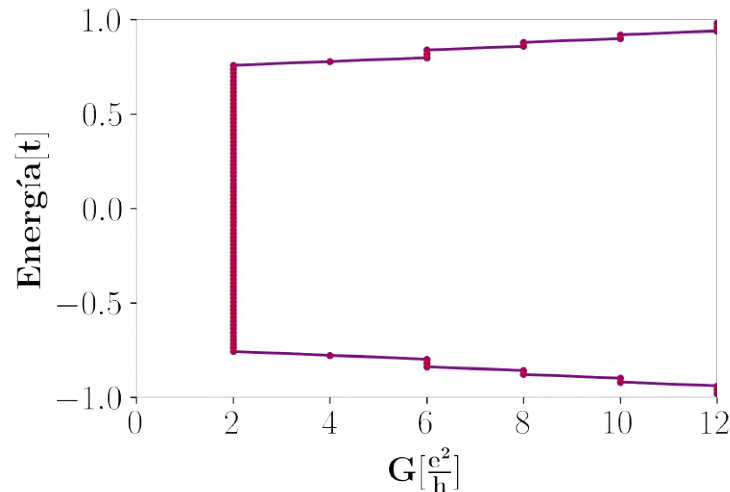
Por otra parte, el desorden tipo Anderson es una perturbación que aplicamos al material para verificar si el material posee o no una robustez ante las impurezas o deformaciones. Para ello, se aplicó un potencial aleatorio al hamiltoniano 2.27 en la diagonal de la matriz, siendo este un desorden fuerte. Después, resolvimos el hamiltoniano para encontrar los eigenvalores y obtener las energías asociadas a nuestro sistema. La figura 4.17 presenta una conductancia constante a  $G = 2[e^2/h]$ , debido a los dos canales presentes en el rango de energías de  $(0.75[t] < E < 0.75[t])$ .



**Fig. 4.17:** Gráfica de la energía en función de la conductancia  $G$  para un SOTI funcionando como canal y dos contactos. Cuatro funciones de conductancia con la adición de un desorden de Anderson entre  $-0.1[t]$  y  $0.1[t]$  en un SOTI de  $(20 \times 20)a$ . Se mantienen cuatro canales pese a las impurezas y/o deformaciones.

### 4.1.10 Tamaño

En el caso de sistemas periódicos, como es nuestro caso, es importante controlar el tamaño del sistema puesto que este está estrechamente relacionado con la formación de cristales y sus propiedades. Para estudiar esto, estudiamos la fase de aislante topológico de orden dos (SOTI) empleando el sistema de monocristal al cual se le calculó su conductancia  $G$  con el mismo análisis que en la sección 4.1.7. Esta figura nos arroja que la con-

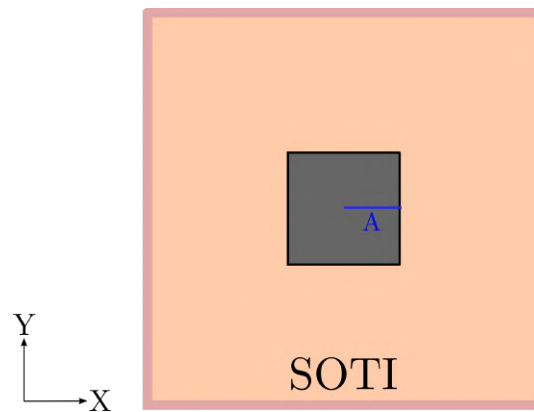


**Fig. 4.18:** Gráfica de la energía en función de la conductancia  $G$  para un SOTI funcionando como canal y dos contactos. Tamaños de acuerdo al color: Magenta (10x10)a, rosa (20x20)a, azul (30x30)a, naranja (40x40)a.

ductancia se mantiene constante en el valor de dos pese al aumento del tamaño. Debido a esto, podemos afirmar que nuestros estados conductores de las aristas se mantienen invariantes ante el tamaño. Esta propiedad le otorga a nuestro sistema valor dentro de las propiedades para futuras aplicaciones.

## 4.2 HOTI con agujero

Los bordes en el SOTI son imprescindibles para la aparición de los estados conductores, como observamos en la sección anterior. Debido a esto, propusimos explorar el material realizando un agujero cuadrado en el interior del monocristal y paralelo al eje  $Z$ . El agujero en el centro consta de un parámetro  $A[a]$  ( $a$  = parámetro de red) el cual indica su espesor. La figura 4.19 nos muestra la representación gráfica del parámetro  $A$ . Una vez realizado



**Fig. 4.19:** Esquema del agujero realizado al canal con el parámetro de corte  $A[a]$  representado.

este corte dentro de nuestro monocristal, proseguimos a calcular las bandas. Para ello, fue necesario resolver el hamiltoniano tomando los puntos  $\vec{k}_z$  asociados al espacio recíproco del monocristal con el agujero, es decir figura 4.9. Utilizando la paquetería adjunta de Python, KWANT, fue posible realizar este cálculo con un código propio creado en este ambiente. La figura 4.20 presenta la gráfica de los valores de la energía obtenidos. En ella se pueden observar distintos valores de  $A$  para las diferentes filas, el valor del parámetro  $A$  modifica el tamaño del agujero dentro de nuestro monocristal. Asimismo, se presentan las gráficas de conductancia y de bandas, asociadas para cada valor de  $A$ .

Observamos que el valor de  $A$  que crea una fase topológica con estados conductores, es el tamaño de  $A = 0.5[a]$  puesto que aparecen estados que cruzan la energía de Fermi. Además, es de notarse que los estados que pertenecen a la banda de conducción y a la banda de valencia están más cerca de la energía de Fermi que en nuestro sistema sin el agujero figu-

ra 4.12b. Este tamaño de  $A = 0.5[\text{a}]$  y el tamaño de  $A = 1.0[\text{a}]$  pueden ser posibles candidatos para implementar un nanotransistor asignándoles una compuerta lógica a los diferentes valores de la conductancia en un rango de energía determinado. Con respecto a los otros valores de  $A$ , estos no crean ningún estado conductor puesto a que no se encuentra ningún cruce por la energía de Fermi. Sin embargo, es de resaltar que la tendencia al aumentar el agujero es que las bandas de valencia y conducción se separen cada vez más.

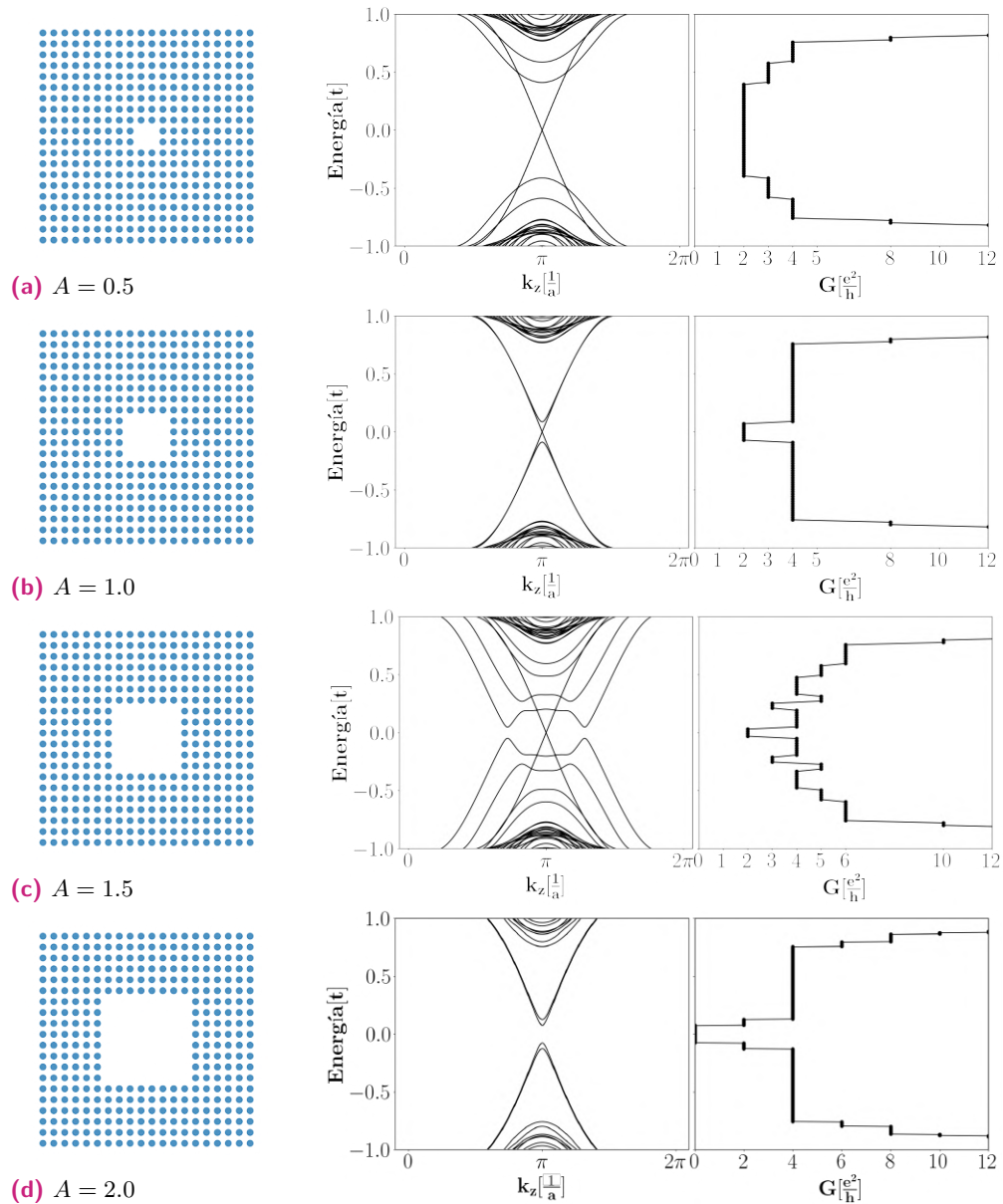
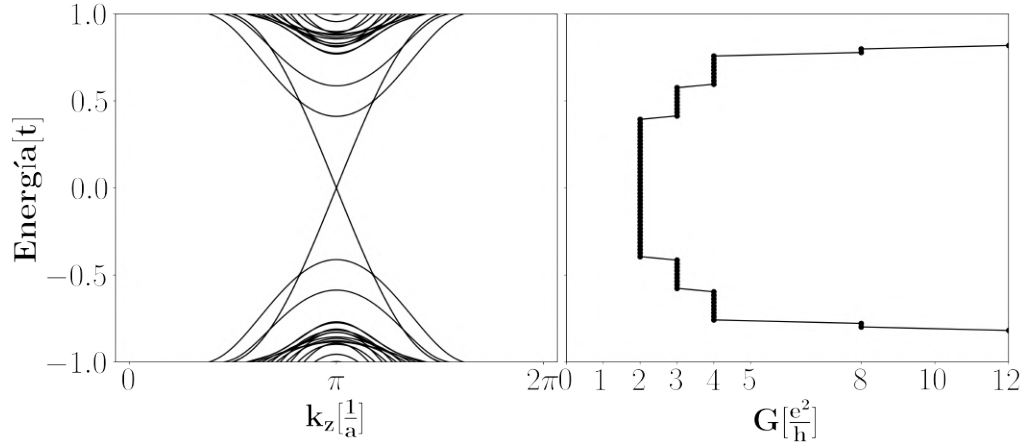


Fig. 4.20: Diferentes valores de A y su representación

## 4.2.1 Conductancia

Con respecto a la conductancia, aplicamos un análisis idéntico que en la sección 4.1.7 donde se utilizó un SOTI como canal y dos contactos perpendiculares al eje  $Z$  Figura-4.11. Una vez escrito este sistema, obtuvimos la conductancia  $G$  para el sistema en función de la energía.



**Fig. 4.21:** Aislante topológico de orden dos con simetría traslacional en el eje Z. Ejes X y Y de dimensión  $(10 \times 10)a$ , con  $a =$  parámetro de red. Tamaño del agujero central  $A = 0.5a$ , parámetros:  $M = 2.0, \Delta_1 = 1.0, \Delta_2 = 2.0, t = 1$ , a) Bandas electrónicas con presencia de estados de borde degenerados a  $E = 0.0$ . b) Conductancia ( $G$ ) del SOTI.

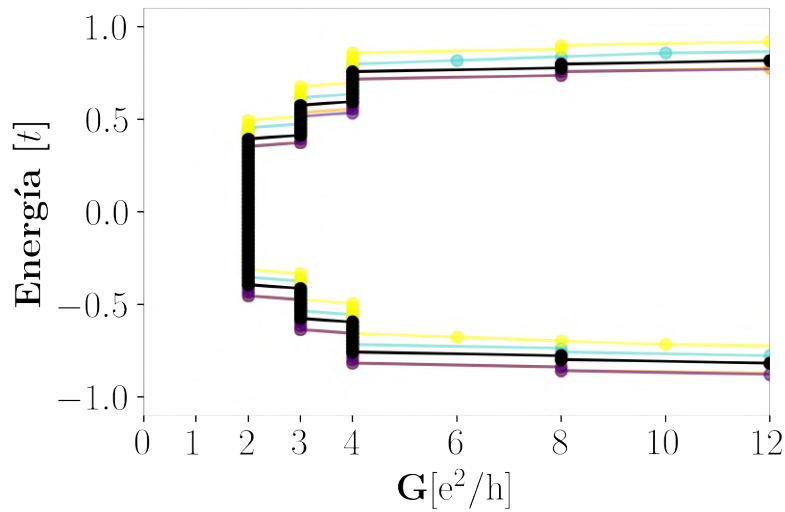
En la figura 4.21 se observa que la conductancia mantiene un valor de  $G = 2.0[e^2/h]$  en un rango aproximado de energía de  $-0.4 < E < 0.4$ , refiriéndose a los dos canales presentes a la hora de la transmisión electrónica de acuerdo a la fórmula de Landauer. Añadiendo, existe conductancia de valor  $G = 3.0[e^2/h]$ , lo que indica que existe un tercer canal empleado durante el transporte a energías mayores a  $E = 0.4t$  o menores a  $E = -0.4[t]$  aproximadamente. En energías mayores se hace notar que existen cuatro canales empleados, dos del agujero y dos del exterior. Para observar mejor estos estados para el caso de  $A = 0.5[a]$  se gráfico la corriente y la densidad de estados localizada para nuestro monocristal.

## 4.2.2 Desorden tipo Anderson y tamaño

Siguiendo con el análisis a estos nuevos estados presentes en nuestro monocristal, el desorden de tipo Anderson es importante para caracterizar nuestro material ante posibles deformaciones o impurezas como vimos en la sección 4.1.9. Por ende, calculamos la conductancia aplicando un potencial aleatorio en el rango de  $-0.1[t]$  y  $0.1[t]$  dentro de nuestro hamiltoniano. Además, repetimos el proceso cinco veces para asegurarnos de cómo se

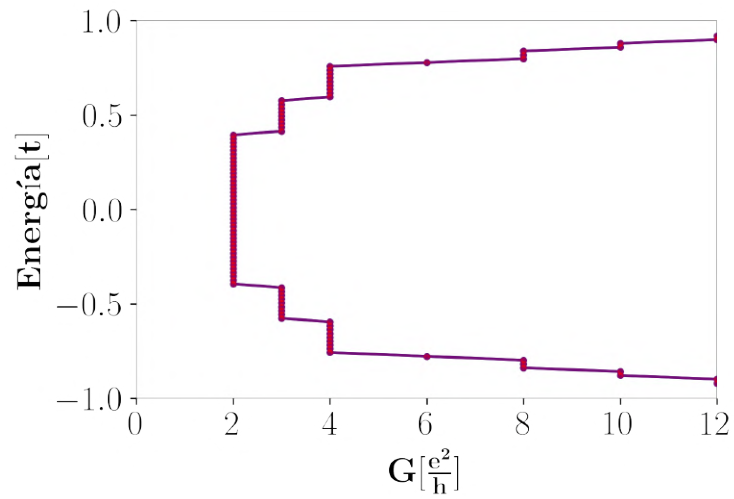


comporta el material. La figura 4.22 arroja que la conductancia  $G$  se man-



**Fig. 4.22:** Desorden de un potencial aleatorio entre  $-0.1[t]$  y  $0.1[t]$  para un SOTI con un agujero  $A = 0.5[a]$  de tamaño:  $(10 \times 10)[a]$ .

tiene constante en el valor de  $G = 2[e^2/h]$ ,  $G = 3[e^2/h]$  y  $G = 4[e^2/h]$ . Este resultado indica que al igual que sucedió con el IPR, los nuevos estados presentes en el monocristal se mantienen invariantes, en este caso ante posibles impurezas o deformaciones. Por otro lado, recordando otra de las propiedades especiales brindadas de la topología a este material es la de conservar los estados conductores de arista pese al aumento de tamaño. En la figura 4.23 podemos comprobar que la conductancia se mantiene en los valores esperados pese a tener diferentes tamaños de sistema del nanodispositivo.

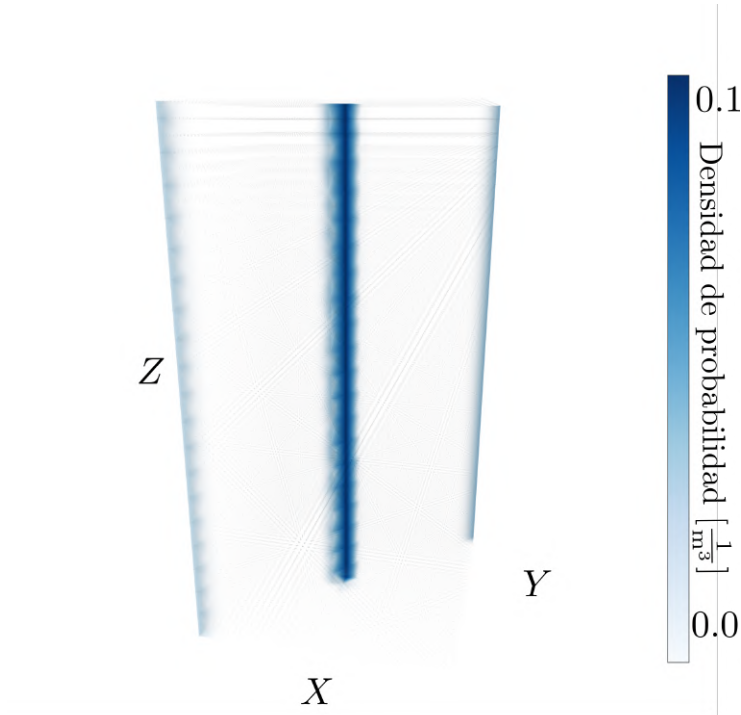


**Fig. 4.23:** Gráfica de la energía en función de la conductancia  $G$  para un SOTI funcionando como canal y dos contactos. Tamaños de acuerdo al color: Magenta (10x10)a, rosa (20x20)a, azul (30x30)a, naranja (40x40)a.

### 4.2.3 Densidad de estados

La densidad de estados es una forma fácil de visualizar si es que existen estados a la energía de Fermi, ya que caracteriza todos los estados de acuerdo a su energía. Por lo que, calculamos la densidad de estados para nuestro monocristal con un agujero de tamaño  $A = 0.5[a]$  siguiendo el mismo proceso mencionado anteriormente.

La figura 4.24 muestra que existen estados a la energía cero, por lo cual



**Fig. 4.24:** Gráfica de las densidades de probabilidad para un SOTI con tamaño  $(20 \times 20)a$ . Tamaño del agujero  $A = 0.5[a]$ . Energía =  $0.5[t]$

podemos concluir que estos estado son conductores.

## Conclusiones

En la primera sección de nuestro trabajo, realizamos un análisis y una caracterización de los estados electrónicos de nuestro sistema gracias al modelo de amarre fuerte empleado. Para los valores de  $1 < M/t < 3$  y de  $\Delta_2 > 0$  pudimos caracterizar la fase de aislante topológico de orden dos quiral. Por otro lado, para valores distintos de  $\Delta_2/t$  y de  $M/t$  caracterizamos la fase de aislante trivial.

Respecto a la parte de transporte electrónico, simulamos un nanodispositivo con dos terminales y una sección dispersora ambas de nuestro material. En la sección dispersora encontramos que los estados conductores presentes aparecen en parejas dependiendo del orden de propagación de los electrones.

Observamos que la densidad de probabilidad y la densidad de corriente graficada en tres dimensiones están ubicadas en las aristas del sistema. Adicionalmente, introdujimos un desorden de tipo Anderson para simular impurezas dentro del material, permitiéndonos verificar la preservación de los estados conductores dentro de las gráficas de conductancia. Asimismo, comprobamos la robustez de estos estados conductores a pesar del aumento del tamaño de la sección transversal dispersora de nuestro material.

Finalmente, simulamos un agujero dentro de sección conductora (canal), con lo cual, aparecieron nuevos estados conductores de borde. El número de estados depende del tamaño del agujero. En tamaños mayores o iguales a una celda unitaria encontramos dos, tres y cuatro canales de transmisión, siendo el límite cuatro celdas unitarias para desaparecer dichos estados en las aristas del material. Estos resultados aportan a la caracterización de posibles dispositivos electrónicos; como nanotransistores basados en aislantes topológicos de orden superior. Así como de tener futuras aplicaciones en dispositivos de nanoelectrónica, optoelectrónica y espintrónica [39, 40].



# Bibliografía

- [1] B. A. Bernevig and T. L. Hughes, *Topological Insulators and Topological Superconductors* (Princeton University Press, Princeton, NJ, USA, 2013).
- [2] C. V. Morfonios and P. Schmelcher, "Directional magnetotransport control in multiterminal focusing quantum billiards," in *Control of Magnetotransport in Quantum Billiards: Theory, Computation and Applications* (Springer International Publishing, Cham, 2017) pp. 193–218.
- [3] R. M. Martin, *Principles of Electronic Structure* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2004).
- [4] D. Basov, R. Averitt, and D. Hsieh, "Towards properties on demand in quantum materials," *Nature materials* 16, 1077 (2017).
- [5] J. Maciejko, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, "The quantum spin hall effect," *Annual Review of Condensed Matter Physics* 2, 31 (2011), <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-062910-140538>.
- [6] J. R. Munkres, *Topology* (Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, USA, 2000).
- [7] R. Moessner and J. E. Moore, *Topological phases of matter* (Cambridge University Press, 2021) pp. 24–26.
- [8] F. D. M. Haldane, "Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly"," *Physical Review Letters* 61, 2015 (1988).
- [9] C. L. Kane and E. J. Mele, "Quantum spin hall effect in graphene," *Physical review letters* 95, 226801 (2005), doi: 10.1103/PhysRevLett.95.226801.
- [10] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, "Topological insulators in three dimensions," *Physical review letters* 98, 106803 (2007).

- [11] L. Fu and C. L. Kane, "Topological insulators with inversion symmetry," *Physical Review Letters* 76, 045302 (2007).
- [12] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, "Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells," *Science* 314, 1757 (2006), doi: 10.1126/science.1133734.
- [13] M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, "Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells," *Science* 318, 766 (2007).
- [14] M. Z. Hasan and J. E. Moore, "Three-dimensional topological insulators," *Annual Review of Condensed Matter Physics* 2, 55 (2011), <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-062910-140432>.
- [15] F. Schindler, A. M. Cook, M. G. Vergniory, Z. Wang, S. S. P. Parkin, B. A. Bernevig, and T. Neupert, "Higher-order topological insulators," *Science Advances* 4, (2018), doi: 10.1126/sciadv.aat0346.
- [16] F. Schindler, Z. Wang, M. G. Vergniory, A. M. Cook, A. Murani, S. Sengupta, A. Y. Kasumov, R. Deblock, S. Jeon, I. Drozdov, et al., "Higher-order topology in bismuth," *Nature physics* 14, 918 (2018).
- [17] N. Shumiya, M. S. Hossain, J.-X. Yin, Z. Wang, M. Litskevich, C. Yoon, Y. Li, Y. Yang, Y.-X. Jiang, G. Cheng, et al., "Evidence of a room-temperature quantum spin hall edge state in a higher-order topological insulator," *Nature Materials* 21, 1111 (2022).
- [18] M. J. Park, S. Lee, and Y. B. Kim, "Hinge magnons from noncollinear magnetic order in a honeycomb antiferromagnet," *Phys. Rev. B* 104, L060401 (2021).
- [19] C. Yue, Y. Xu, Z. Song, H. Weng, Y.-M. Lu, C. Fang, and X. Dai, "Symmetry-enforced chiral hinge states and surface quantum anomalous hall effect in the magnetic axion insulator  $\text{Bi}_2-x\text{Sm}_x\text{Se}_3$ ," *Nature Physics* 15, 577 (2019).
- [20] D. J. Griffiths, "Introduction to electrodynamics," (2005).
- [21] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, "New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance," *Physical review letters* 45, 494 (1980), doi: 10.1103/PhysRevLett.45.494.

- [22] B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, "Quantum spin hall effect," *Physical review letters* 96, 106802 (2006).
- [23] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, "Kwant: a software package for quantum transport," *New Journal of Physics* 16, 063065 (2014), doi: 10.1088/1367-2630/16/6/063065.
- [24] H. Ibach and H. Lüth, *Solid-state physics: an introduction to principles of materials science* (Springer Science & Business Media, 2009) pp. 167–173.
- [25] C. Kittel, *Introduction to solid state physics* (John Wiley & sons, inc, 2005) pp. 232–237.
- [26] S. H. Simon, *The Oxford solid state basics* (OUP Oxford, 2013) pp. 99–109.
- [27] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, "A short course on topological insulators," *Lecture notes in physics* 919, 1 (2016).
- [28] D. Obana, F. Liu, and K. Wakabayashi, "Topological edge states in the su-schrieffer-heeger model," *Physical Review B* 100, 075437 (2019).
- [29] S. Datta, *Lessons from Nanoelectronics* (WORLD SCIENTIFIC, 2012) <https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/8029>.
- [30] D. A. Ryndyk et al., "Theory of quantum transport at nanoscale," *Springer Series in Solid-State Sciences* 184, 9 (2016).
- [31] D. J. Griffiths and D. Schroeter, *Introduction to quantum mechanics* (Prentice Hall, 1995) pp. 66–70.
- [32] A. Aspect and M. Inguscio, "Anderson localization of ultracold atoms," *Physics Today* 62, 30 (2009), [https://pubs.aip.org/physicstoday/article-pdf/62/8/30/16707806/30\\_1\\_online.pdf](https://pubs.aip.org/physicstoday/article-pdf/62/8/30/16707806/30_1_online.pdf).
- [33] F. Stellin, *Anderson localization in interacting quantum systems*, Ph.D. thesis, Université Paris Cité (2020).
- [34] M. Probert, "Electronic structure: Basic theory and practical methods, by richard m. martin: Scope: graduate level textbook. level: theoretical materials scientists/condensed matter physicists/computational chemists," (2011).



- [35] D. Vanderbilt, "Python tight binding (pythtb)," (2016).
- [36] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, "Kwant: a software package for quantum transport," *New Journal of Physics* 16, 063065 (2014).
- [37] D. Thouless, "Electrons in disordered systems and the theory of localization," *Physics Reports* 13, 93 (1974).
- [38] A. Dutt, M. Minkov, I. A. Williamson, and S. Fan, "Higher-order topological insulators in synthetic dimensions," *Light: Science & Applications* 9, 1 (2020).
- [39] C. Yue, S. Jiang, H. Zhu, L. Chen, Q. Sun, and D. W. Zhang, "Device applications of synthetic topological insulator nanostructures," *Electronics* 7, 225 (2018).
- [40] W. Tian, W. Yu, J. Shi, and Y. Wang, "The property, preparation and application of topological insulators: a review," *Materials* 10, 814 (2017).

