



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO**

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUÍMICAS**

**TRANSPORTE ELECTRÓNICO EN NANOESTRUCTURAS DE BISMUTO**

**TESIS**

PARA OPTAR POR EL GRADO DE

**MAESTRA EN CIENCIAS**

PRESENTA

Q. MONTSERRAT NAVARRO ESPINO

TUTOR:

DR. JOSÉ EDUARDO BARRIOS VARGAS  
FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., JUNIO 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. Luis Emilio Orgaz Baqué  
Vocal: Dr. Miguel Cruz Irisson  
Vocal: Dra. Sandra Elizabeth Rodil Posada  
Vocal: Dr. Gustavo Tavizón Alvarado  
Secretario: Dr. Daniel Finkelstein Shapiro

Sitios donde se desarrolló el trabajo:

Cubículo 5. Departamento de Física y Química Teórica. Mezzanine del Área de Posgrado, Edificio B. Facultad de Química, UNAM. México.

Despacho de Investigadores. Departamento de Física Aplicada. Facultad de Ciencias II, Universidad de Alicante. España.

Congresos donde se presentó el trabajo:

Congreso: XVIII Congreso de Estudiantes del PCF-UNAM.  
Título: Bi: Estructura electrónica y clasificación como HOTI.  
Modalidad: Póster.  
Lugar y fecha: CDMX, México. 8 de diciembre de 2022.

Congreso: ICTP: Conference and Advanced School on Low-dimensional Quantum Systems.  
Título: Electronic transport in Bi nanostructures through its hinge states.  
Modalidad: Presentación oral.  
Lugar y fecha: Santiago, Chile. 13 al 24 de Marzo de 2023.

Congreso: XI Reunión Anual de la División de Estado Sólido - SMF.  
Título: Transporte electrónico en nanoestructuras de bismuto a través de sus estados de arista.  
Modalidad: Presentación oral.  
Lugar y fecha: Xicotepec, Puebla. 3 al 5 de mayo de 2023.



---

Q. Montserrat Navarro Espino  
Alumna de Maestría en Ciencias Químicas.  
Facultad de Química, UNAM.



---

Dr. José Eduardo Barrios Vargas  
Profesor de carrera asociado "C" T.C.  
Depto. de Física y Química Teórica,  
Facultad de Química, UNAM.

# Agradecimientos

Agradezco profundamente a toda mi familia, en especial a mis padres, Evangelina y Rolando, a mis hermanos, Lulú y Rolis, y a los pequeños, Lobo y Hades, por su gran cariño, apoyo y compañía a lo largo de esta gran etapa académica llena de crecimiento personal y, sobre todo, una gran satisfacción profesional.

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México y a la Facultad de Química por hacer de mi estancia en ellas una experiencia fructífera y gratificante que definió no solo mi perfil profesional, sino también cultivó en mí habilidades de carácter social y humanístico para la vida.

Agradezco profundamente a mi tutor, el Dr. José Eduardo Barrios Vargas por su considerable dedicación y constancia. Durante estos años de trabajo en conjunto su ejemplo ha sido esencial para desempeñarme al máximo y reforzar en mí el gran gusto por la profesión científica. Además, su gran motivación y apoyo me han permitido aprovechar oportunidades excepcionales y de gran repercusión en mi vida.

Agradezco a mis sinodales: el Dr. Luis Emilio Orgaz Baqué, el Dr. Miguel Cruz Irisson, la Dra. Sandra Elizabeth Rodil Posada, el Dr. Gustavo Tavizón Alvarado y el Dr. Daniel Finkelstein Shapiro por su dedicación en la revisión de este trabajo y la retroalimentación brindada para su mejora.

Agradezco a CONAHCyT por la Beca Nacional de Maestría con número de becario 1139393 proporcionada durante mis estudios de posgrado. De igual forma agradezco al proyecto CONACyT FRONTERA 428214.

Agradezco a la Dra. Laura Michelle Jiménez Díaz por su constante guía y retroalimentación en mi formación académica. Especialmente, le agradezco la oportunidad de integrarme a su salón de clases y dar mis primeros pasos en las actividades académicas de enseñanza esenciales en el camino profesional que he elegido.

Agradezco a mi grupo de investigación *Topoamigos* por los grandes momentos compartidos, desde seminarios que nos han permitido desarrollar ideas y discutir resultados hasta las situaciones cargadas de humor que han pasado a ser parte de la historia de nuestro grupo. Particularmente, agradezco a Jaz y Kean con quienes he logrado forjar una gran amistad.

Agradezco al Dr. Thomas Stegmann por su retroalimentación y comentarios relevantes en este trabajo y en el trabajo en colaboración con su grupo de investigación.

Agradezco al Dr. David Soriano y al *Spin-Waals Group* por brindarme la oportunidad de integrarme con ellos para la realización de una estancia académica y, con ella, ampliar mi panorama del área de investigación en la que nos desempeñamos.



# Resumen

El objetivo de este trabajo teórico, titulado *Transporte Electrónico en Nanoestructuras de Bismuto* es caracterizar las propiedades electrónicas de transporte, por lo que es necesario un modelo adecuado para describir estas propiedades. En este trabajo se utiliza un modelo de amarre fuerte que permitió realizar cálculos de transporte en nanoestructuras de bismuto. Para comenzar el estudio, se utilizó un modelo de amarre fuerte que reproduce los estados topológicos en el material y se comparó con un modelo de amarre fuerte propuesto previamente que recupera la naturaleza semimetálica del bulto de bismuto. Con ambos modelos se calculó la estructura de bandas para el bulto y para una estructura hexagonal periódica. Además, se calculó la densidad de probabilidad de los estados en cada sitio, lo que permitió confirmar la aparición de los estados topológicos de los aristas del cristal usando el modelo correspondiente. Finalmente, con el modelo anteriormente mencionado, se abordó el problema del transporte electrónico en los estados topológicos a través de la elaboración de un dispositivo de dos y otro de tres contactos. En el primero, se observaron los seis canales de conducción esperados, uno para cada arista de la estructura hexagonal. Sin embargo, en el caso de la adición de los tres contactos, se indujo decoherencia en los estados y se eliminó uno de los seis canales de conducción de borde. Esta observación abre la posibilidad de explorar nuevos dispositivos añadiendo nuevos contactos a la estructura o modificando geoméricamente los ya contemplados.

# Índice general

|   |            |
|---|------------|
| <b>Agradecimientos</b>  | <b>III</b> |
| <b>Resumen</b>  | <b>IV</b>  |
| <b>Introducción</b>   | <b>1</b>   |
| <b>1 Bismuto como un HOTI</b>   | <b>2</b>   |
| 1.1 Aislantes topológicos basados en bismuto . . . . .                              | 2          |
| 1.2 Detección experimental de los estados de arista . . . . .                       | 3          |
| 1.3 Dispositivos electrónicos a base de aislantes topológicos. . . . .              | 5          |
| <b>2 Objetivos</b>  | <b>6</b>   |
| <b>I Estructura electrónica de Bi</b>   | <b>7</b>   |
| <b>3 Geometría de bismuto</b>   | <b>8</b>   |
| 3.1 Estructura cristalina de bismuto . . . . .                                      | 8          |
| 3.2 Estructura cristalina para el modelo topológico. . . . .                        | 11         |
| <b>4 Hamiltoniano de amarre fuerte para bismuto</b>                                 | <b>13</b>  |
| 4.1 Modelo previo: bismuto como semimetal. . . . .                                  | 13         |
| 4.2 Modelo topológico: superficie de bismuto con simetrías representativas . .      | 14         |
| <b>5 Metodología y Resultados</b>   | <b>16</b>  |
| 5.1 Estructura de bandas para sistema infinito (bulto). . . . .                     | 16         |
| 5.2 Estructura de bandas para sistema hexagonal infinito (periódico en $k_z$ ). . . | 17         |
| <b>II Transporte electrónico en nanoestructuras de Bi</b>                           | <b>20</b>  |
| <b>6 Transporte electrónico cuántico</b>  | <b>21</b>  |
| 6.1 Formalismo de Landauer-Büttiker . . . . .                                       | 21         |
| 6.2 Método de la matriz de dispersión. . . . .                                      | 23         |
| <b>7 Metodología y Resultados</b>   | <b>29</b>  |
| 7.1 Dispositivo de Bi con dos contactos. . . . .                                    | 29         |
| 7.2 Dispositivo de Bi con tres contactos. . . . .                                   | 31         |
| <b>Conclusiones</b>   | <b>32</b>  |
| <b>8 Conclusiones</b>   | <b>33</b>  |

---

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Referencias</b>  | <b>36</b> |
| <b>A Apéndice A: Desarrollo de expresiones del Hamiltoniano propuesto por Liu y Allen</b>               | <b>37</b> |
| <b>B Apéndice B: Desarrollo de expresiones del Hamiltoniano propuesto por Schindler y colaboradores</b> | <b>48</b> |

# Introducción

# Bismuto como un HOTI

El bismuto es uno de los elementos químicos más pesados y con un mayor tiempo de vida media ( $2 \times 10^{19}$  años aproximadamente) [1, 2]. Por ende, posee un enorme acoplamiento espín-orbita (SOC, por sus siglas en inglés) y sus electrones presentan efectos relativistas [3, 4]. El cristal de bismuto es un semimetal en el que se han observado diversas propiedades y fenómenos cuánticos de interés, siendo uno de ellos la topología de su estructura electrónica [5], tema que se abordará a continuación.

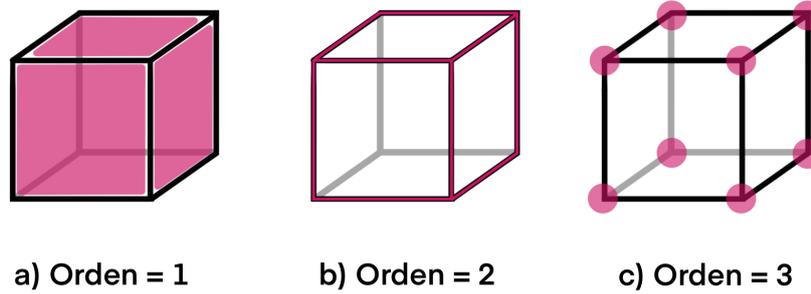
## 1.1. Aislantes topológicos basados en bismuto

Formalmente, los aislantes topológicos son materiales aislantes en su interior (de dimensión  $D$ ) que permiten estados conductores en su frontera (de dimensión  $D - 1$ ). Estos estados de conducción son inusuales ya que se mantienen a pesar de la presencia de impurezas. En 2017 se identificó una nueva clase de aislantes topológicos en dimensiones  $D > 1$  [6]. Esta nueva clase se denominó aislantes topológicos de orden superior (HOTI, higher order topological insulators), los cuales también presentan estados robustos ante el desorden, es decir, no se ven afectados por el desorden pues están protegidos por simetrías inherentes al sistema.

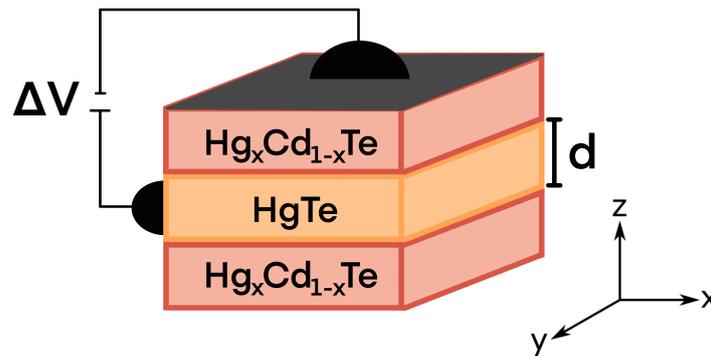
Estos estados viven en subsistemas de dimensión  $D - n$ , donde  $n > 1$ . Por ejemplo, en un sistema tridimensional, los aislantes topológicos de orden dos presentan estados que conducen en una dimensión, mientras que los aislantes de orden tres presentan estados confinados en puntos de la superficie del material. Esta información se encuentra esquematizada en la Fig. 1.1

Un fuerte acoplamiento espín-órbita puede inducir propiedades topológicas en la estructura electrónica. El primer ejemplo teorizado y observado experimentalmente son los pozos cuánticos de HgTe, los cuales se ejemplifican en la Fig.1.2, donde se observó el efecto Hall cuántico de espín [7, 8].

Considerando el fuerte SOC en el bismuto, es entendible el por qué ha jugado un rol esencial en la composición química de varios de los primeros aislantes topológicos identificados:  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  y  $\text{Na}_3\text{Bi}$  [9]. En estos compuestos, la combinación del acoplamiento espín-órbita con varias simetrías produce estados protegidos topológicamente con un rompimiento de la degeneración de espín. Las aleaciones de bismuto-antimonio ( $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ) fueron las primeras realizaciones de un aislante topológico tridimensional.

Aislantes topológicos ( $D=3$ )

**Figura 1.1:** Diferencia entre la aparición de los estados de borde en un cristal tridimensional. a) Aislante topológico de primer orden, donde los estados topológicos aparecen en la superficie del cristal (son bidimensionales). b) Aislante topológico de orden dos, donde los estados topológicos aparecen en las aristas del material (son unidimensionales). c) Aislante topológico de tercer orden, el cual presenta estados topológicos en sus vértices (tienen dimensión cero)

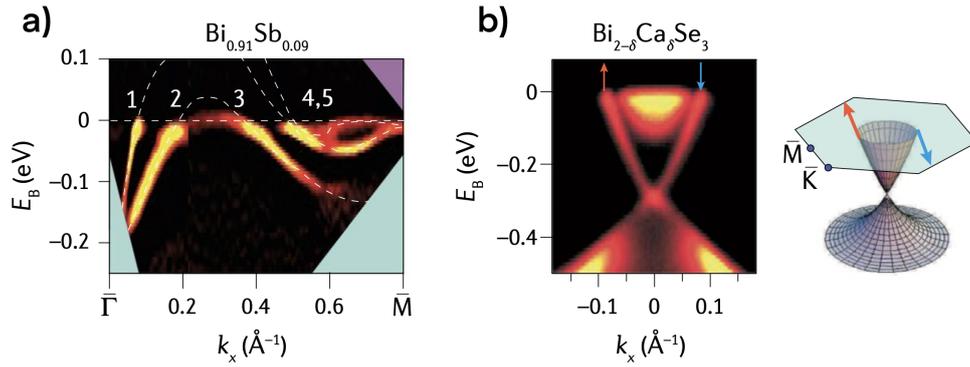


**Figura 1.2:** Representación del pozo cuántico de HgTe de anchura  $d$ , confinado entre dos capas de  $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ . A través de la diferencia de potencial  $\Delta V$  se puede modificar la energía de Fermi de los electrones.

Además, la familia de los compuestos  $\text{Bi}_2\text{X}_3$  ( $X = \text{Br}, \text{I}$ ) [10] se considera prototipo de los aislantes topológicos, pues los compuestos con esta composición presentan un cono de Dirac en la estructura electrónica de su superficie. Otro compuesto relevante es el  $\text{Na}_3\text{Bi}$ , el cual se ha clasificado como un semimetal de Dirac tridimensional [5].

## 1.2. Detección experimental de los estados de arista

La estructura electrónica de Bi prístino ha sido considerada por un largo tiempo como topológicamente trivial, lo cual implica que ésta es la misma tanto para el bulto como para la superficie del material. Sin embargo, a través de varios experimentos empleando la espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (ARPES, por sus siglas en inglés), se encontró que las bandas de la superficie poseen una topología no trivial [12, 13], como se observa en la Fig. 1.3. No obstante, para determinar con certeza el

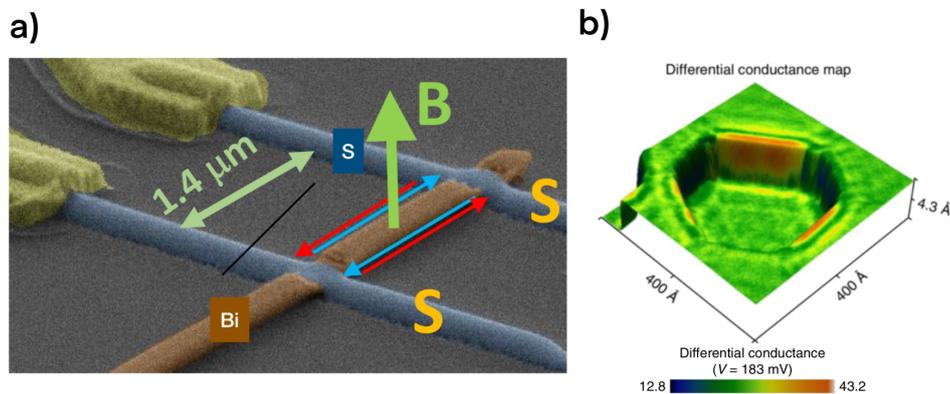


**Figura 1.3:** Estados topológicos de superficie identificados con ARPES para a)  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  y b)  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  dopado con calcio [11].

carácter topológico de la estructura electrónica del bismuto es necesario analizar tanto la estructura electrónica de la superficie como la del bulto [5].

En el año 2018, se realizó un esfuerzo excepcional en este ámbito, donde fue identificada la naturaleza topológica de orden superior de la estructura electrónica de bismuto [14]. En dicho trabajo se identificaron estados de arista, o *hinge states*, los cuales están protegidos globalmente por la simetría de reversión temporal ( $TRS$ ), y discretamente por la simetría rotacional de tercer orden ( $\hat{C}_3$ ) y la simetría de inversión del cristal de bismuto ( $\hat{I}$ ). Además, se realizó la conexión con varios fenómenos identificados recientemente en este elemento, los cuales pueden ser explicados por la topología de orden superior en el material. Algunos de ellos son:

- Estados topológicos unidimensionales localizados a lo largo de los bordes escalonados de la superficie de bismuto [15].
- Presencia de canales conductores en las aristas en nanohilos de bismuto [16, 17].
- Estados metálicos cuasi-unidimensionales en la superficie de bismuto [18].
- Efecto Hall cuántico de espín en bicapas de bismuto bidimensionales [19, 20] y bismuteno en SiC [21].



**Figura 1.4:** Detección experimental de los estados de arista. a) Experimento STM donde se observan estados alternados y fuertemente localizados en el borde de Bi (111). b) Junta de Josephson S/Bi/S donde se detecta corriente fluye a través de canales extremadamente estrechos (unidimensionales) [14].

## 1.3. Dispositivos electrónicos a base de aislantes topológicos

La clasificación del bismuto como aislante topológico de orden superior provee una oportunidad única de trabajar con nanodispositivos innovadores basados en este material.

En sistemas tridimensionales convencionales, el transporte electrónico satisface la ley de Ohm. Si pensamos en un cuboide de longitud  $L$ , anchura  $W$  y grosor  $d$ , la resistencia en este sistema es proporcional a la longitud  $L$  e inversamente proporcional al área perpendicular al paso de corriente  $A = Wd$  [22].

Sin embargo, los estados topológicos pueden conducir la corriente sin depender de las dimensiones del dispositivo [23]. Además, por la escala de tamaño en la que se conciben los nanodispositivos (en el intervalo de 1 nm a 1  $\mu\text{m}$ ) el transporte puede ser balístico y sensible a las condiciones de frontera, ya que estas dimensiones son menores que las longitudes características de la dispersión [24] y a que la topología provee protección ante el desorden [25].

La consideración y aprovechamiento de los materiales topológicos es esencial en la miniaturización de los componentes electrónicos, pues podemos incrementar la funcionalidad de estos sin aumentar su tamaño [22].

El presente trabajo se organiza de la siguiente manera: en la Parte I se describirán y compararán dos modelos de amarre fuerte a bajas energías reportados en la literatura. Estos se utilizarán para explorar la estructura electrónica de bismuto con el cálculo de la estructura de bandas para el bulto y para un prisma hexagonal periódico en  $z$  y el cálculo de la densidad de probabilidad de los estados en los sitios de la estructura hexagonal. Posteriormente, en la parte II, se introducirán los elementos teóricos relevantes para el transporte electrónico en nanoestructuras. Luego, se presentarán los resultados de conductancia de los dos dispositivos propuestos. Al final, se presentarán las conclusiones y perspectivas de este trabajo.

# 2

## Objetivos

El objetivo general del proyecto es modelar las propiedades electrónicas de transporte en nanoestructuras de bismuto y controlar los estados de borde que se propagan en las aristas de un prisma hexagonal de este material, lo cual es relevante debido a la reciente clasificación del bismuto como aislante topológico de orden superior. Lo anterior se realizará mediante el armado de dispositivos con dos y tres contactos.

Dentro de los objetivos particulares, está contemplado:

1. Caracterizar el espectro electrónico del bulto de bismuto mediante un Hamiltoniano de amarre fuerte que reproduce los estados conductores de borde que se presentan en el material y comparar con uno de los modelos teóricos previamente propuestos.
2. Caracterizar el espectro electrónico de un prisma hexagonal de bismuto periódico en  $z$  mediante ambos modelos.
3. Modelar un dispositivo electrónico de dos contactos donde el canal de conducción sea un prisma hexagonal de bismuto.
4. Modelar el dispositivo previo añadiendo un tercer contacto lateralmente.

# Parte I

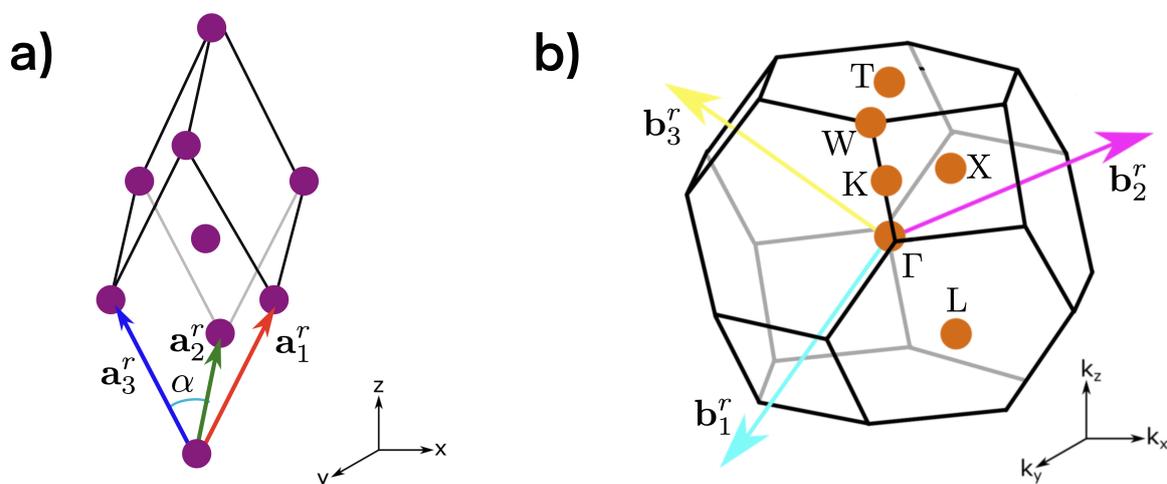
**Estructura electrónica de Bi**

## Geometría de bismuto

### 3.1. Estructura cristalina de bismuto

#### 3.1.1. Espacio Real

El bismuto (Bi) es un elemento químico que, junto con arsénico (As) y antimonio (Sb), conforman los semimetales del grupo V en la tabla periódica. Típicamente, estos elementos presentan el mismo arreglo cristalino, el cual consiste de una celda unitaria romboédrica que contiene dos átomos [26], cada uno de ellos con tres primeros vecinos y tres segundos vecinos [27], como se señala en la Fig. 3.1 a).



**Figura 3.1:** a) Celda romboédrica de bismuto en el espacio real, con los vectores de red  $\mathbf{a}_n^r$  ( $n = 1, 2, 3$ ). b) Primera zona de Brillouin de la estructura romboédrica del Bi, con los vectores  $\mathbf{b}_n^r$  y los puntos de alta simetría (naranja).

La estructura romboédrica de bismuto se esquematiza en la Fig. 3.1 (a), donde los vectores de la red en el espacio real son:

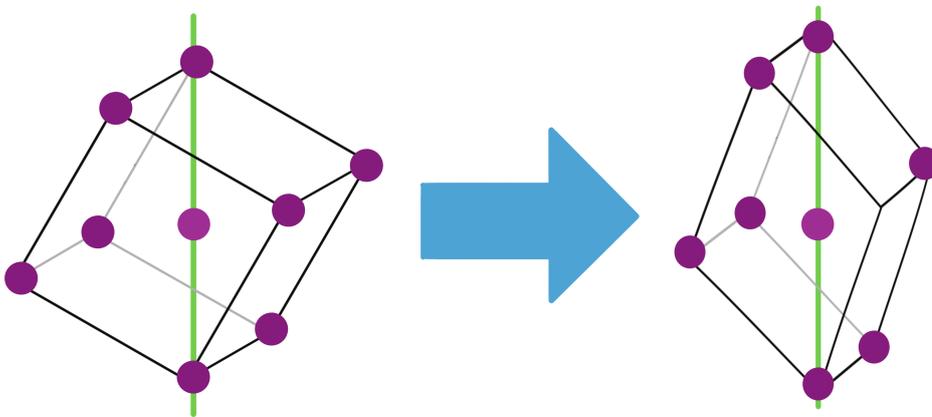
$$\mathbf{a}_1^r = \left( -\frac{1}{2}a, -\frac{\sqrt{3}}{6}a, \frac{1}{3}c \right) \quad \mathbf{a}_2^r = \left( \frac{1}{2}a, -\frac{\sqrt{3}}{6}a, \frac{1}{3}c \right) \quad \mathbf{a}_3^r = \left( 0, -\frac{\sqrt{3}}{3}a, \frac{1}{3}c \right) \quad (3.1)$$

siendo  $a = 4.5332 \text{ \AA}$ ,  $c = 11.7967 \text{ \AA}$  y  $\alpha = 57^\circ 19'$  [28].

El grupo espacial de la estructura cristalina es  $R\bar{3}m$  y su grupo puntual es el  $D_{3d}$ . Por lo tanto, las operaciones de simetría espacial que caracterizan este arreglo cristalino son [29]:

- la identidad ( $\hat{E}$ ),
- la inversión ( $\hat{I}$ ),
- las rotaciones de  $120^\circ$  ( $\hat{C}_3$ ) respecto el eje  $z$  y  $180^\circ$  ( $\hat{C}_2$ ) respecto el eje  $y$  y
- los planos de reflexión  $\mathcal{M}_a$ ,  $\mathcal{M}_b$  y  $\mathcal{M}_c$ , perpendiculares al eje de rotación  $\hat{C}_2$ .

La estructura romboédrica se asemeja a una estructura cúbica centrada en el cuerpo deformada a través de un estiramiento a lo largo de una de las diagonales del sistema con un desplazamiento relativo de los átomos [30], como se esquematiza en la Fig. 3.2.



**Figura 3.2:** Estructura romboédrica obtenida a través del estiramiento de una estructura cúbica.

Es importante considerar que hay una estrecha relación entre las estructuras romboédricas (que son sistemas trigonales) y los sistemas hexagonales, pues por su simetría espacial un sistema descrito por una celda romboédrica puede representarse como una celda hexagonal [31], como se observa en la Fig. 3.3 a).

### 3.1.2. Espacio Recíproco

La primera zona de Brillouin (1ZB) para la celda romboédrica tiene la forma de una octaedro truncado, el cual se esquematiza en la Fig. 3.1 b). Los vectores de la red recíproca son:

$$\mathbf{b}_1^r = \left( -1, -\frac{\sqrt{3}}{3}, b \right) g \quad \mathbf{b}_2^r = \left( 1, -\frac{\sqrt{3}}{3}, b \right) g \quad \mathbf{b}_3^r = \left( 0, -2\frac{\sqrt{3}}{3}, b \right) g \quad (3.2)$$

donde  $b = a/c$  y  $g = 1.3861 \text{ \AA}^{-1}$ . Las coordenadas relativas de algunos puntos de alta simetría en esta 1ZB son:

$$\begin{aligned} \Gamma &= (0, 0, 0) & K &= \left(0, \left(\frac{3}{4} - \frac{1}{2}h\right), \left(\frac{1}{2}h + \frac{1}{4}\right)\right) & X &= \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\ W &= \left(h, 1 - h, \frac{1}{2}\right) & T &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) & L &= \left(0, \frac{1}{2}, 0\right) \\ \Lambda &= (0, 0, 0) \end{aligned}$$

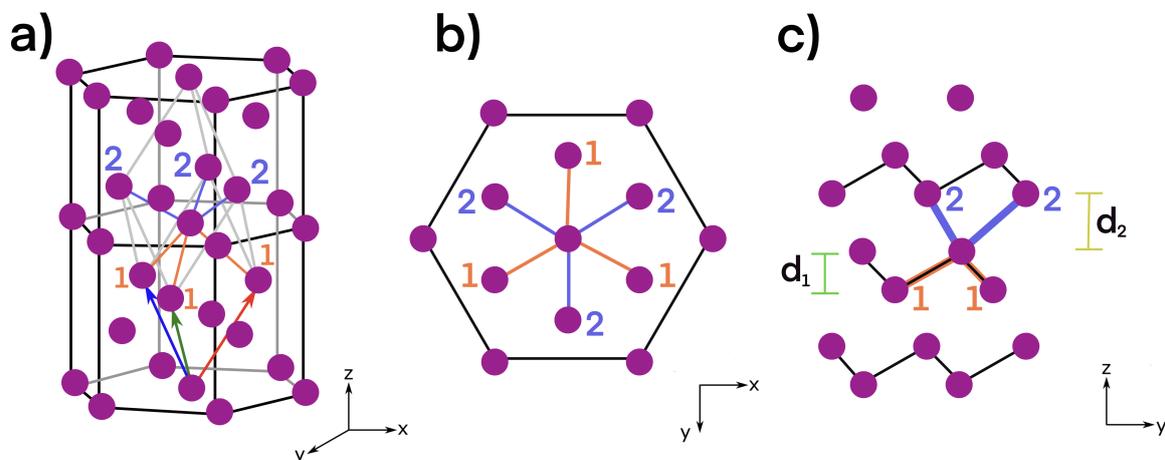
donde  $h = 0.2303$  en el caso de bismuto [26].

### 3.1.3. Bi (111)

Otra manera de visualizar la disposición espacial de los átomos en el bulto de bismuto es considerando la red como un apilamiento de bicapas que crece en la dirección (111). En cada una de estas bicapas, los átomos de bismuto forman 3 enlaces  $\sigma$  con sus vecinos más cercanos en una geometría de pirámide trigonal. Al proyectar en el plano (111), las bicapas forman una red hexagonal con dos átomos por celda unitaria. Por lo tanto, los 3 parámetros relevantes para definir la red son [32] (ver Fig.3.3):

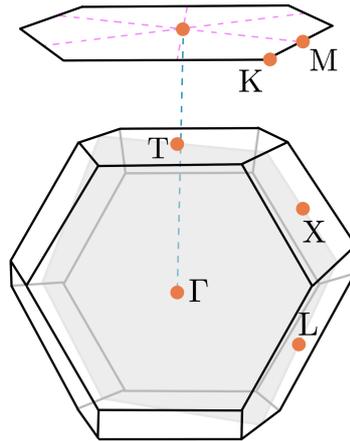
- La constante de red  $a$  (misma utilizada en la ec. (3.1)).
- La altura de las bicapas  $d_1 = 3.0624 \text{ \AA}$  (relacionada al ángulo intra-bicapa  $\alpha$  en la celda romboédrica).
- La distancia de separación entre 2 bicapas  $d_2 = 3.5120 \text{ \AA}$ .

La superficie de Bi (111) no se reconstruye [27, 33]. Por lo tanto, los átomos en esta zona mantienen la misma disposición en el espacio que aquellos en el bulto.



**Figura 3.3:** a) Celda romboédrica y hexagonal para bismuto, indicando primeros (naranja) y segundos (morado) vecinos del átomo central. b) Vista desde arriba de la celda hexagonal. c) Vista lateral de la celda hexagonal, donde se identifican los parámetros de las bicapas  $d_1$  (verde) y  $d_2$  (amarillo).

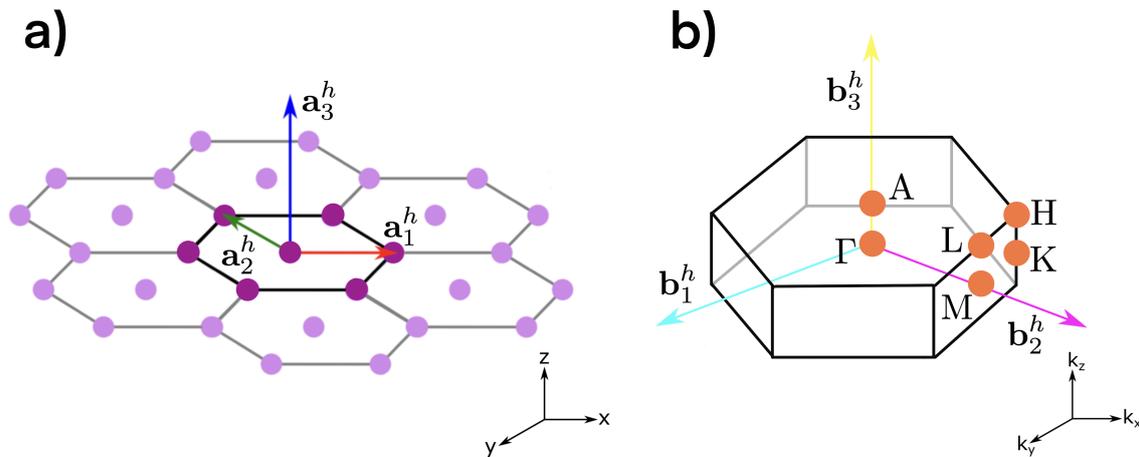
La 1ZB de la estructura romboédrica está contenida en la 1ZB de la celda hexagonal debido a la relación estrecha antes mencionada. Esto puede visualizarse esquemáticamente en la Fig. 3.4.



**Figura 3.4:** La 1ZB de la estructura romboédrica está contenida en la 1ZB de la celda hexagonal debido a que la primera puede generalizarse en la segunda.

## 3.2. Estructura cristalina para el modelo topológico

En el modelo topológico de bismuto [14] que reproduce los estados conductores de borde en una nanoestructura (el cual se presentará en el siguiente capítulo), se considera una estructura como la que se esquematiza en la Fig. 3.5.



**Figura 3.5:** a) Estructura de la celda unitaria para el Hamiltoniano topológico de bismuto en el espacio real y b) recíproco. Los vectores de la red real están etiquetados por  $\mathbf{a}_n^h$  y los de la red recíproca por  $\mathbf{b}_n^h$  ( $n = 1, 2, 3$ ).

Este sistema consiste de una red hexagonal simple que preserva las simetrías espaciales de la red de bismuto, por lo que a partir de esta se puede construir un Hamiltoniano de amarre fuerte que presenta la misma topología que un Hamiltoniano construido para el bulto de bismuto [14]. Los vectores de esta red hexagonal en el espacio real son:

$$\mathbf{a}_1^h = (a, 0, 0) \quad \mathbf{a}_2^h = \left( -\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a, 0 \right) \quad \mathbf{a}_3^h = (0, 0, c) \quad (3.3)$$

Ya que esta estructura cristalina consiste de una celda hexagonal en el espacio real, la 1ZB en el espacio recíproco también consiste de una celda hexagonal. Además, las coordenadas relativas de algunos de los puntos de alta simetría en ella son:

$$\begin{aligned} \Gamma &= (0, 0, 0) & M &= \left( \frac{1}{2}, 0, 0 \right) & K &= \left( \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0 \right) \\ A &= \left( 0, 0, \frac{1}{2} \right) & L &= \left( \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right) & H &= \left( \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} \right). \end{aligned}$$

# 4

## Hamiltoniano de amarre fuerte para bismuto

Siendo el objetivo de este trabajo la exploración las propiedades electrónicas y de transporte de los estados topológicos, partir de un modelo que reproduzca únicamente los estados de arista en el Bi brinda la posibilidad de lidiar únicamente con los estados de interés y no con todos los estados del bulto, simplificando así el cálculo de propiedades en dichos estados. Recientemente, se propuso un Hamiltoniano de amarre fuerte [14] que provee la posibilidad de realizar este análisis. En esta sección se realiza una comparación de este modelo con un Hamiltoniano de amarre fuerte propuesto previamente [28], el cual reproduce el carácter semimetálico del bismuto.

### 4.1. Modelo previo: bismuto como semimetal

#### 4.1.1. Características

En el año de 1995, Y. Liu y R. E. Allen desarrollaron un modelo de amarre fuerte [28] para la celda romboédrica de bismuto. En este modelo los parámetros están ajustados para que las bandas coincidan con las obtenidas experimentalmente alrededor del nivel de Fermi.

Este Hamiltoniano incluye interacciones a primeros, segundos y terceros vecinos. La interacción a segundos vecinos es importante pues satisface los requerimientos de simetría de la estructura romboédrica y, además,  $d_1$  y  $d_2$  tienen valores muy cercanos. En el caso de los terceros vecinos, su consideración facilita reproducir la brecha de banda negativa e indirecta característica del bismuto. Asimismo, este Hamiltoniano considera el acoplamiento espín-orbita modulado a través el parámetro  $\lambda$ .

Recordando que la configuración electrónica del bismuto es:



para describir fenómenos a bajas energías, el modelo de Liu y Allen considera únicamente los orbitales de valencia  $6s$  y  $6p$  para cada uno de los 2 sitios de la celda primitiva, pues

estos presentan una fuerte hibridación. Además, no considera los electrones en los orbitales  $5d$ , pues esta capa está llena. Por lo tanto, la base de este Hamiltoniano es  $|si\rangle$ ,  $|p_xi\rangle$ ,  $|p_yi\rangle$  y  $|p_zi\rangle$ , cada uno con 2 estados de espín, donde  $i = 1, 2$  es el índice del sitio, resultando en un modelo de 16 bandas.

### 4.1.2. Expresión analítica

La expresión matricial de este Hamiltoniano es:

$$H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{11}(\mathbf{k}) & H_{12}(\mathbf{k}) \\ H_{21}(\mathbf{k}) & H_{22}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

donde  $H_{11} = H_{22}$  y  $H_{12} = H_{21}^\dagger$ , siendo cada una de estas una matriz de  $8 \times 8$ . Se exhorta al lector a dirigirse al Apéndice A donde se hace una revisión detallada de los elementos de esta matriz.

## 4.2. Modelo topológico: superficie de bismuto con simetrías representativas

### 4.2.1. Características

El bismuto es un semimetal en el bulto debido a que la banda de valencia y la banda de conducción se tocan en el punto  $L$  (ver Fig. 5.1). Recientemente, en el año 2018, Schindler y colaboradores calcularon la estructura electrónica a primeros principios del bulto de bismuto y obtuvieron una brecha energética directa entre la banda de conducción y la de valencia en cada punto del espacio  $k$ . Debido a la presencia de esta brecha, pudieron analizar la estructura electrónica del bismuto en el esquema de la Química Cuántica Topológica [34] (la cual se basa en el paradigma de la Representación de Bandas [35]), y confirmaron el carácter de aislante topológico de orden superior (HOTI) de este material. Finalmente, propusieron un Hamiltoniano de amarre fuerte topológicamente equivalente al modelo realista de bismuto propuesto por Liu y Allen. Este nuevo modelo facilita la identificación de los estados de borde pues no contienen los estados del bulto semimetálico. Además, al únicamente considerar 8 orbitales por celda unitaria, las simulaciones de sistemas tridimensionales grandes son computacionalmente realizables.

Este modelo de amarre está en términos de los orbitales  $p$  y  $d$  para el único sitio en la celda. La base de este Hamiltoniano es  $|p_x\rangle$ ,  $|p_y\rangle$ ,  $|d_{xy}\rangle$  y  $|d_{x^2-y^2}\rangle$ , cada uno con 2 estados de espín. Éste es un modelo de 8 bandas en el que se preservan las simetrías:  $TRS$ ,  $\hat{C}_3$  e  $\hat{I}$ . Es importante recalcar que solo los estados de arista (topológicos) en este material están protegidos por estas simetrías.

### 4.2.2. Expresión analítica

La expresión matricial de este Hamiltoniano es:

$$H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{\text{TB},I}(\mathbf{k}) + \epsilon I & \delta M_{\text{TB}}(\mathbf{k}) \\ \delta M_{\text{TB}}(\mathbf{k})^\dagger & H_{\text{TB},II}(\mathbf{k}) - \epsilon I \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

donde las matrices  $H_{\text{TB},I}(\mathbf{k})$ ,  $H_{\text{TB},II}(\mathbf{k})$  y  $M_{\text{TB}}(\mathbf{k})$  son matrices de 4x4. Sus respectivas expresiones pueden encontrarse desarrolladas en el Apéndice B.

## Metodología y Resultados

En los cálculos de estructura electrónica, se utilizó la biblioteca PythTB [36]. Utilizando las expresiones analíticas reportadas de los dos Hamiltonianos de amarre fuerte a explorar ( $H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k})$  y  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ ) se ingresaron las respectivas expresiones en el código. Con ello, se calculó la estructura de bandas para el bulto a lo largo de 100 puntos en el espacio recíproco siguiendo las trayectorias  $\text{K} - \Gamma - \text{T} - \text{W} - \text{L} - \Lambda$  con el Hamiltoniano de Liu (ver Fig. 5.1) y  $\Gamma - \text{M} - \text{K} - \Gamma - \text{A} - \text{L} - \text{H} - \text{A}$  para el Hamiltoniano de Schindler (ver Fig. 5.2), siendo estas trayectorias diferentes debido a que no se parte de la misma celda unitaria en cada modelo.

Posteriormente, se exportó la información de las integrales de salto en el bulto para su lectura con la librería KWANT [37], la cual facilitará los posteriores cálculos de transporte electrónico. En KWANT, se construyó un sistema hexagonal con 18 sitios a lo largo de cada lado y periódico en  $k_z$ , como se esquematiza en la Fig. 5.3. Con ello, se calculó la estructura de bandas y la densidad de probabilidad de los estados electrónicos por cada sitio a una energía  $E = 0.025$  eV, por encima de la energía de Fermi.

### 5.1. Estructura de bandas para sistema infinito (bulto)

Primero, se comparan las estructuras de bandas para el bulto obtenidas con el  $H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k})$  y con el  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ : la primera diferencia notable es que en el caso del  $H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k})$  se tiene un semimetal y en el segundo ( $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ ) un aislante. La estructura de bandas obtenida con  $H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k})$  presenta una brecha de banda negativa e indirecta entre los puntos T y L, los cuales se observan en la Figura 5.1. Además, también se observa la aparición de un cono alrededor de L.

En el caso de la estructura de bandas obtenida mediante  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ , se identifica una brecha de bandas en toda la trayectoria seguida en el espacio recíproco. Cabe recalcar que, en la trayectoria de  $\Gamma - \text{A}$ , la cual ocurre sobre el eje  $k_z$ , se puede observar una dispersión que da la impresión de la futura aparición de un cono en esa dirección.

Es importante recordar que el  $H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k})$  está construido a manera de reproducir el carácter semimetálico del bulto de bismuto, mientras que el  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$  solo reproduce los estados de arista. Por lo tanto, los resultados obtenidos corresponden con los esperados para cada modelo, recalcando así que es más conveniente utilizar el  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$  para hacer únicamente la exploración de propiedades electrónicas en los estados de arista.

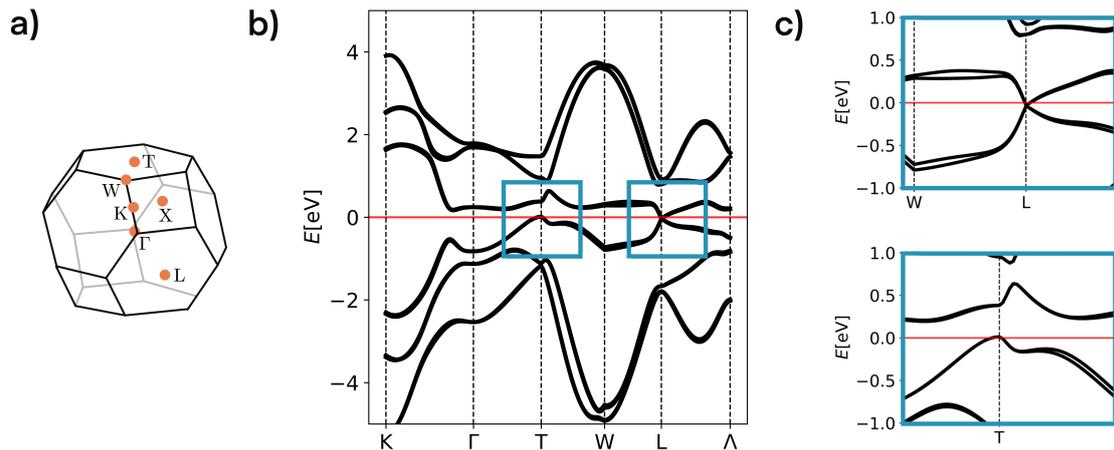


Figura 5.1: a) 1ZB con trayectoria en el espacio recíproco. b) Estructura de bandas para el bulto de  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$

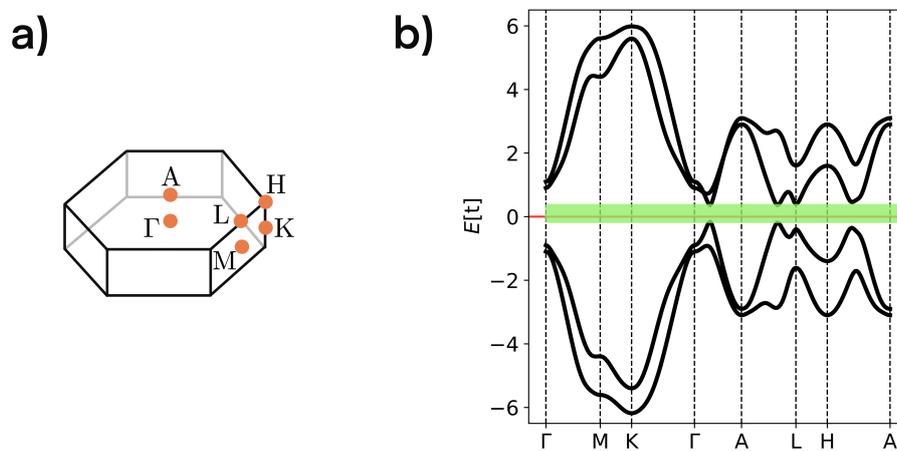
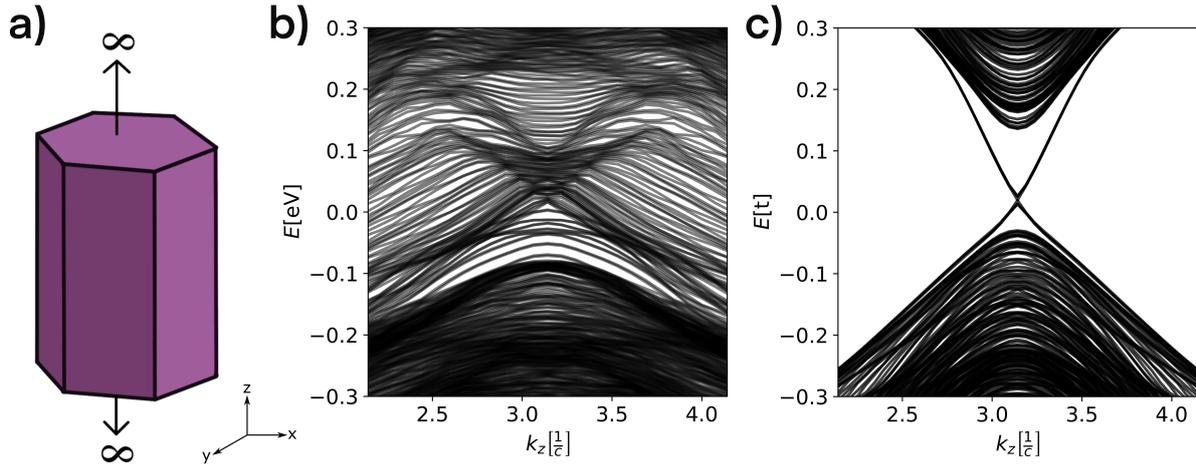


Figura 5.2: a) 1ZB con trayectoria en el espacio recíproco. b) Estructura de bandas para el bulto de  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$

## 5.2. Estructura de bandas para sistema hexagonal infinito (periódico en $k_z$ )

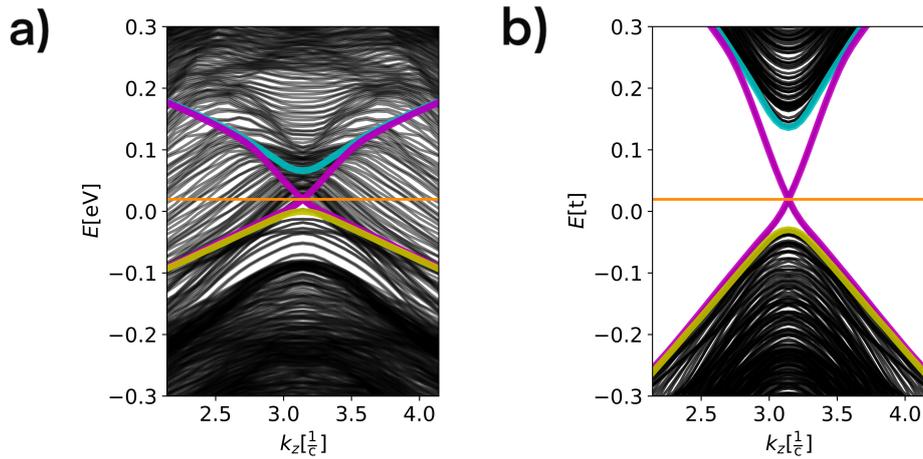
Para ver los estados de borde en un aislante topológico, es necesario delimitar el material. A continuación, se procede a revisar la estructura de bandas para una estructura hexagonal periódica únicamente en  $z$ .

En el caso del  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$  no es posible distinguir la aparición de estados de borde pues hay un gran número de bandas, las cuales representan los estados conductores del bulto. Sin embargo, utilizando el  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$ , se observa el cierre de la brecha energética del sistema, pues aparecen las bandas correspondientes a los estados de arista de la estructura hexagonal. Para identificar los estados de borde en la estructura de bandas obtenidas con  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$ , se sobreponen las bandas como se realiza en la Fig. 5.4. Aquí, se identifica una tendencia debido información de los estados de borde en el  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$ .



**Figura 5.3:** Geometría construida en paquetería KWANT, la cuál considera 18 sitios a lo largo de un lado del hexágono y estructura de bandas para la geometría 5.3, usando el  $H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k})$  y  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ .

Es necesario ajustar las bandas para que coincidan, lo que se justifica tomando en cuenta que ambas estructuras son periódicas en  $k_z$  pero hay diferencias en la escala de energías en la construcción del modelo de  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ .

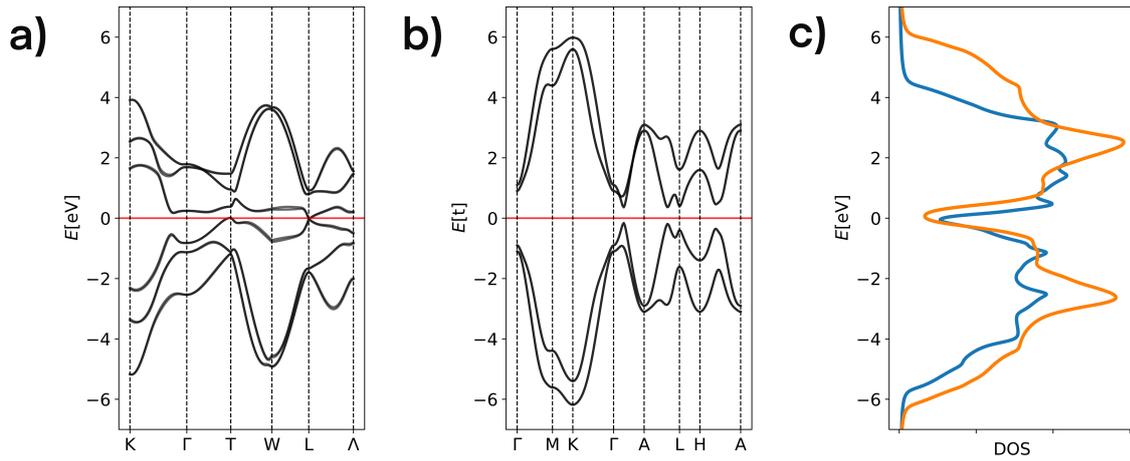


**Figura 5.4:** Estructura de bandas para prisma hexagonal periódico utilizando el a)  $H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k})$  y b)  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ . En a) se sobreponen las bandas correspondientes a los estados topológicos estiradas (magenta), lo que permite observar que coinciden con la forma de las bandas del  $H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k})$ .

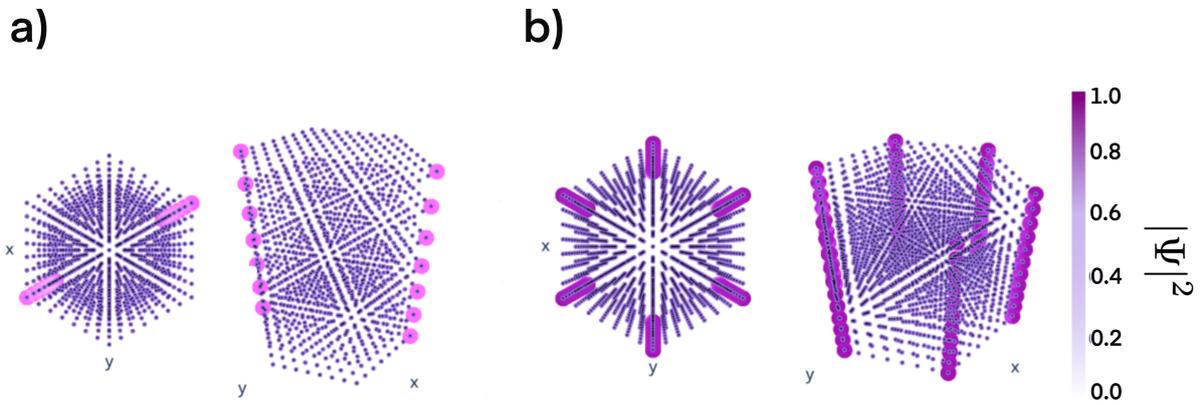
Esta diferencia en las bandas se puede visualizar en la densidad de estados (DOS) de la Fig. 5.5. Las energías del  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$  están en términos del parámetro  $t$ , pero haciendo coincidir la altura del cono obtenida con cada modelo (Fig. 5.4), se propone el parámetro de conversión:

$$0.4E[t] + 0.0112 = E[\text{eV}] \quad (5.1)$$

que permite hacer la conexión entre los modelos.



**Figura 5.5:** a) Estructura de bandas para el bulto obtenida con  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$ . b) Estructura de bandas del bulto obtenida con  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$ . c) DOS obtenida con  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$  (azul) y DOS obtenida con  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$



**Figura 5.6:** Vista desde arriba y lateral de la densidad de probabilidad en los sitios para las estructuras hexagonales calculada con el a)  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$  y con el b)  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$  en  $E = 0.025$  eV.

El cálculo de densidad de probabilidad con ambos modelos nos permite compararlos y afirmar que con el  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$  observamos una mayor localización de estados en los sitios que conforman los aristas de la estructura hexagonal, lo cual es esencial pues son estos los estados de interés para este trabajo. En cambio, con el  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$  no hay una localización significativa de la densidad de probabilidad en los sitios de los aristas. Con lo anterior se garantiza que el  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$  representa una opción viable para estudiar de forma exclusiva los estados de borde presentes en bismuto. Además, los cálculos para  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$  son computacionalmente menos demandantes que los cálculos realizados con  $H_{TB}^{Liu}(\mathbf{k})$ , reforzando la idea principal de que el uso del  $H_{TB}^{Schin}(\mathbf{k})$  es una alternativa adecuada para estudiar exclusivamente los estados de borde en nanoestructuras de bismuto.

# Parte II

## Transporte electrónico en nanoestructuras de Bi

## Transporte electrónico cuántico

En sistemas macroscópicos, el problema de transporte electrónico puede estudiarse haciendo uso de la Ley de Ohm, cuya expresión para un prisma con una sección transversal constante es:

$$V = IR \quad (6.1)$$

donde  $I$ , que es la corriente que atraviesa la muestra, y  $V$ , el voltaje, son proporcionales, siendo la constante de proporcionalidad la resistencia eléctrica  $R = \rho \frac{L}{A}$ , siendo  $\rho$  la resistividad,  $L$  la longitud y  $A$  el área perpendicular al paso de corriente. Su inversa,  $G = R^{-1}$ , se denomina conductancia eléctrica [22]. En estos sistemas la conductancia depende del tamaño del área perpendicular al paso del corriente y la longitud del sistema [38].

Al abordar el estudio de este problema en sistemas del orden de nanómetros, la complejidad aumenta pues el transporte electrónico corresponde a un problema estadístico de partículas fuera del equilibrio [39].

### 6.1. Formalismo de Landauer-Büttiker

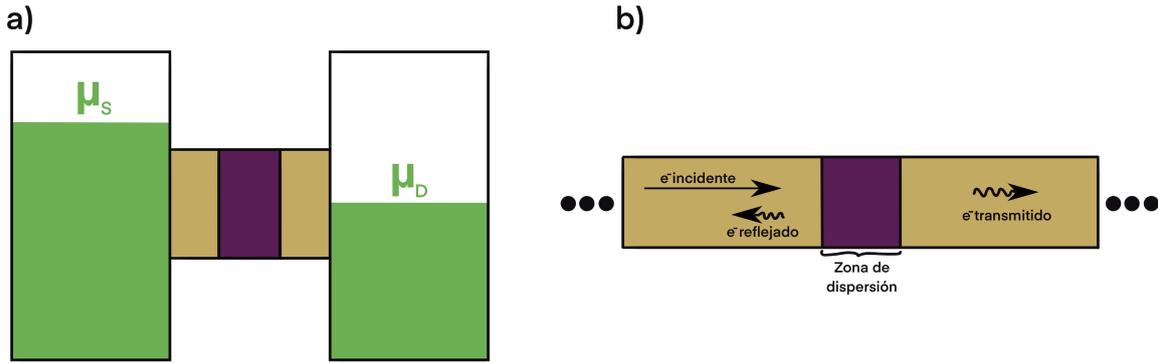
Una forma de abordar el problema del transporte electrónico cuántico es a través del formalismo de Landauer-Büttiker. Para ello, se plantea un nanodispositivo como el que se representa en la Fig. 6.1 a).

En este sistema, se considera que el canal está conectado a 2 contactos (source y drain), los cuales no presentan dispersión y se encuentran unidos a reservorios de electrones.

Los reservorios se describen en términos de la función de Fermi:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1}. \quad (6.2)$$

donde  $E$  es la energía,  $\mu$  el potencial químico,  $k$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura.



**Figura 6.1:** a) Nanodispositivo que consiste de 2 reservorios con diferentes potenciales químicos (verde) conectados por 2 contactos (amarillo) y un canal (morado). b) Nanoalambre cuántico (amarillo) con una región central que produce dispersión de los electrones, reflejando una parte y transmitiendo otra.

Ya que los reservorios tienen diferentes potenciales químicos  $\mu$  debido a la diferencia de voltaje aplicada, los electrones se moverán de un reservorio a otro [39].

Conforme los electrones viajan a través del nanoalambre, la región dispersora permite que se transmitan de un lado a otro con una probabilidad  $T$  [40]. En otras palabras, la transmisión es la tasa a la cual los electrones atraviesan la región dispersora. En el caso de diferencias pequeñas de voltaje (algunos meV), la transmisión se relaciona con la conductancia a través de:

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{n=1}^N T_n \quad (6.3)$$

Esto implica que, para calcular la conductancia de un sistema, es necesario resolver la ecuación de Schrödinger, encontrar los eigenestados de los electrones que fluyen, calcular cómo se transmiten a través de la región dispersora y sumar sus contribuciones. En este caso,  $T_n$  son transmisiones individuales y cada una contribuye  $\frac{e^2}{h} \approx 12.9 \text{ k}\Omega^{-1}$ . Además, para el caso cuántico, la conductancia  $G$  no depende la longitud del sistema [41]. Asimismo, bajo este formalismo la corriente eléctrica  $I$  se calcula a través de la expresión:

$$I = \frac{e}{h} \int dE T(E) [f(E - \mu_S) - f(E - \mu_D)] \quad (6.4)$$

donde  $S$  corresponde al source y  $D$  al drain.

Esta aproximación fue extendida a configuraciones con más de 2 contactos por Büttiker, donde la expresión de la corriente eléctrica entre el contacto  $a$  y el contacto  $b$  es [42]:

$$I_{ab} = \frac{e}{h} \sum_{a \neq b} T_{ab}(f_p - f_q). \quad (6.5)$$

Las funciones de distribución  $f_{a,b}$  de los contactos adicionales están determinadas por la condición de que la corriente total en estos reservorios es nula (son contactos de prueba). Aplicando la ecuación (6.5) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\sum_j T_{ab}(f_a - f_D) = T_{a,S}(f_S - f_D) \quad (6.6)$$

donde

$$T_{ab} \equiv \mathcal{R}_{ab}^{-1} \equiv \begin{cases} -T_{ab}, & a \neq b \\ \sum_{k \neq a} T_{ak}, & a = b \end{cases}. \quad (6.7)$$

y la corriente a través del nanosistema es:

$$I_D(E) = \frac{e}{h} T_{DS} + \sum T_{Da} \mathcal{R}_{ab} T_{bD}(f_S - f_D) \quad (6.8)$$

Es importante considerar que en la nanoescala, la adición de contactos de prueba genera un efecto de decoherencia de los electrones. Este efecto está relacionado a la pérdida de información, específicamente de la fase electrónica y sucede ya que el electrón, al ser absorbido y después reinyectado por el contacto virtual, adquiere una nueva fase electrónica.

## 6.2. Método de la matriz de dispersión

Para calcular el valor de la transmisión en el problema descrito en la sección anterior, se puede utilizar el método de la matriz de dispersión. En especial, este método es relevante para este trabajo pues es usado en la paquetería KWANT, con la cual se llevaron a cabo los cálculos de transporte electrónico.

A continuación, se presenta la resolución del problema de transporte electrónico unidimensional, esquematizado en la Fig. 6.1 b).

Conforme los electrones van de un reservorio a otro, pasan por una región de dispersión. En esta zona, una parte se refleja y otra se transmite por tunelaje. Este efecto puede abordarse como un problema de potenciales finitos, donde la región de dispersión representa una barrera de potencial arbitrario, como se esquematiza en la Fig. 6.2.

El potencial está dado por la expresión:

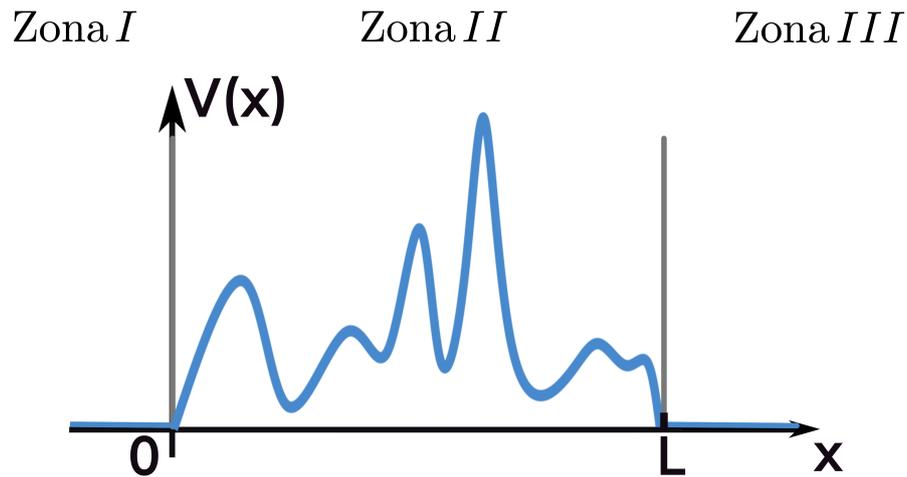


Figura 6.2: Representación de zonas de potencial en el sistema.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_n, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & x > L \end{cases} \quad (6.9)$$

siendo  $V_n$  un potencial arbitrario.

Ya que la ecuación de Schrödinger estacionaria para una partícula en 1D es:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi \quad (6.10)$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi = E\psi \quad (6.11)$$

Podemos plantear su forma en cada una de las regiones del problema:

- Zona I ( $V(x) = 0$ ):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \psi_I(x) = E\psi_I(x) \quad (6.12)$$

- Zona II ( $V(x) = V_n$ )

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_n \right] \psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \quad (6.13)$$

- Zona III ( $V(x) = 0$ )

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \psi_{III}(x) = E\psi_{III}(x) \quad (6.14)$$

con las soluciones  $\psi_I(x)$ ,  $\psi_{II}(x)$  y  $\psi_{III}(x)$  que satisfacen las ecuaciones diferenciales. La forma de las funciones de onda para las regiones  $I$  y  $II$  corresponden a la solución de onda plana definida para la partícula libre:

$$\psi_I(x) = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x} \quad (6.15)$$

$$\psi_{II}(x) = a_3 e^{ik_3 x} + b_3 e^{-ik_3 x} \quad (6.16)$$

donde  $k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$ . Se manipulan estas expresiones considerando el término  $a_1 = 1$ , pues la onda incidente llega a la región dispersora con esa amplitud, y  $b_3 e^{-ik_3 x} = 0$  debido a que la onda incidente atraviesa el potencial desde el lado izquierdo hacia el derecho.

En el caso de la Zona  $II$ , al ser el potencial arbitrario, es posible resolver el problema a través de una discretización de la función de onda  $\psi_{II}(x)$  [43] en esa región con el método de diferencias finitas.

### 6.2.1. Método de diferencias finitas

En este método, la función de onda  $\psi_{II}(x)$  se considera un vector y se introduce una malla discreta de puntos en los que se evalúa:

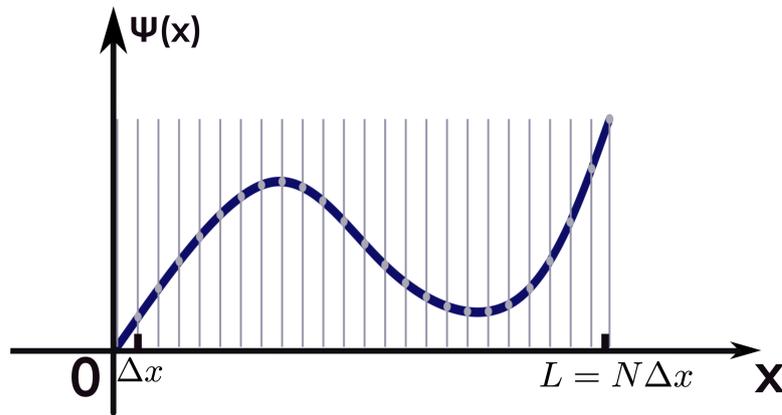


Figura 6.3: Discretización de la función de onda  $\psi_{II}(x)$ .

$$\psi_{II} = \{\psi_{II}(0), \psi_{II}(\Delta x), \psi_{II}(2\Delta x), \dots, \psi_{II}(N\Delta x)\} \quad (6.17)$$

$$= \{\psi_{II}^0, \psi_{II}^1, \psi_{II}^2, \dots, \psi_{II}^N\} \quad (6.18)$$

donde  $N$  es el tamaño de la malla. Si realizamos una expansión de Taylor de la función de onda obtenemos:

$$\psi_{II}(x + \Delta x) = \psi_{II}(x) \pm \Delta x \psi'_{II}(x) + \frac{1}{2} \Delta x^2 \psi''_{II}(x) + \dots \quad (6.19)$$

$$(6.20)$$

despejando la primera derivada de la función de onda,  $\psi'_{II}(x)$ , esta tiene la forma:

$$\psi'_{II}(x) = \frac{\psi_{II}(x + \Delta x) - \psi_{II}(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \dots \quad (6.21)$$

$$(6.22)$$

Con la expresión anterior, se calcula la segunda derivada  $\psi''_{II}(x)$

$$\psi''_{II}(x) = \frac{\psi_{II}(x + \Delta x) - 2\psi_{II}(x) + \psi_{II}(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \dots \quad (6.23)$$

La expresión de  $\psi''_{II}(x)$  se sustituye en la ecuación (6.10), y en consecuencia, el problema se discretiza, transformando el operador diferencial  $\hat{H}$  en la matriz  $\mathcal{H}$ . Además, la resolución de la ecuación de Schrödinger pasa a ser problema de ecuaciones lineales, como se muestra a continuación:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_n \right] \psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \quad (6.24)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''_{II}(x) + V_n \psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \quad (6.25)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\psi_{II}(x + \Delta x) - 2\psi_{II}(x) + \psi_{II}(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \right] + V_n \psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \quad (6.26)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} [\psi_{II}(x + \Delta x) - 2\psi_{II}(x) + \psi_{II}(x - \Delta x)] + V_n \psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x) \quad (6.27)$$

$$(6.28)$$

Considerando  $\psi^n_{II} = \psi_{II}(x + n\Delta x)$  con  $n = 0, 1, 2, \dots, N$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} [\psi^n_{II} - 2\psi^n_{II} + \psi^{n-1}_{II}] + V_n \psi^n_{II} = E_n \psi^n_{II} \quad (6.29)$$

$$\mathcal{H}\psi^n_{II} = \mathcal{E}\psi^n_{II} \quad (6.30)$$

Se simplifica  $\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} = t$ , siendo  $t$  el parámetro de salto que posteriormente se considera  $t = 1$  pues se usa como la unidad de energía. Por las condiciones de frontera, se igualan a las soluciones de la Zona I a la Zona II y de la Zona II a la Zona III, donde las soluciones tienen la forma:

- Frontera Zona I - Zona II:

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}^0 \\ \psi_{II}^0 &= e^{ik_1} + b_1 e^{-ik_1} \end{aligned} \quad (6.31)$$

- Frontera Zona II - Zona III:

$$\begin{aligned} \psi_{II}^N &= \psi_{III}(N) \\ \psi_{II}^N &= a_3 e^{ik_3 L} \end{aligned} \quad (6.32)$$

Mientras que, en cualquier punto  $p$  dentro de la región dispersora ( $0 < p < N$ ), la expresión (6.29) toma la forma:

$$\begin{aligned} -\psi_{II}^{p+1} + 2\psi_{II}^p - \psi_{II}^{p-1} - V_n\psi_{II}^p &= E\psi_{II}^p \\ -\psi_{II}^{p+1} + (2 - V_n - E)\psi_{II}^p - \psi_{II}^{p-1} &= 0 \\ -\psi_{II}^{p+1} + (E - V'_n)\psi_{II}^p - \psi_{II}^{p-1} &= 0 \end{aligned} \quad (6.33)$$

Las ecuaciones a resolver en cada punto de la región dispersora tienen la forma:

$$n = 0 \quad b_1 e^{-ik_1} - \psi_{II}^1 = e^{ik_1} \quad (6.34)$$

$$n = 1 \quad b_1 + (E - V'_1)\psi_{II}^1 + \psi_{II}^2 = -1 \quad (6.35)$$

$\vdots$

$$n = N \quad \psi_{II}^{N-1} + (E - V'_N)\psi_{II}^N + a_3 e^{ik_3(N+1)} = 0 \quad (6.36)$$

$$n = N + 1 \quad \psi_{II}^N - a_3 e^{ik_3 N} = 0 \quad (6.37)$$

Este sistema de ecuaciones tiene la forma matricial:

$$\begin{pmatrix} e^{ik_1} & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 1 & E - V'_1 & 1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 1 & E - V'_2 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & 0 & 1 & E - V'_N & e^{ik_3(N+1)} \\ \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & -e^{ik_3 N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ \psi_{II}^1 \\ \psi_{II}^2 \\ \dots \\ \psi_{II}^N \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -e^{ik} \\ -1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.38)$$

Las amplitudes  $b_1$  y  $a_3$  se renombran como  $R_f$  para hacer referencia a la amplitud de la onda reflejada y  $T_r$  para la amplitud de la onda transmitida. Además, este análisis puede repetirse para electrones ingresando desde el lado derecho (los cuales se reflejan con una amplitud  $R'_f$  y se transmiten con una amplitud  $T'_r$ ). Con ello, se obtiene la matriz de dispersión  $\mathcal{S}$  completa:

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} R_f & T_r \\ T'_r & R'_f \end{pmatrix} \quad (6.39)$$

### 6.2.2. Cálculo de la corriente $I$ a través de la matriz $\mathcal{S}$

La densidad de corriente de una partícula asociada a una función de onda tiene la forma:

$$I(x) = i \frac{\hbar}{2m} \left[ \Psi^*(x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) - \Psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x) \right] \quad (6.40)$$

O, en su forma discreta,

$$I_n = i \frac{1}{\hbar} [\Psi_n^* \Psi_{n+1} - \Psi_{n+1}^* \Psi_n] \quad (6.41)$$

Para una onda plana  $\Psi_n = e^{ikn}$ , se obtiene

$$I_n = i \frac{1}{\hbar} [e^{ik} - e^{-ik}] = \frac{1}{\hbar} v_k \quad (6.42)$$

donde  $v_k \equiv \frac{\partial}{\partial k} E(k)$ . Mientras que, para un estado dispersado  $\Psi_n = e^{ikn} + R_f e^{-ikn}$ :

$$I_n = v_k [1 - |R_f|^2] \quad (6.43)$$

La conservación de corriente implica que  $1 - |R_f|^2 = |T_r|^2 = |T_r'|^2 = 1 - |R_f'|^2$ , o sea, que la matriz de dispersión  $\mathcal{S}$  debe ser unitaria:  $\mathcal{S} = \mathcal{S}^\dagger$ .

Para obtener la corriente se debe hacer un llenado de los estados hasta el nivel de Fermi:

$$I = \frac{e}{\hbar} \int \frac{dk}{2\pi} [v_k [1 - |R_f|^2] f_{\text{contacto}}] \quad (6.44)$$

que para el source y drain tiene la forma

$$f_S(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_S)/kT_S} + 1} \quad (6.45)$$

$$f_D(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_D)/kT_D} + 1} \quad (6.46)$$

En el ejemplo unidimensional, la velocidad  $\frac{dE}{dk}$  es la inversa de la densidad de estados  $\frac{dk}{dE}$ , por lo que la corriente es:

$$I = \frac{e}{\hbar} \int dE |T_r|^2 [f_S[E(k)] - f_D[E(k)]] \quad (6.47)$$

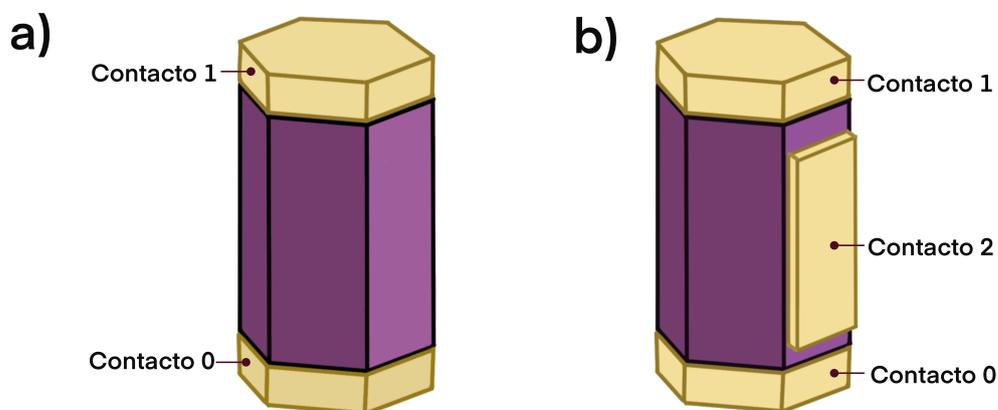
además, a  $T = 0$  y  $V \rightarrow 0$  se cumple:  $\mu_L = E_F + eV/2$ ,  $\mu_R = E_F - eV/2$ , por lo que la expresión se simplifica a la ecuación de Landauer mencionada anteriormente en la expresión (6.4):

$$I = \frac{e^2}{\hbar} |T_r(E_F)|^2 V \quad (6.48)$$

## Metodología y Resultados

Los cálculos de transporte electrónico en bismuto a bajas energías se realizaron utilizando el  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ . Con los parámetros de salto de este Hamiltoniano se construyó la geometría mostrada en la Figura 7.1 en la paquetería KWANT [37], la cual consiste de una base hexagonal con 18 sitios a lo largo de un lado. Se evaluó el transporte electrónico con los 2 contactos conectados a la nanoestructura de bismuto, utilizando el formalismo de Landauer-Büttiker revisado en el capítulo 6. En dicho formalismo, la cantidad clave a calcular es la probabilidad de transmisión, la cual se evaluó utilizando el método de la matriz de dispersión implementado en esta librería.

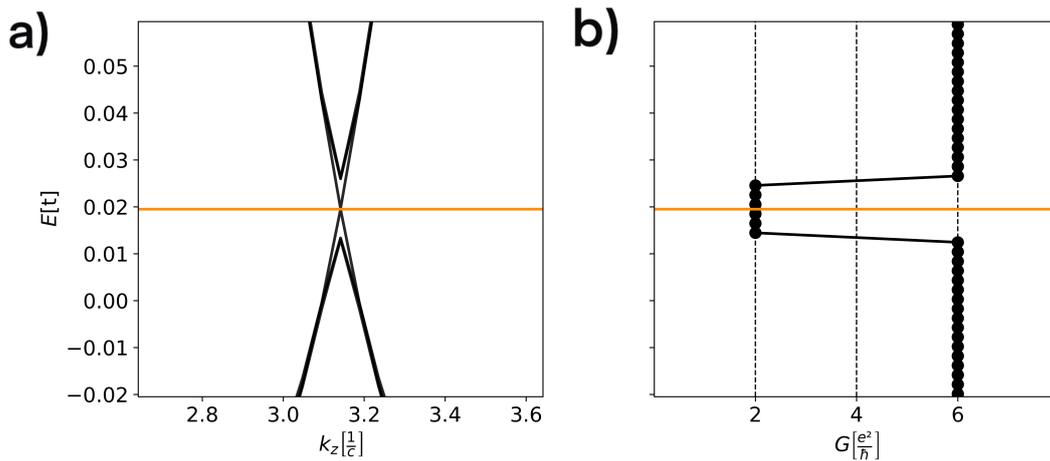
Posteriormente, se añadió un contacto lateral a una estructura hexagonal con 18 sitios a lo largo de un lado, como se esquematiza en la Fig. 7.1, para identificar cuál era el efecto de éste en los estados de arista responsables del transporte electrónico.



**Figura 7.1:** a) Dispositivo de bismuto con dos contactos y b) dispositivo de bismuto con tres contacto construidos en KWANT.

### 7.1. Dispositivo de Bi con dos contactos

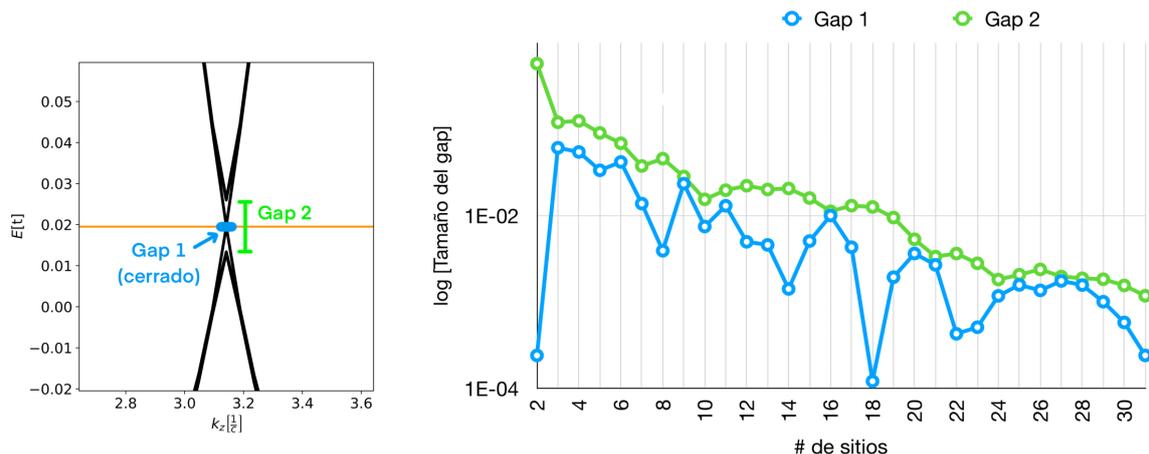
En este dispositivo se calcula la conductancia desde el contacto 0 al contacto 1 y se contruyó el gráfico presentado en la Fig. 7.2. A bajas energías, se observan únicamente



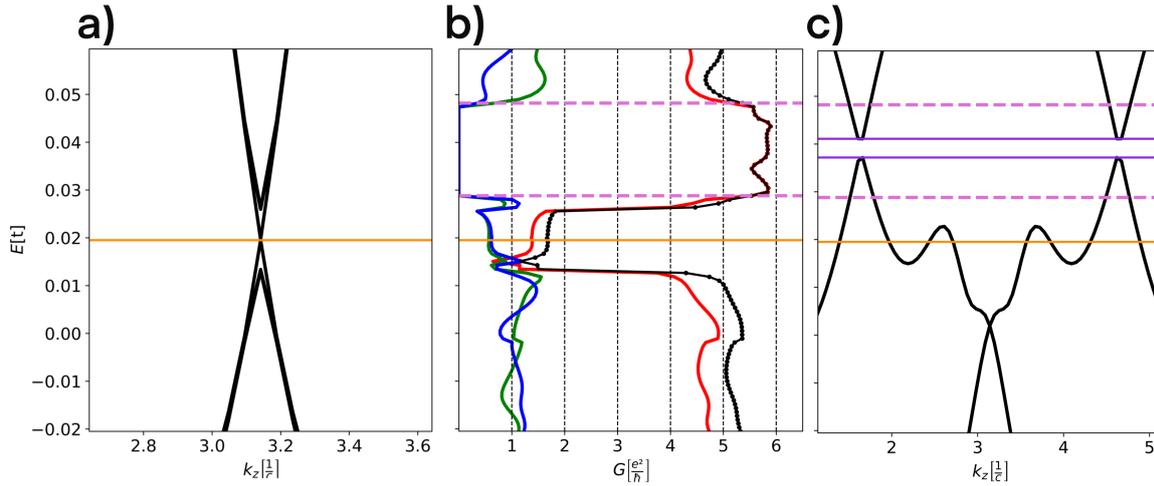
**Figura 7.2:** a) Estructura de bandas de contacto hexagonal, etiquetado por 0 y 1. En esta estructura, se identifica una brecha formada por las bandas que no están degeneradas. b) Cálculo de la conductancia del contacto 0 al contacto 1 utilizando la paquetería KWANT.

2 canales de conducción a pesar de que se esperaban 6 canales, uno por cada arista de la estructura hexagonal construida. A energías donde la degeneración de las 6 bandas se cumple, se obtienen los 6 canales de conductancia esperados para esta estructura.

Estudiando la dependencia de la brecha energética identificada en algunos de los estados topológicos, se encontró que esta se reduce conforme aumenta el número de sitios a lo largo de un lado (ver Fig. 7.3). Es decir, el ancho del dispositivo debe aumentar para tener las 6 bandas degeneradas, con los cálculos de conductancia pueden observarse solo 2 bandas formando el cono (cerrando el Gap 1), mientras que las otras 4 mantienen una brecha energética (el cual se denomina Gap 2).



**Figura 7.3:** Comportamiento del tamaño de la brecha para las bandas centrales que delimitan en Gap 1 (azul) y las bandas externas entre las cuales está el Gap 2 (verde).



**Figura 7.4:** a) Estructura de bandas para contacto hexagonal, etiquetado por 0 y 1. b) Resultados de transmisiones obtenidos con KWANT entre el contacto 0 y 1 (rojo), el contacto 0 y 2 (verde), el contacto (1 y 2) (azul) y la conductancia total calculada con la expresión (6.8). c) Estructura de bandas para contacto rectangular, etiquetado por 2.

## 7.2. Dispositivo de Bi con tres contactos

Nuevamente, en este dispositivo se calcula la conductancia desde el contacto 0 al contacto 1, con la diferencia de que se agrega un contacto 2 en una de las caras laterales del dispositivo. Por lo tanto, también se calcula la estructura de bandas de este contacto rectangular (ver Fig.7.4) para el análisis del transporte en este dispositivo.

Por debajo del cono, comenzando el análisis en el límite inferior de energía, se tienen 5 canales correspondientes al material, lo cual es diferente al caso del dispositivo anterior. Esto puede deberse a la geometría del dispositivo, específicamente a la dirección en la que el tercer contacto está adicionado, pues al crecer en la dirección de  $\mathbf{b}_2^h$  se pierde uno de los canales en la geometría hexagonal, y, en consecuencia, uno de los canales.

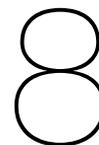
De estos 5 canales, cuatro de ellos van del contacto 0 directamente al contacto 1, mientras que el quinto canal va del contacto 0 al contacto 2, para luego reinyectarse y llegar al contacto 1. En este proceso se induce decoherencia en los electrones por el tercer contacto ya que éste solo está descrito por la función de Fermi y no almacena información de la fase del electrón.

A bajas energías, alrededor del cono se recuperan los dos canales observados en el primer dispositivo.

Por encima del cono, en el intervalo de energías  $0.028t < E < 0.047t$ , el tercer contacto presenta una brecha energética en su estructura de bandas, pues los estados de borde que están preservados por la simetría  $\hat{C}_3$  no aparecen debido a la forma rectangular del contacto, y en consecuencia la conductancia sucede de forma directa del contacto 0 al contacto 2 y se anula el efecto de decoherencia por ese contacto.

Finalmente, a energías  $E > 0.047t$  se recuperan los 5 canales de conductancia.

# Conclusiones



## Conclusiones

En la Parte I de este trabajo se modelaron de manera exitosa las propiedades electrónicas de transporte en nanoestructuras de bismuto pues se logró caracterizar la estructura electrónica del bismuto empleando dos modelos: uno para la naturaleza semimetálica del bulto y otro para los estados de borde topológicos localizados en los aristas de un prisma hexagonal de este material, actividades correspondientes a los primeros dos objetivos de este trabajo. El modelo que reproduce únicamente los estados topológicos,  $H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k})$ , representa una alternativa para el estudio de propiedades electrónicas en esos estados, debido a la diferencia en el tamaño de las expresiones analíticas de ambos modelos y, en consecuencia, el tiempo de cómputo para realizar los cálculos.

En la Parte II se estudiaron las propiedades electrónicas de transporte en una nanoestructura del mismo, pues se modelaron dos dispositivos electrónicos, uno con dos y otro con tres contactos, como se planteó en los objetivos 3 y 4 al inicio de este trabajo. Con la adición de dos contactos a una nanoestructura se confirmaron los 6 canales de conducción esperados en este material. A través de la adición de un tercer contacto, se logró remover uno de los canales de conducción y sintonizar la decoherencia electrónica de los estados de borde para un intervalo de  $\approx 20 t$  ( $0.028t < E < 0.047t$ ).

El bismuto es un sistema cuya complejidad se refleja en las expresiones de los modelos que lo describen. Por ende, es necesario un gran esfuerzo a la hora de trasladar estos modelos al código y su realización marca un precedente para el cálculo de nuevas propiedades electrónicas de transporte. Algunas alternativas para la futura exploración son la modificación de la geometría del tercer contacto o la construcción de dispositivos con más contactos.

# Referencias

- [1] Mercuri Kanatzidis, Hongzhe Sun y Stefanie Dehnen. "Bismuth-The Magic Element". en. En: *Inorg. Chem.* 59.6 (mar. de 2020), págs. 3341-3343. doi: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c00222>.
- [2] Pierre de Marcillac y col. "Experimental detection of  $\alpha$ -particles from the radioactive decay of natural bismuth". En: *Nature* 422.6934 (2003), págs. 876-878. doi: 10.1038/nature01541.
- [3] Hiroshi Tatewaki, Shigeyoshi Yamamoto y Yasuyo Hatano. "Relativistic Effects in the Electronic Structure of Atoms". en. En: *ACS Omega* 2.9 (sep. de 2017), págs. 6072-6080.
- [4] Lukáš Bučinský, Dylan Jayatilaka y Simon Grabowsky. "Importance of Relativistic Effects and Electron Correlation in Structure Factors and Electron Density of Diphenyl Mercury and Triphenyl Bismuth". en. En: *J. Phys. Chem. A* 120.33 (ago. de 2016), págs. 6650-6669.
- [5] S Ito y col. "Proving nontrivial topology of pure bismuth by quantum confinement". en. En: *Phys. Rev. Lett.* 117.23 (dic. de 2016), pág. 236402.
- [6] Frank Schindler y col. "Higher-order topological insulators". En: *Science Advances* 4.6 (2018), eaat0346.
- [7] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes y Shou-Cheng Zhang. "Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells". En: *Science* 314.5806 (2006), págs. 1757-1761. doi: 10.1126/science.1133734.
- [8] Markus König y col. "Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells". En: *Science* 318.5851 (2007), págs. 766-770.
- [9] M Z Hasan y C L Kane. "Colloquium: Topological insulators". En: *Rev. Mod. Phys.* 82.4 (nov. de 2010), págs. 3045-3067.
- [10] Cheng-Cheng Liu y col. "Weak Topological Insulators and Composite Weyl Semimetals:  $\beta$ -Bi<sub>4</sub>X<sub>4</sub> (X = Br, I)". En: *Phys. Rev. Lett.* 116 (6 feb. de 2016), pág. 066801. doi: 10.1103/PhysRevLett.116.066801.
- [11] Benjamin J. Wieder y col. "Topological materials discovery from crystal symmetry". En: *Nature Reviews Materials* 7.3 (2022), págs. 196-216.
- [12] Yoshiyuki Ohtsubo y col. "Non-trivial surface-band dispersion on Bi(111)". En: *New Journal of Physics* 15.3 (mar. de 2013), pág. 033041.
- [13] L. Perfetti y col. "New aspects of electronic excitations at the bismuth surface: Topology, thermalization and coupling to coherent phonons". En: *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* 201 (2015), págs. 60-65.

- [14] Frank Schindler y col. "Higher-Order Topology in Bismuth". en. En: *Nat. Phys.* 14.9 (sep. de 2018), págs. 918-924.
- [15] Ilya K. Drozdov y col. "One-dimensional topological edge states of bismuth bilayers". En: *Nature Physics* 10.9 (2014), págs. 664-669.
- [16] Chuan Li y col. "Magnetic field resistant quantum interferences in Josephson junctions based on bismuth nanowires". En: *Phys. Rev. B* 90 (24 dic. de 2014), pág. 245427. doi: 10.1103/PhysRevB.90.245427.
- [17] Anil Murani y col. "Ballistic edge states in Bismuth nanowires revealed by SQUID interferometry". En: *Nature Communications* 8.1 (2017), pág. 15941. doi: <https://doi.org/10.1038/ncomms15941>.
- [18] J. W. Wells y col. "Nondegenerate Metallic States on Bi(114): A One-Dimensional Topological Metal". En: *Phys. Rev. Lett.* 102 (9 mar. de 2009), pág. 096802. doi: 10.1103/PhysRevLett.102.096802.
- [19] A. Takayama y col. "One-Dimensional Edge States with Giant Spin Splitting in a Bismuth Thin Film". En: *Phys. Rev. Lett.* 114 (6 feb. de 2015), pág. 066402. doi: 10.1103/PhysRevLett.114.066402.
- [20] Shuichi Murakami. "Quantum Spin Hall Effect and Enhanced Magnetic Response by Spin-Orbit Coupling". En: *Phys. Rev. Lett.* 97 (23 dic. de 2006), pág. 236805. doi: 10.1103/PhysRevLett.97.236805.
- [21] F. Reis y col. "Bismuthene on a SiC substrate: A candidate for a high-temperature quantum spin Hall material". En: *Science* 357.6348 (2017), págs. 287-290. doi: 10.1126/science.aai8142.
- [22] Thomas Ihn. *Semiconductor Nanostructures: Quantum states and electronic transport*. en. London, England: Oxford University Press, 2010.
- [23] Andras Palyi, Janos K Asboth y Laszlo Oroszlany. *A short course on topological insulators: Band structure and edge states in one and two dimensions*. en. 1.<sup>a</sup> ed. Lecture notes in physics. Cham, Switzerland: Springer International Publishing, feb. de 2016.
- [24] David K Ferry, Stephen M Goodnick y Jonathan Bird. *Transport in Nanostructures*. 2nd Edition. Cambridge University Press, sep. de 2009.
- [25] Anil Murani y col. "Ballistic edge states in Bismuth nanowires revealed by SQUID interferometry". en. En: *Nat. Commun.* 8 (jul. de 2017), pág. 15941.
- [26] L M Falicov y Stuart Golin. "Electronic Band Structure of Arsenic. I. Pseudopotential Approach". En: *Phys. Rev.* 137.3A (feb. de 1965), A871-A882.
- [27] Ph. Hofmann. "The surfaces of bismuth: Structural and electronic properties". En: *Progress in Surface Science* 5 (2006), págs. 191-245. issn: 0079-6816. doi: <https://doi.org/10.1016/j.progsurf.2006.03.001>.
- [28] Yi Liu y Roland E. Allen. "Electronic structure of the semimetals Bi and Sb". En: *Phys. Rev. B* 52 (3 jul. de 1995), págs. 1566-1577. doi: 10.1103/PhysRevB.52.1566.

- [29] Chuang-Han Hsu y col. "Topology on a new facet of bismuth". en. En: *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 116.27 (jul. de 2019), págs. 13255-13259.
- [30] V S Édel'man. "Electrons in bismuth". En: *Adv. Phys.* 25.6 (nov. de 1976), págs. 555-613.
- [31] Frank Hoffmann. *Introduction to Crystallography*. 1.<sup>a</sup> ed. Cham, Switzerland: Springer Nature, ago. de 2020.
- [32] Zheng Liu y col. "Stable nontrivial Z<sub>2</sub> topology in ultrathin Bi (111) films: a first-principles study". En: *Phys. Rev. Lett.* 107.13 (sep. de 2011), pág. 136805.
- [33] G Jezequel y col. "Electronic structure of the Bi(111) surface". en. En: *Phys. Rev. B Condens. Matter* 33.6 (mar. de 1986), págs. 4352-4355.
- [34] Barry Bradlyn y col. "Topological quantum chemistry". En: *Nature* 547.7663 (2017), págs. 298-305. doi: 10.1038/nature23268.
- [35] Jennifer Cano y Barry Bradlyn. "Band Representations and Topological Quantum Chemistry". En: *Annual Review of Condensed Matter Physics* 12.1 (2021), págs. 225-246. doi: 10.1146/annurev-conmatphys-041720-124134. eprint: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-041720-124134>.
- [36] *Python Tight Binding (PythTB)*. 2016. url: <https://www.physics.rutgers.edu/pythtb/index.html>.
- [37] "Kwant: a software package for quantum transport". En: *New Journal of Physics* 16.6 (jun. de 2014), pág. 063065. doi: 10.1088/1367-2630/16/6/063065.
- [38] Supriyo Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. en. Cambridge, England: Cambridge University Press, jun. de 2005.
- [39] Massimiliano Di Ventra. *Electrical Transport in Nanoscale Systems*. Cambridge University Press, ago. de 2008.
- [40] Yoseph Imry y Rolf Landauer. "Conductance viewed as transmission". En: *Rev. Mod. Phys.* 71.2 (mar. de 1999), S306-S312.
- [41] Elke Scheer y Juan Carlos Cuevas. *Molecular electronics: An introduction to theory and experiment: An introduction to theory and experiment*. World Scientific Series in Nanoscience and Nanotechnology. Singapore, Singapore: World Scientific Publishing, ene. de 2010.
- [42] Thomas Stegmann. "Quantum transport in nanostructures From the effects of decoherence on localization to magnetotransport in two-dimensional electron systems". Tesis doct. Universität Duisburg-Essen, 2014.
- [43] Virtual Science Forum. *Quantum transport workshop: basic concepts*. Youtube. 2020. url: <https://youtu.be/BULVn-4B6eo>.



# Apéndice A: Desarrollo de expresiones del Hamiltoniano propuesto por Liu y Allen

El modelo del Hamiltoniano de 16 bandas de amarre fuerte del bismuto propuesto por Liu y Allen [28] es:

$$H_{\text{TB}}^{\text{Liu}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

donde  $H_{11} = H_{22}$  y  $H_{12} = H_{21}^\dagger$ .

Para implementar estas expresiones en el código de PythTB, los elementos de este Hamiltoniano de 16 bandas se etiquetaron de la forma:

$$H_{11} = \begin{pmatrix} H_{\text{TB}}[0,0] & H_{\text{TB}}[0,1] & H_{\text{TB}}[0,2] & H_{\text{TB}}[0,3] & H_{\text{TB}}[0,4] & H_{\text{TB}}[0,5] & H_{\text{TB}}[0,6] & H_{\text{TB}}[0,7] \\ H_{\text{TB}}[1,0] & H_{\text{TB}}[1,1] & H_{\text{TB}}[1,2] & H_{\text{TB}}[1,3] & H_{\text{TB}}[1,4] & H_{\text{TB}}[1,5] & H_{\text{TB}}[1,6] & H_{\text{TB}}[1,7] \\ H_{\text{TB}}[2,0] & H_{\text{TB}}[2,1] & H_{\text{TB}}[2,2] & H_{\text{TB}}[2,3] & H_{\text{TB}}[2,4] & H_{\text{TB}}[2,5] & H_{\text{TB}}[2,6] & H_{\text{TB}}[2,7] \\ H_{\text{TB}}[3,0] & H_{\text{TB}}[3,1] & H_{\text{TB}}[3,2] & H_{\text{TB}}[3,3] & H_{\text{TB}}[3,4] & H_{\text{TB}}[3,5] & H_{\text{TB}}[3,6] & H_{\text{TB}}[3,7] \\ H_{\text{TB}}[4,0] & H_{\text{TB}}[4,1] & H_{\text{TB}}[4,2] & H_{\text{TB}}[4,3] & H_{\text{TB}}[4,4] & H_{\text{TB}}[4,5] & H_{\text{TB}}[4,6] & H_{\text{TB}}[4,7] \\ H_{\text{TB}}[5,0] & H_{\text{TB}}[5,1] & H_{\text{TB}}[5,2] & H_{\text{TB}}[5,3] & H_{\text{TB}}[5,4] & H_{\text{TB}}[5,5] & H_{\text{TB}}[5,6] & H_{\text{TB}}[5,7] \\ H_{\text{TB}}[6,0] & H_{\text{TB}}[6,1] & H_{\text{TB}}[6,2] & H_{\text{TB}}[6,3] & H_{\text{TB}}[6,4] & H_{\text{TB}}[6,5] & H_{\text{TB}}[6,6] & H_{\text{TB}}[6,7] \\ H_{\text{TB}}[7,0] & H_{\text{TB}}[7,1] & H_{\text{TB}}[7,2] & H_{\text{TB}}[7,3] & H_{\text{TB}}[7,4] & H_{\text{TB}}[7,5] & H_{\text{TB}}[7,6] & H_{\text{TB}}[7,7] \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

$$H_{12} = \begin{pmatrix} H_{\text{TB}}[0, 8] & H_{\text{TB}}[0, 9] & H_{\text{TB}}[0, 10] & H_{\text{TB}}[0, 11] & H_{\text{TB}}[0, 12] & H_{\text{TB}}[0, 13] & H_{\text{TB}}[0, 14] & H_{\text{TB}}[0, 15] \\ H_{\text{TB}}[1, 8] & H_{\text{TB}}[1, 9] & H_{\text{TB}}[1, 10] & H_{\text{TB}}[1, 11] & H_{\text{TB}}[1, 12] & H_{\text{TB}}[1, 13] & H_{\text{TB}}[1, 14] & H_{\text{TB}}[1, 15] \\ H_{\text{TB}}[2, 8] & H_{\text{TB}}[2, 9] & H_{\text{TB}}[2, 10] & H_{\text{TB}}[2, 11] & H_{\text{TB}}[2, 12] & H_{\text{TB}}[2, 13] & H_{\text{TB}}[2, 14] & H_{\text{TB}}[2, 15] \\ H_{\text{TB}}[3, 8] & H_{\text{TB}}[3, 9] & H_{\text{TB}}[3, 10] & H_{\text{TB}}[3, 11] & H_{\text{TB}}[3, 12] & H_{\text{TB}}[3, 13] & H_{\text{TB}}[3, 14] & H_{\text{TB}}[3, 15] \\ H_{\text{TB}}[4, 8] & H_{\text{TB}}[4, 9] & H_{\text{TB}}[4, 10] & H_{\text{TB}}[4, 11] & H_{\text{TB}}[4, 12] & H_{\text{TB}}[4, 13] & H_{\text{TB}}[4, 14] & H_{\text{TB}}[4, 15] \\ H_{\text{TB}}[5, 8] & H_{\text{TB}}[5, 9] & H_{\text{TB}}[5, 10] & H_{\text{TB}}[5, 11] & H_{\text{TB}}[5, 12] & H_{\text{TB}}[5, 13] & H_{\text{TB}}[5, 14] & H_{\text{TB}}[5, 15] \\ H_{\text{TB}}[6, 8] & H_{\text{TB}}[6, 9] & H_{\text{TB}}[6, 10] & H_{\text{TB}}[6, 11] & H_{\text{TB}}[6, 12] & H_{\text{TB}}[6, 13] & H_{\text{TB}}[6, 14] & H_{\text{TB}}[6, 15] \\ H_{\text{TB}}[7, 8] & H_{\text{TB}}[7, 9] & H_{\text{TB}}[7, 10] & H_{\text{TB}}[7, 11] & H_{\text{TB}}[7, 12] & H_{\text{TB}}[7, 13] & H_{\text{TB}}[7, 14] & H_{\text{TB}}[7, 15] \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

donde los términos de  $H_{11}$  corresponden a:

$$H_{\text{TB}}[0, 0] = E_s + g_{26}V''_{ss\sigma} \quad (\text{A.4})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 1] = 0 \quad (\text{A.5})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 2] = g_{27}V''_{sp\sigma} \quad (\text{A.6})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 3] = g_{28}V''_{sp\sigma} \quad (\text{A.7})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 4] = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 5] = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 6] = 0 \quad (\text{A.10})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 7] = 0 \quad (\text{A.11})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 1] = E_s + g_{26}V''_{ss\sigma} \quad (\text{A.12})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 2] = 0 \quad (\text{A.13})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 3] = 0 \quad (\text{A.14})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 4] = 0 \quad (\text{A.15})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 5] = g_{27}V''_{sp\sigma} \quad (\text{A.16})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 6] = g_{28}V''_{sp\sigma} \quad (\text{A.17})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 7] = 0 \quad (\text{A.18})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 2] = E_p + g_{29}V''_{pp\sigma} + g_{30}V_{pp\pi} \quad (\text{A.19})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 3] = -\frac{i\lambda}{3} \quad (\text{A.20})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 4] = 0 \quad (\text{A.21})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 5] = 0 \quad (\text{A.22})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 6] = 0 \quad (\text{A.23})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 7] = -\frac{\lambda}{3} \quad (\text{A.24})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 3] = E_p + g_{30}V''_{pp\sigma} + g_{29}V''_{pp\pi} \quad (\text{A.25})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 4] = 0 \quad (\text{A.26})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 5] = 0 \quad (\text{A.27})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 6] = 0 \quad (\text{A.28})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 7] = -\frac{i\lambda}{3} \quad (\text{A.29})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 4] = E_p + g_{26}V''_{pp\pi} \quad (\text{A.30})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 5] = -\frac{\lambda}{3} \quad (\text{A.31})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 6] = -\frac{i\lambda}{3} \quad (\text{A.32})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 7] = 0 \quad (\text{A.33})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 5] = E_p + g_{29}V''_{pp\sigma} + g_{30}V''_{pp\pi} \quad (\text{A.34})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 6] = -\frac{i\lambda}{3} + g_{31}(V''_{pp\sigma} - V''_{pp\pi}) \quad (\text{A.35})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 7] = 0 \quad (\text{A.36})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 6] = E_p + g_{30}V''_{pp\sigma} + g_{29}V''_{pp\pi} \quad (\text{A.37})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 7] = 0 \quad (\text{A.38})$$

$$H_{\text{TB}}[7, 7] = E_p + g_{26}V''_{pp\pi} \quad (\text{A.39})$$

y los términos de  $H_{12}$ :

$$H_{\text{TB}}[0, 8] = g_0V_{ss\sigma} + g_{13}V'_{ss\sigma} \quad (\text{A.40})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 9] = 0 \quad (\text{A.41})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 10] = g_1V_{sp\sigma} + g_{14}V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.42})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 11] = g_2V_{sp\sigma} + g_{15}V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.43})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 12] = g_3V_{sp\sigma} + g_{16}V'_{s\sigma} \quad (\text{A.44})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 13] = 0 \quad (\text{A.45})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 14] = 0 \quad (\text{A.46})$$

$$H_{\text{TB}}[0, 15] = 0 \quad (\text{A.47})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 8] = 0 \quad (\text{A.48})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 9] = g_0 V_{ss\sigma} + g_{13} V'_{ss\sigma} \quad (\text{A.49})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 10] = 0 \quad (\text{A.50})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 11] = 0 \quad (\text{A.51})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 12] = 0 \quad (\text{A.52})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 13] = g_1 V_{sp\sigma} + g_{14} V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.53})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 14] = g_2 V_{sp\sigma} + g_{15} V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.54})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 15] = g_3 V_{sp\sigma} + g_{16} V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.55})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 8] = -g_1 V_{sp\sigma} - g_{14} V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.56})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 9] = 0 \quad (\text{A.57})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 10] = g_4 V_{pp\sigma} + g_5 V_{pp\pi} + g_{17} V'_{pp\sigma} + g_{18} V'_{pp\pi} \quad (\text{A.58})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 11] = g_{12} (V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{25} (V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.59})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 12] = g_6(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{19}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.60})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 13] = 0 \quad (\text{A.61})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 14] = 0 \quad (\text{A.62})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 15] = 0 \quad (\text{A.63})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 8] = -g_2V_{sp\sigma} - g_{15}V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.64})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 9] = 0 \quad (\text{A.65})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 10] = g_{12}(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{25}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.66})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 11] = g_7V_{pp\sigma} + g_8V_{pp\pi} + g_{20}V'_{pp\sigma} + g_{21}V'_{pp\pi} \quad (\text{A.67})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 12] = g_{11}(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{24}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.68})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 13] = 0 \quad (\text{A.69})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 14] = 0 \quad (\text{A.70})$$

$$H_{\text{TB}}[3, 15] = 0 \quad (\text{A.71})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 8] = -g_3 V_{sp\sigma} - g_{16} V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.72})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 9] = 0 \quad (\text{A.73})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 10] = g_6 (V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{19} (V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.74})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 11] = g_{11} (V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{24} (V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.75})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 12] = g_9 V_{pp\sigma} + g_{10} V_{pp\pi} + g_{22} V'_{pp\sigma} + g_{23} V'_{pp\pi} \quad (\text{A.76})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 13] = 0 \quad (\text{A.77})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 14] = 0 \quad (\text{A.78})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 15] = 0 \quad (\text{A.79})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 8] = 0 \quad (\text{A.80})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 9] = -g_1 V_{sp\sigma} - g_{14} V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.81})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 10] = 0 \quad (\text{A.82})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 11] = 0 \quad (\text{A.83})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 12] = 0 \quad (\text{A.84})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 13] = g_4 V_{pp\sigma} + g_5 V_{pp\pi} + g_{17} V'_{pp\sigma} + g_{18} V'_{pp\pi} \quad (\text{A.85})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 14] = g_{12}(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{25}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.86})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 15] = g_6(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{19}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.87})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 8] = 0 \quad (\text{A.88})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 9] = -g_2 V_{sp\sigma} - g_{15} V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.89})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 10] = 0 \quad (\text{A.90})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 12] = 0 \quad (\text{A.91})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 13] = g_{12}(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{25}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.92})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 14] = g_7 V_{pp\sigma} + g_8 V_{pp\pi} + g_{20} V'_{pp\sigma} + g_{21} V'_{pp\pi} \quad (\text{A.93})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 15] = g_{11}(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{24}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.94})$$

$$H_{\text{TB}}[7, 8] = 0 \quad (\text{A.95})$$

$$H_{\text{TB}}[7, 9] = -g_3 V_{sp\sigma} - g_{16} V'_{sp\sigma} \quad (\text{A.96})$$

$$H_{\text{TB}}[7, 10] = 0 \quad (\text{A.97})$$

$$H_{\text{TB}}[7, 11] = 0 \quad (\text{A.98})$$

$$H_{\text{TB}}[7, 12] = 0 \quad (\text{A.99})$$

$$H_{\text{TB}}[7, 13] = g_6(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{19}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.100})$$

$$H_{\text{TB}}[7, 14] = g_{11}(V_{pp\sigma} - V_{pp\pi}) + g_{24}(V'_{pp\sigma} - V'_{pp\pi}) \quad (\text{A.101})$$

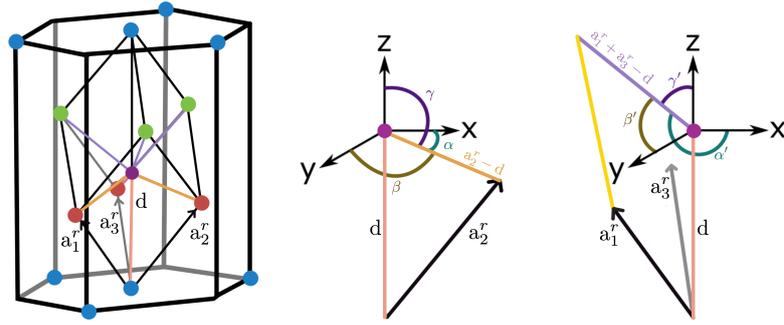
$$H_{\text{TB}}[7, 15] = g_9 V_{pp\sigma} + g_{10} V_{pp\pi} + g_{22} V'_{pp\sigma} + g_{23} V'_{pp\pi} \quad (\text{A.102})$$

Los parámetros ajustables en este Hamiltoniano son:

|                |                 |                 |                 |              |                  |                  |                  |               |
|----------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------------|------------------|------------------|------------------|---------------|
| Parámetro [eV] | $d_1$ [Å]       | $d_2$ [Å]       | $E_s$           | $E_p$        | $V_{ss\sigma}$   | $V_{sp\sigma}$   | $V_{pp\sigma}$   | $V_{pp\pi}$   |
| Valor          | 3.062           | 3.512           | -10.906         | -0.486       | -0.608           | 1.320            | 1.854            | -0.600        |
| Parámetro [eV] | $V'_{ss\sigma}$ | $V'_{sp\sigma}$ | $V'_{pp\sigma}$ | $V'_{pp\pi}$ | $V''_{ss\sigma}$ | $V''_{sp\sigma}$ | $V''_{pp\sigma}$ | $V''_{pp\pi}$ |
| Valor          | -0.384          | 0.433           | 1.396           | -0.344       | 0                | 0                | 0.156            | 0             |

Y las funciones  $g_i$  ( $i = 0, 1, \dots, 31$ ) son funciones del vector  $\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1^r + k_2 \mathbf{b}_2^r + k_3 \mathbf{b}_3^r$  siendo  $\mathbf{b}_n^r$  ( $n = 1, 2, 3$ ) los vectores de la red recíproca definidos en 3. Las funciones  $g_0 - g_{12}$  corresponden a interacciones con primeros vecinos,  $g_{13} - g_{25}$  a segundos vecinos y  $g_{26} - g_{31}$  a terceros vecinos.

Sus expresiones son:



**Figura A.1:** Esquemización de los ángulos para el cálculo de los cosenos directores de los vectores  $\mathbf{a}_2^r - \mathbf{d}$  y  $\mathbf{a}_1^r + \mathbf{a}_3^r - \mathbf{d}$

$$g_0 = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^r - \mathbf{d})} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2^r - \mathbf{d})} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_3^r - \mathbf{d})} \quad (\text{A.103})$$

$$g_1 = (e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2^r - \mathbf{d})} - e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^r - \mathbf{d})}) \cos \alpha \quad (\text{A.104})$$

$$g_2 = (e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^r - \mathbf{d})} - e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2^r - \mathbf{d})} - 2e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_3^r - \mathbf{d})}) \cos \beta \quad (\text{A.105})$$

$$g_3 = g_0 \cos \gamma \quad (\text{A.106})$$

$$g_4 = (e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^r - \mathbf{d})} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2^r - \mathbf{d})}) \cos^2 \alpha \quad (\text{A.107})$$

$$g_5 = g_0 - g_4 \quad (\text{A.108})$$

$$g_6 = g_1 \cos \gamma \quad (\text{A.109})$$

$$g_7 = (e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^r - \mathbf{d})} + e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2^r - \mathbf{d})} + 4e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_3^r - \mathbf{d})}) \cos^2 \beta \quad (\text{A.110})$$

$$g_8 = g_0 - g_7 \quad (\text{A.111})$$

$$g_9 = g_0 \cos^2 \gamma \quad (\text{A.112})$$

$$g_{10} = g_0 \sin^2 \gamma \quad (\text{A.113})$$

$$g_{11} = g_2 \cos \gamma \quad (\text{A.114})$$

$$g_{12} = g_1 \cos \beta \quad (\text{A.115})$$

con  $\mathbf{a}_n^r$  ( $n = 1, 2, 3$ ) definidos anteriormente (ver 3) y  $\mathbf{d} = (0, 0, 2\mu) * c$  siendo  $\mu = 0.2341$  un parámetro de desplazamiento interno. Los valores de  $\cos \alpha$ ,  $\cos \beta$  y  $\cos \gamma$  corresponden a los cosenos directores del vector  $\mathbf{a}_2^r - \mathbf{d}$ , como se puede visualizar en la Fig. A.1. Las funciones  $g_{13}$  a  $g_{25}$  pueden obtenerse reemplazando los términos  $\mathbf{a}_1^r$ ,  $\mathbf{a}_2^r$ ,  $\mathbf{a}_3^r$ ,  $\cos \alpha$ ,  $\cos \beta$  y  $\cos \gamma$  por  $\mathbf{a}_2^r + \mathbf{a}_3^r$ ,  $\mathbf{a}_1^r + \mathbf{a}_3^r$ ,  $\mathbf{a}_2^r + \mathbf{a}_1^r$ ,  $\cos \alpha'$ ,  $\cos \beta'$  y  $\cos \gamma'$  respectivamente. Los valores de  $\cos \alpha'$ ,  $\cos \beta'$  y  $\cos \gamma'$  corresponden a los cosenos directores del vector  $\mathbf{a}_1^r + \mathbf{a}_3^r - \mathbf{d}$  (ver Fig. A.1).

# B

## Apéndice B: Desarrollo de expresiones del Hamiltoniano propuesto por Schindler y colaboradores

Este apéndice contiene el desarrollo de los términos del Hamiltoniano topológico de Bi, en las cuales se partió de las expresiones con funciones trigonométricas a su expresión como funciones exponenciales, facilitando su implementación en el código de PyTB. El modelo del Hamiltoniano de 8 bandas de amarre fuerte del bismuto propuesto por Schindler y colaboradores [14] es:

$$H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{\text{TB},I}(\mathbf{k}) + \epsilon I & \delta M_{\text{TB}}(\mathbf{k}) \\ \delta M_{\text{TB}}(\mathbf{k})^\dagger & H_{\text{TB},II}(\mathbf{k}) - \epsilon I \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

donde los términos de  $H_{\text{TB},I}(\mathbf{k})$ ,  $H_{\text{TB},II}(\mathbf{k})$  y  $M_{\text{TB}}(\mathbf{k})$  tienen la forma:

$$H_{\text{TB},I}(\mathbf{k}) = \Gamma_1 \{ m_I (1 + \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3^h) - t_I [\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1^h + \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2^h + \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^h + \mathbf{a}_2^h)] \} \\ + \lambda_I [\Gamma_2 \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1^h + \Gamma_{2,1}^I \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2^h + \Gamma_{2,2}^I \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^h + \mathbf{a}_2^h) + \Gamma_3 \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3^h] \quad (\text{B.2})$$

$$H_{\text{TB},II}(\mathbf{k}) = \Gamma_1 \{ m_{II} (1 + \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3^h) - t_{II} [\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1^h + \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2^h + \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^h + \mathbf{a}_2^h)] \} \\ + \lambda_{II} [\Gamma_2 \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1^h + \Gamma_{2,1}^{II} \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2^h + \Gamma_{2,2}^{II} \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^h + \mathbf{a}_2^h) + \Gamma_3 \sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3^h] \quad (\text{B.3})$$

$$M_{\text{TB}}(\mathbf{k}) = \Gamma_2 [\sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1^h + \sin \mathbf{k} \cdot (2\mathbf{a}_1^h + \mathbf{a}_2^h)] + \Gamma_{2,1}^{I,II} [\sin \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2^h + \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2^h - \mathbf{a}_1^h)] \\ - \Gamma_{2,2}^{I,II} [\sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^h + \mathbf{a}_2^h) + \sin \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^h + 2\mathbf{a}_2^h)] - i\Gamma_5 [\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1^h + \cos \mathbf{k} \cdot (2\mathbf{a}_1^h + \mathbf{a}_2^h)] \\ - i\Gamma_{5,1}^{I,II} [\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2^h + \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_2^h - \mathbf{a}_1^h)] - i\Gamma_{5,2}^{I,II} [\cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^h + \mathbf{a}_2^h) + \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1^h + 2\mathbf{a}_2^h)] \quad (\text{B.4})$$

siendo  $\Gamma_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 5$ ) las matrices de Dirac y  $\Gamma_{\mu,\nu}^{i,j} = (C_{3,i}^z \Gamma_\mu C_{3,j}^z)^{-\nu}$ , donde  $C_{3,I}^z = \sigma_0 \otimes e^{i\frac{\pi}{3}\sigma_3}$  y  $C_{3,II}^z = -\sigma_0 \otimes \sigma_0$ .

Para la implementación de estas expresiones en el código de PythTB, las funciones trigonométricas se expresan en términos de la función exponencial, por los que los elementos del Hamiltoniano tienen la forma:

$$H_{\text{TB}}^{\text{Schin}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_{\text{TB}}[0,0] & H_{\text{TB}}[0,1] & H_{\text{TB}}[0,2] & H_{\text{TB}}[0,3] & H_{\text{TB}}[0,4] & H_{\text{TB}}[0,5] & H_{\text{TB}}[0,6] & H_{\text{TB}}[0,7] \\ H_{\text{TB}}[1,0] & H_{\text{TB}}[1,1] & H_{\text{TB}}[1,2] & H_{\text{TB}}[1,3] & H_{\text{TB}}[1,4] & H_{\text{TB}}[1,5] & H_{\text{TB}}[1,6] & H_{\text{TB}}[1,7] \\ H_{\text{TB}}[2,0] & H_{\text{TB}}[2,1] & H_{\text{TB}}[2,2] & H_{\text{TB}}[2,3] & H_{\text{TB}}[2,4] & H_{\text{TB}}[2,5] & H_{\text{TB}}[2,6] & H_{\text{TB}}[2,7] \\ H_{\text{TB}}[3,0] & H_{\text{TB}}[3,1] & H_{\text{TB}}[3,2] & H_{\text{TB}}[3,3] & H_{\text{TB}}[3,4] & H_{\text{TB}}[3,5] & H_{\text{TB}}[3,6] & H_{\text{TB}}[3,7] \\ H_{\text{TB}}[4,0] & H_{\text{TB}}[4,1] & H_{\text{TB}}[4,2] & H_{\text{TB}}[4,3] & H_{\text{TB}}[4,4] & H_{\text{TB}}[4,5] & H_{\text{TB}}[4,6] & H_{\text{TB}}[4,7] \\ H_{\text{TB}}[5,0] & H_{\text{TB}}[5,1] & H_{\text{TB}}[5,2] & H_{\text{TB}}[5,3] & H_{\text{TB}}[5,4] & H_{\text{TB}}[5,5] & H_{\text{TB}}[5,6] & H_{\text{TB}}[5,7] \\ H_{\text{TB}}[6,0] & H_{\text{TB}}[6,1] & H_{\text{TB}}[6,2] & H_{\text{TB}}[6,3] & H_{\text{TB}}[6,4] & H_{\text{TB}}[6,5] & H_{\text{TB}}[6,6] & H_{\text{TB}}[6,7] \\ H_{\text{TB}}[7,0] & H_{\text{TB}}[7,1] & H_{\text{TB}}[7,2] & H_{\text{TB}}[7,3] & H_{\text{TB}}[7,4] & H_{\text{TB}}[7,5] & H_{\text{TB}}[7,6] & H_{\text{TB}}[7,7] \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

$$H_{\text{TB}}[0,0] = \epsilon + m_I - \frac{t_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] + \frac{m_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.6})$$

$$H_{\text{TB}}[0,1] = 0 \quad (\text{B.7})$$

$$H_{\text{TB}}[0,2] = -\frac{\lambda_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.8})$$

$$H_{\text{TB}}[0,3] = \frac{\lambda_I}{2i} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i2\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} \right) + e^{i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \right] \quad (\text{B.9})$$

$$H_{\text{TB}}[0,4] = 0 \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[0, 5] = & \frac{i\delta}{2} \left\{ e^{i\pi/3} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \right. \\
& - \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\
& \left. - e^{i2\pi/3} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right] \right\} \quad (\text{B.11})
\end{aligned}$$

$$H_{\text{TB}}[0, 6] = 0 \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[0, 7] = & \frac{\delta}{2i} \left\{ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{i\pi/3} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \right. \\
& + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \\
& \left. - e^{i2\pi/3} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right] \right\} \quad (\text{B.13})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[1, 1] = & \epsilon + m_I \\
& - \frac{t_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\
& + \frac{m_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.14})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[1, 2] = & \frac{\lambda_I}{2i} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} \right. \\
& + e^{-i2\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} \right) \\
& \left. + e^{-i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \right] \quad (\text{B.15})
\end{aligned}$$

$$H_{\text{TB}}[1, 3] = -\frac{\lambda_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.16})$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[1, 4] = & \frac{\delta i}{2} \left[ e^{-i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \right. \\
& - \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \\
& \left. - e^{-2i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right) \right] \quad (\text{B.17})
\end{aligned}$$

$$H_{\text{TB}}[1, 5] = 0 \quad (\text{B.18})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 6] = \frac{\delta}{2i} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} \right. \\ \left. - e^{-i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \right. \\ \left. + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right. \quad (\text{B.19})$$

$$\left. - e^{-2i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right) \right] \quad (\text{B.20})$$

$$H_{\text{TB}}[1, 7] = 0 \quad (\text{B.21})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 2] = \epsilon - m_I \\ + \frac{t_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\ - \frac{m_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.22})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 3] = 0 \quad (\text{B.23})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 4] = 0 \quad (\text{B.24})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 5] = \frac{\delta}{2i} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} \right. \\ \left. - e^{i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \right. \\ \left. + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right. \\ \left. - e^{2i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right) \right] \quad (\text{B.25})$$

$$H_{\text{TB}}[2, 6] = 0 \quad (\text{B.26})$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[2, 7] = & \frac{\delta i}{2} \left[ -e^{i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \right. \\
& + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \\
& \left. + e^{2i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right) \right] \quad (\text{B.27})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[3, 3] = & \epsilon - m_I \\
& + \frac{t_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\
& - \frac{m_I}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.28})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[3, 4] = & \frac{\delta}{2i} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} \right. \\
& - e^{-i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \\
& + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \\
& \left. - e^{-2i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right) \right] \quad (\text{B.29})
\end{aligned}$$

$$H_{\text{TB}}[3, 5] = 0 \quad (\text{B.30})$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[3, 6] = & \frac{\delta i}{2} \left[ -e^{-i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(-\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right) \right. \\
& + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \\
& \left. + e^{-2i\pi/3} \left( e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right) \right] \quad (\text{B.31})
\end{aligned}$$

$$H_{\text{TB}}[3, 7] = 0 \quad (\text{B.32})$$

$$(\text{B.33})$$

$$\begin{aligned}
H_{\text{TB}}[4, 4] = & -\epsilon + m_{II} \\
& - \frac{t_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\
& + \frac{m_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.34})
\end{aligned}$$

$$H_{\text{TB}}[4, 5] = 0 \quad (\text{B.35})$$

$$H_{\text{TB}}[4, 6] = -\frac{\lambda_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.36})$$

$$\begin{aligned} H_{\text{TB}}[4, 7] = & \frac{\lambda_{II}}{2i} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\ & - \frac{\gamma_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h-\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h-\mathbf{a}_2^h)} - e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

$$\begin{aligned} H_{\text{TB}}[5, 5] = & -\epsilon + m_{II} \\ & - \frac{t_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\ & + \frac{m_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

$$\begin{aligned} H_{\text{TB}}[5, 6] = & \frac{\lambda_{II}}{2i} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} - e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\ & + \frac{\gamma_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h-\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h-\mathbf{a}_2^h)} - e^{i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(2\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} - e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+2\mathbf{a}_2^h)} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

$$H_{\text{TB}}[5, 7] = -\frac{\lambda_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \quad (\text{B.40})$$

$$\begin{aligned} H_{\text{TB}}[6, 6] = & -\epsilon - m_{II} \\ & + \frac{t_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\ & - \frac{m_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

$$H_{\text{TB}}[6, 7] = 0 \quad (\text{B.42})$$

$$\begin{aligned} H_{\text{TB}}[7, 7] = & -\epsilon - m_{II} \\ & + \frac{t_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2^h} + e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} + e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1^h+\mathbf{a}_2^h)} \right] \\ & - \frac{m_{II}}{2} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3^h} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.43})$$