



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

SEMIMETALES TOPOLÓGICOS DE NUDOS Y  
ENLACES TOROIDALES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIATURA EN FÍSICA

P R E S E N T A :

EDUARDO CALEP VELÁZQUEZ LÓPEZ

TUTOR

DR JOSÉ EDUARDO BARRIOS VARGAS



CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, 2023



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

1. Datos del alumno:  
Velázquez  
López  
Eduardo Calep  
+52 962 142 1469  
Universidad Nacional Autónoma de México  
Facultad de Ciencias  
Física  
417011282
2. Datos del tutor:  
Dr.  
Barrios  
Vargas  
José Eduardo
3. Datos del sinodal 1:  
Dr.  
Pérez  
López  
Luis Antonio
4. Datos del sinodal 2:  
Dr.  
Martín  
Ruiz  
José Alberto
5. Datos del sinodal 3:  
Dr.  
Stegmann  
Thomas Werner
6. Datos del sinodal 4:  
Dr.  
Betancur  
Ocampo  
Yonatan
7. Datos de la tesis:  
Semimetales Topológicos de Nudos y Enlaces Toroidales  
101 p.  
2023

*«Los recuerdos tienen tanta importancia como la realidad y los sueños.»*

*- Satoshi Kon*

*A mis padres, Esperanza Velázquez y Francisco Roblero.*

*A mi tía, Luzarely Bartolón.*

*A mis hermanos, Jorge L Bartolón y Fernando Velázquez.*

*En memoria de, Lucio G Velázquez y José Santiago Bartolón.*

# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>v</b>
<b>Resumen</b>	<b>VI</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2. Ecuación de Dirac y Semimetales Topológicos</b>	<b>3</b>
2.1. Ecuación de Dirac . . . . .	3
2.1.1. Ecuación de Klein-Gordon . . . . .	3
2.1.2. Ecuación de Dirac . . . . .	6
2.1.3. Algunos Aspectos de la Ecuación de Dirac . . . . .	9
2.1.4. Simetrías Discretas en la Ecuación de Dirac . . . . .	10
2.2. Semimetales de Nodos Topológicos . . . . .	11
2.2.1. Modelo de 4 bandas . . . . .	12
2.2.2. Sistema de Dos Niveles . . . . .	13
2.3. Fases Geométricas en la Ecuación de Schrödinger . . . . .	14
2.3.1. Fase de Berry en Sistemas sin Degeneración . . . . .	14
2.3.2. Matriz de Rotación de Berry para Sistemas Cuánticos con Degeneración . . . . .	16
2.4. Modelo de Amarre Fuerte: Modelo SSH . . . . .	19
2.4.1. Hamiltoniano para Modelos de Amarre Fuerte . . . . .	19
2.4.2. Modelo de Su-Schrieffer-Heeger(SSH) . . . . .	19
<b>3. Modelos Continuos de Dos Niveles</b>	<b>25</b>
3.1. Nudos y Enlaces Toroidales . . . . .	25
3.1.1. Mapeo de Hopf . . . . .	25
3.1.2. Índice (winding number) del Mapeo $\mathbb{S}^3$ en $\mathbb{S}^2$ . . . . .	27
3.1.3. Ecuación del Toro para los Nudos Toroidales . . . . .	30
3.2. Modelo de dos Bandas para Semimetales Topológicos de Nudo . . . . .	32
<b>4. Semimetales Topológicos de Nudos en Redes Cúbicas</b>	<b>34</b>
4.1. Construcción de los Hamiltonianos Periódicos en una Red Cúbica . . . . .	34
4.1.1. Red Cúbica . . . . .	34
4.1.2. Semimetales de Nodos Topológicos en Redes Cúbicas . . . . .	35
4.1.3. Redes Mínimas de Semimetales Topológicos de Nudos Toroidales . . . . .	37

4.2.	Energía de Bulto en los Semimetales Topológicos de Nudo . . . . .	42
4.2.1.	Aproximación de los Nodos de Los Modelos de Red . . . . .	42
4.2.2.	Simetría de las Bandas . . . . .	43
4.2.3.	Energía de Fermi . . . . .	44
4.3.	Rompiendo la Periodicidad en Una Dirección . . . . .	48
4.3.1.	Estructura de Bandas sin Término de Masa . . . . .	48
4.3.2.	Evolución de los Estados de Borde en el Semimetal topológico de Nudo Trébol con $m = 2.8$ . . . . .	52
4.3.3.	Estados Localizados con Energía Distinta de Cero en $m = 2.5$ . . . . .	53
4.4.	Transporte Electrónico en Bloques: Terminales en la Dirección $z$ . . . . .	53
4.4.1.	Método Landauer-Büttiker . . . . .	54
4.4.2.	Conductancia en Semimetales Topológicos de Nudos . . . . .	60
<b>5.</b>	<b>Fases Geométricas de los Semimetales Topológicos de Nudo</b>	<b>71</b>
5.1.	Teoría de homotopía en los nudos toroidales. . . . .	71
5.1.1.	Grupos de Cohomología de los Nudos Toroidales. . . . .	73
5.2.	Fases de Berry en un Semimetal topológico de nudo de dos Bandas . . . . .	74
5.2.1.	Fase de Berry para el hamiltoniano con simetría $\mathcal{PT}$ . . . . .	74
5.2.2.	Hamiltoniano con distinta Simetría . . . . .	77
5.3.	Modelo de Cuatro Bandas para Semimetales Topológicos de Nudo . . . . .	79
5.3.1.	Hamiltonianos de semimetales topológicos de nudos con energías degeneradas . . . . .	79
5.3.2.	Cálculo del Vector de Conexión de la Matriz de Rotación de Berry y de la Curvatura de Berry . . . . .	81
5.3.3.	Cálculo Analítico del Wilson loop Alrededor de Lazos Circulares . . . . .	84
5.3.4.	Generador $\alpha$ . . . . .	84
5.3.5.	Generadores del camino $\beta$ . . . . .	87
5.4.	Cálculo numérico de las fases geométricas alrededor de lazos rectangulares. . . . .	87
<b>6.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>89</b>

# Agradecimientos

Quiero agradecer a mis familiares por ser un apoyo importante durante todo mi proceso de licenciatura, siempre necesite de sus apoyos y sus consejos durante mi estancia en Ciudad de México, en especial a mi madre Esperanza Velázquez por conducirme al momento donde estoy ahora, y del apoyo de mi tía Luzarely. Al Dr J Eduardo Barrios le quiero agradecer el haberme motivado en el estudio de estado sólido, el tiempo para explicarme los modelos que se utilizan en este trabajo, las herramientas que utiliza en la parte de programación y herramientas computacionales, además los tecnicismo que iban surgiendo durante la investigación del proyecto. Gracias a la comunidad de los **Topoamigxs** por el trabajo en los Seminarios de los viernes para el estudio de los *Materiales Cuánticos Topológicos*. Quiero agradecer a los doctores Daniel Scheinbaum F y Omar Antolín C por el modelo de nudo propuesto de bandas degeneradas y la aplicación de la cohomología en la teoría de norma para la matriz de Berry, con lo cual este trabajo de tesis tiene parte de su originalidad. Un agradecimiento especial a mis profesores que durante la carrera me motivaron en la investigación y me facilitaron el aprendizaje en los conceptos abstractos de la física.

Gracias a mis amistades por los momentos de risas compartidos que nos desestrezaban de las tareas y que hacían de los días más amenos. Primero mencionar a mis amigos de la Preparatoria con quienes compartí la carrera de Física Alejandro, Carlos A, José D, José V, mis amigos de ingeniería Bogar, Yonatan y Carlos G. A mis compañeros de Tapachula con quienes aún en la distancia siempre nos comunicábamos: Eli Alexander y Maurico. Finalmente a mis nuevos amigos en Ciudad de México: Alfonso, Andrés G, Carlos Cureño, Enrique, Jesús Eduardo , Harim y José Andrés.

Gracias al apoyo económico de **CONACYT** en el desarrollo del proyecto **Frontera 428214** que me fue asignado y PAPIIT IA 106021.

# Resumen

El objetivo principal de este trabajo es el estudio las propiedades electrónicas de materia topológica exótica tridimensional, y nuestro trabajo se centra en los semimetales de nodos topológicos (*topological nodal semimetals*), en concreto los semimetales de nodos topológicos (*Nodal-knot semimetals*). Los semimetales de nodos topológicos son materiales donde existen intersecciones cónicas que forman un conjunto discreto o continuo de nodos entre la banda de conducción y la banda de valencia; estos nodos están protegidos por alguna de las simetrías unitarias, a saber inversión temporal  $\mathcal{T}$  o inversión de paridad  $\mathcal{P}$  u otras.

En lugar de estudiar las propiedades electrónicas de un material dada la disposición de sus átomos, en este trabajo proponemos una construcción de hamiltonianos de semimetales topológicos de enlace y nudo toroidal mediante la asociación de puntos nodales a las intersecciones de hipersuperficies complejas en el espacio de momentos. Los enlaces o nudos toroidales de las intersecciones, están caracterizados por una pareja de enteros  $(p, q)$  y un índice (*winding number*). Construimos dos modelos de redes cúbicas asociados a algunos hamiltonianos en la aproximación de amarre fuerte del semimetal. Elegimos un modelo de red cúbica con interacción a vecinos cercanos, en esta red exploramos las propiedades electrónicas de transporte al cambiar el índice o al agregar un término de masa para inducir brechas de energía en los nodos.

La primera propiedad electrónica que caracterizamos fue la generación de estados de borde cuando se rompen condiciones de periodicidad en alguna dirección de los vectores de red, donde identificamos que a excepción de la red asociado a un nudo trébol con enteros  $(3,2)$  los estados de borde son modos de energía cero que generan estructuras de bandas planas. El segundo estudio corresponde a la realización de un dispositivo de dos terminales, donde realizamos el cálculo de la conductancia, la topología de sus bandas y si hay estados de borde. Donde encontramos que dada la existencia de las bandas planas alrededor de la energía de Fermi no hay conductancia a energía cero. Aún cuando el modelo de red a estudiar no corresponda a una organización atómica específica, el modelo propuesto podría ser emulado con redes sintéticas basadas en cristales fotónicos, acústicos o circuitos electrónicos.

Finalmente, realizamos el cálculo de las fases geométricas que definidas por la topología de los nudos, en especial propusimos un modelo de cuatro bandas con degeneración para obtener el cálculo del Wilson loop asociado a la topología de los nudos y definir materiales no abelianos en los semimetales topológicos; en este trabajo los modelos propuestos tienen conexiones planas abelianas.

**Palabras claves:** Semimetales de nodos topológicos, bandas planas, nudos toroidales,



Wilson loop.

# 1 Introducción

Los semimetales topológicos son una clase de materiales fascinantes que han atraído una atención considerable en el ámbito de la física de materia condensada. El estudio de las propiedades electrónicas del grafeno reveló una característica única en la estructura de bandas, porque no presentaba brecha de energía y la relación de dispersión cerca del nivel de Fermi es lineal, similar a la relación de dispersión de los fermiones relativistas. También de este material definimos un ejemplo de semimetal topológico. A partir de su descubrimiento se inició una búsqueda de materiales con dichas características.

El cristal de carbono más conocido es el diamante, el cual está caracterizado por su dureza y su alta dispersión de la luz que son útiles en la industria y joyería. Sin embargo, bajo presión y temperatura ambiente, la forma más estable del carbono es el grafito, el cual es usado como un lubricante industrial y en lápices. El grafito es un material multicapas, en los cuales cada capa consiste en una hoja de átomos de carbono formando estructuras hexagonales similares a los anillos de benceno, una monocapa de grafito es llamado Grafeno. El grafeno puede sintetizarse epitaxialmente sobre carburo de silicio, y se ha formado monocapa de grafeno sobre superficies metálicas [1]. Un hecho importante del estudio del grafeno fue introducir el concepto de semimetales de Dirac, donde las excitaciones electrónicas alrededor de la energía de Fermi son descritas por una relación de dispersión lineal y efectivamente masa cero, similar a los electrones relativistas de Dirac, lo que dio origen a propiedades de transporte únicas [2, 3]. Extendiendo la búsqueda más allá de los modelos bidimensionales, la exploración en modelos tridimensionales han revelado una categoría única conocida como los semimetales de nodos topológicos (*nodal topological semimetals*). Estos materiales exhiben una distribución de puntos nodales discretas o continuas en su estructura de bandas electrónica. En particular ha ganado relevancia en el campo de los materiales cuánticos topológicos [4, 5].

Los semimetales topológicos de líneas nodales en tres dimensiones están caracterizados por la presencia de bandas degeneradas a lo largo de curvas en la zona de Brillouin. Estas degeneraciones son robustas ante perturbaciones y están protegidas bajo simetrías, lo que los hace interesante en investigaciones de física teórica y exploraciones experimentales. Las líneas nodales pueden tener asociado una topología no trivial, lo que contribuye a que emerjan estados electrónicos y funciones de respuestas únicas [6].

En el ámbito de la física de altas energías, la búsqueda de nuevos materiales con características topológicas ha conducido a la investigación de diversos compuestos que presentan semimetalicidad de línea nodal. La comunidad está especialmente interesada en los materiales que puedan albergar partículas exóticas y fenómenos que puedan aportar información sobre cuestiones fundamentales en la física de partículas [7].

Actualmente se han propuesto varios materiales como candidatos prometedores para el estudio de los semimetales de líneas nodales topológicas en física de alta energía. Por ejemplo ZrSiS, ZrSiSe, y CaAgP, cada uno de ellos con estructura electrónica distintiva presentando líneas nodales en sus diagramas de banda. En estos materiales se ha confirmado experimentalmente que exhiben fases topológicas intrigantes, lo que los hace muestras de interés en investigación y aplicaciones potenciales en tecnología [6].

Los nudos y enlaces son conceptos fundamentales en matemáticas, particularmente en el campo de la topología. Los nudos son curvas cerradas embebidas en el espacio tridimensional sin auto intersecciones, esencialmente es una curva enredada que no puede ser desenredada sin cortarla. Mientras que los enlaces corresponden a la unión de dos o más nudos. La tarea de clasificar o distinguir a los nudos ha sido difícil, pero se han definido invariantes de nudos, los cuales son un subconjunto de las invariantes topológicas y capturan aspectos específicos de la naturaleza antropológica de los nudos y los enlaces [8, 9]. En la actualidad se ha realizado una amplia investigación en proponer materiales que tengan definido invariantes de nudos y estudiar sus características electrónicas, en especial para los semimetales de líneas nodales topológicas [10–12].

En conclusión, la exploración de los semimetales topológicos de líneas nodales representa una de las investigaciones de frontera en el estudio de física de materia condensada, con implicaciones en el ámbito de la tecnología y física teórica. Las propiedades electrónicas únicas de estos materiales que fueron vislumbrados por los resultados de la investigación en el grafeno continúan cautivando el interés, realizando búsquedas en nuevos materiales y expande nuestro entendimiento en los estados de la materia cuántica topológica.

La estructura de la tesis es la siguiente, en el capítulo dos construimos la ecuación de Dirac y su relación con modelos genéricos de semimetales de nodos, luego definimos la fase geométrica de Berry importante para poder clasificar la topología en los nodos, donde se agrega el estudio del modelo SSH para destacar las respuestas electrónicas asociadas a las invariantes topológicas.

En el capítulo tres se definen nudos y enlaces particulares, los llamados nudos y enlaces toroidales, donde estudiamos su topología con la finalidad de construir un modelo continuo de semimetales topológico de línea nodal, el cual definiremos como semimetal topológico de nudo y enlace toroidal.

En el capítulo cuatro se propondrán modelos de redes cúbicas asociados a los semimetales topológicos continuos con los cuales se realizó un estudio de la estructura electrónica al romper condiciones de periodicidad y su respuesta electrónica en un dispositivo con dos terminales.

En el capítulo cinco, estudiamos la caracterización de los nodos por su fase geométrica en los modelos de dos niveles. Además, propusimos modelos de cuatro bandas con energías degeneradas, con el objetivo de estudiar la cohomología de los enlaces toroidales, y hacemos una propuesta de modelo de semimetal topológico de nudo y enlace toroidal con bandas degeneradas. Se realiza una búsqueda de materiales no abelianos en el campo de los semimetales topológicos de líneas nodales.

# 2 Ecuación de Dirac y Semimetales Topológicos

En este capítulo introducimos la ecuación de Dirac, la cual es utilizado para describir fermiones libres relativistas en el sector fermiónico del Modelo Estándar, en nuestro caso veremos una interpretación en materia condensada para los electrones en el nivel de la energía de Fermi. Primero, partimos de las ideas de Dirac para obtener una ecuación de la mecánica cuántica con los resultados de la relatividad especial. A partir de la ecuación de Dirac, definimos modelos genéricos de semimetales de nodos topológicos de dos y cuatro bandas. Después, definimos la teoría de norma para sistemas cuánticos, donde se define la fase de Berry y la matriz de rotación de Berry con el teorema de la aproximación adiabática, esta teoría es fundamental en la descripción de las fases topológicas. Al final, presentamos el modelo de amarre fuerte, y tomamos el modelo SSH para realizar el estudio de su estructura de bandas e interpretamos las consecuencias de la topología de las bandas.

## 2.1. Ecuación de Dirac

### 2.1.1. Ecuación de Klein-Gordon

El primer intento de obtener una ecuación en la mecánica cuántica relativista fue la ecuación de Klein-Gordon, en la cual se requiere de unos de los principales resultados de la relatividad especial, la energía de una partícula libre relativista,

$$E^2 = (p^2 + m^2c^2)c^2. \quad (2.1)$$

Antes de empezar a introducir todo nuestro desarrollo se hace la elección de las unidades naturales definidas:

$$\hbar = c = 1. \quad (2.2)$$

Por lo que nuestra ecuación (2.1) es,

$$E^2 = p^2 + m^2. \quad (2.3)$$

Algunas de las variables canónicas que se utilizan en la formulación de la mecánica cuántica son,

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \hat{H} \longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = i\frac{\partial}{\partial t}, \quad (2.4)$$

$$\hat{\mathbf{P}}\psi = \mathbf{p}\psi \quad \hat{\mathbf{P}} \longrightarrow i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} = i\nabla_{\mathbf{r}}, \quad (2.5)$$

en donde se han expresado las variables en un lenguaje de operadores diferenciales sobre los estados  $\psi$  de un sistema cuántico. Una idea inicial para una ecuación cuántica en la relatividad especial, es proponer la ecuación (2.3) en términos de operadores sobre algún estado cuántico relativista  $\psi$  (recordar la elección de unidades naturales),

$$E^2\psi = (p^2 + m^2)\psi, \quad (2.6)$$

$$\left(\hat{H}^2\right)\psi = \left(\mathbf{P}^2 + m^2\right)\psi, \quad (2.7)$$

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi = \left(-\nabla^2 + m^2\right)\psi, \quad (2.8)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2\right)\psi = 0, \quad (2.9)$$

$$\left(\partial^\mu\partial_\mu + m^2\right)\psi = 0, \quad \text{definiendo} \quad \partial^\mu\partial_\mu \equiv \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2; \quad (2.10)$$

donde se ha tomado la elección de la métrica  $\eta^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ , la ecuación (2.10) es la ecuación de Klein-Gordon. Ahora observamos que  $\partial^\mu\partial_\mu$  y  $m^2$  son escalares invariantes de Lorentz, por lo que nuestra propuesta para solución debe ser una onda plana que obedece una ecuación escalar para preservar la invarianza de Lorentz,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)}, \quad (2.11)$$

sustituimos nuestra solución en la ecuación (2.10) tendremos que,

$$E^2\psi = (p^2 + m^2)\psi,$$

entonces, la relación de dispersión de las ondas planas en la Ecuación de K-G satisfacen la relación de dispersión de una partícula libre relativista en un espacio tiempo plano. En los postulados de la mecánica cuántica, para describir un sistema cuántico tenemos que considerar todas las soluciones y la combinación lineal de estas forman un conjunto completo de estados, por lo que no se puede ignorar las soluciones de energía negativa, lo cual es inconsistente para una partícula libre. Además, hay una inconsistencia con la densidad de probabilidad, la cual podemos interpretar del siguiente cálculo.

Consideremos la ecuación adjunta  $\psi^*$ :

$$\left(\partial^\mu\partial_\mu + m^2\right)\psi^* = 0, \quad \text{solución adjunta}, \quad (2.12)$$

continuando, multiplicamos la solución adjunta  $\psi^*$  por la ec. (2.10),

$$\psi^* \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla \cdot \nabla + m^2\right)\psi = 0, \quad (2.13)$$

$$\psi^* \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \psi^* \nabla \cdot \nabla\psi + m^2\psi^*\psi = 0, \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( i\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) - i \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \frac{\partial\psi}{\partial t} - \nabla \cdot (i\psi^* \nabla\psi) + i \nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + im^2\psi^*\psi = 0. \quad (2.15)$$

En la última línea hemos multiplicado por  $i$  y hemos introducido el producto en términos de operadores lineales, esto ya que sumaremos la parte conjugada dentro de los paréntesis, así,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( i\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - i\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) + i\psi \left( \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial^2 t} \right) - \nabla \cdot (i\psi^* \nabla \psi - i\psi \nabla \psi^*) - i\psi \nabla^2 \psi^* + im^2 \psi^* \psi = 0, \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ i \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \right] + \nabla \cdot \left[ -i \left( \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) \right] + \underbrace{i\psi \left( \partial^\mu \partial_\mu + m^2 \right) \psi^*}_0 = 0, \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (2.18)$$

donde en la última línea hemos propuesto una ecuación de continuidad y podemos identificar una densidad de probabilidad y una densidad de corriente de probabilidad superficial,

$$\rho = i \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right), \quad y \quad \mathbf{j} = -i \left( \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right). \quad (2.19)$$

Al sustituir en nuestra solución de onda plana,

$$\rho = i \left( A^* e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)} (-iEAe^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}) - Ae^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)} (iEA^* e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}) \right) = -i^2 (2|A|^2 E), \quad (2.20)$$

$$\rho = 2|A|^2 E, \quad (2.21)$$

$$\mathbf{j} = -i \left( A^* e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)} (i\mathbf{p}Ae^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}) - Ae^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)} (-i\mathbf{p}Ae^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}) \right) = -i^2 2|A|^2 \mathbf{p}, \quad (2.22)$$

$$\mathbf{j} = 2|A|^2 \mathbf{p}. \quad (2.23)$$

Entonces, es notable que la densidad de probabilidad es negativa para energías negativas, lo cual lleva a una segunda inconsistencia para la ecuación de Klein-Gordon<sup>1</sup>

<sup>1</sup>**Interpretación de Feynman-Stueckelberg.** Para corregir los errores de las energías negativas, se propone que el tiempo debe de ser negativo en estos casos, esto es que:

$$E \quad i \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E_- \quad -i \frac{\partial}{\partial t}. \quad (2.24)$$

Por otro lado, la densidad de probabilidad lo asociamos a una densidad de carga, por lo cual, para energías negativas debemos tener una carga de signo opuesto [13],

$$\rho = Q2|A|^2 E, \quad E \rightarrow E_-, \quad \rho = -Q2|A|^2 E. \quad (2.25)$$

### 2.1.2. Ecuación de Dirac

La observación de Dirac en la ecuación de Klein-Gordon es que las soluciones de energías negativas parten del hecho que la derivada temporal es de segundo orden, es de esperar que las energías negativas sean parte de la solución para los estados cuánticos relativistas. Entonces, Dirac se propuso definir una ecuación relativista que sea lineal en el tiempo como lo es la ecuación de Schrödinger [14], para un primer acercamiento consideremos:

$$\left(\partial^\mu \partial_\mu + m^2\right)\psi = \left(\sqrt{\partial^\mu \partial_\mu} + im\right)\left(\sqrt{\partial^\mu \partial_\mu} - im\right)\psi, \quad (2.26)$$

como vemos el problema es en definir  $\sqrt{\partial^\mu \partial_\mu}$  [15]. Antes consideraremos una función diferenciable definida en el plano complejo, decimos que una función  $f$  es holomorfa si y solo si satisface las ecuaciones de Cauchy-Riemann:

$$\frac{\partial f}{\partial \bar{z}} = 0, \quad \text{con} \quad \frac{\partial}{\partial \bar{z}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad (2.27)$$

similarmente podemos considerar el operador,

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} - i\frac{\partial f}{\partial y}\right) = 0, \quad (2.28)$$

y decimos que  $f$  es antiholomorfa [16]. Usando estos dos operadores, podemos definir un operador diferencial  $\mathbf{P} : C^\infty(\mathbb{R}^2; \mathbb{C}^2) \rightarrow C^\infty(\mathbb{R}^2; \mathbb{C}^2)$ , el cual está definido como:

$$\mathbf{P} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial \bar{z}} \\ \frac{\partial f}{\partial \bar{z}} \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial y}, \quad (2.30)$$

$$\mathbf{P} = \gamma_x \partial_x + \gamma_y \partial_y, \quad \gamma_x = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

donde se cumplen las siguientes relaciones:

$$\gamma_x^2 = \gamma_y^2 = -\mathbb{I}, \quad \gamma_x \gamma_y + \gamma_y \gamma_x = \{\gamma_x, \gamma_y\} = 0$$

A partir de estas propiedades, realizamos el siguiente cálculo:

$$\mathbf{P}^2 = \left(\gamma_x \partial_x + \gamma_y \partial_y\right) \left(\gamma_x \partial_x + \gamma_y \partial_y\right), \quad (2.32)$$

$$= \gamma_x^2 \partial_x^2 + \partial_x \partial_y \gamma_x \gamma_y + \partial_y \partial_x \gamma_y \gamma_x + \gamma_y^2 \partial_y^2, \quad (2.33)$$

$$= -\partial_x^2 \mathbb{I} + \partial_x \partial_y \{\gamma_x, \gamma_y\} - \partial_y^2 \mathbb{I} = -\nabla^2 \mathbb{I}, \quad (2.34)$$

nuestro resultado final nos lleva a un resultado similar al operador  $\hat{\mathbf{P}}$ , además, podemos definir,

$$\mathbf{P} = \sqrt{-\nabla^2} \mathbb{I}.$$

Regresando a nuestro problema inicial, queremos definir,

$$\hat{H} = \sqrt{-\nabla^2 + m^2}, \quad (2.35)$$

nuestro problema se reduciría al caso anterior si no hubiera un término de masa, por lo que nuestro problema a resolver es,

$$\hat{H}_D = (\alpha \cdot \mathbf{P} + \beta m), \quad (2.36)$$

en término de los operadores diferenciales de momento y energía escribimos nuestra ecuación como

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( -i\alpha_x \frac{\partial}{\partial x} - i\alpha_y \frac{\partial}{\partial y} - i\alpha_z \frac{\partial}{\partial z} + \beta m \right) \psi, \quad (2.37)$$

si queremos que nuestras soluciones a la ecuación (2.37) describa a una partícula libre relativista debe de satisfacer la ecuación de Klein-Gordon al elevar al cuadrado, por lo que una intuición de la ecuación de Dirac es la raíz cuadrada de la ecuación de K-G, por lo que multiplicar por un menos en la ecuación (2.37), elevando al cuadrado,

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \left( i\alpha_x \frac{\partial}{\partial x} + i\alpha_y \frac{\partial}{\partial y} + i\alpha_z \frac{\partial}{\partial z} - \beta m \right) \left( i\alpha_x \frac{\partial}{\partial x} + i\alpha_y \frac{\partial}{\partial y} + i\alpha_z \frac{\partial}{\partial z} - \beta m \right) \psi, \quad (2.38)$$

desarrollando el producto:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = & -\alpha_x^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \alpha_y^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \alpha_z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \beta^2 m^2 \psi \\ & - (\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - (\alpha_x \alpha_z + \alpha_z \alpha_x) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial z} - (\alpha_y \alpha_z + \alpha_z \alpha_y) \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial z} \\ & - i(\alpha_x \beta + \beta \alpha_x) m - i(\alpha_y \beta + \beta \alpha_y) m - i(\alpha_z \beta + \beta \alpha_z) m, \end{aligned} \quad (2.39)$$

la ecuación que debemos obtener es,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + m^2 \psi = 0, \quad (2.40)$$

por lo que debemos de imponer propiedades que deban satisfacer<sup>2</sup>  $\alpha$  y  $\beta$ , considerando las últimas dos líneas en la ecuación (2.39)

$$\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1, \quad (2.41)$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0, \quad i \in \{x, y, z\}, \quad (2.42)$$

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 0 \quad (i \neq k). \quad (2.43)$$

<sup>2</sup>En nuestra notación nos referimos a 1 como el elemento neutro multiplicativo, de igual manera expresamos 0 como el elemento neutro aditivo para espacios vectoriales arbitrarios.



una primera impresión en estas condiciones es que  $\alpha$  y  $\beta$ , no son escalares por la condición de anticonmutatividad, donde hemos descartado la solución trivial, y los objetos más conocidos con esta propiedad son las matrices.<sup>3</sup> Asumimos que  $\alpha_i$  y  $\beta$ , realizamos los siguientes cálculos: primero consideremos las propiedades de la traza, esto es:

$$\text{Tr}(\alpha_i) = \text{Tr}(\alpha_i \beta \beta) \quad \beta \beta = \mathbb{I}, \quad (2.44)$$

$$= \text{Tr}(\beta \alpha_i \beta) \quad \text{Propiedad cíclica de la traza}, \quad (2.45)$$

$$= \text{Tr}(-\alpha_i \beta \beta) \quad \text{Relación de anticonmutación}, \quad (2.46)$$

$$= \text{Tr}(-\alpha_i) = -\text{Tr}(\alpha_i) \quad \text{Tr}(\alpha_i) \in \mathbb{R}, \quad (2.47)$$

$$\therefore \text{Tr}(\alpha_i) = 0, \quad (2.48)$$

de manera análoga sucede para  $\beta$ . Luego tomemos a  $|\mu\rangle$  como eigenvector de  $\alpha_\mu \in \{\alpha_i, \beta\}$ , tal que:

$$\alpha_\mu^2 |\mu\rangle = \lambda_\mu \alpha_\mu |\mu\rangle, \quad \lambda_\mu \quad \text{Eigenvector de } \alpha_\mu \quad (2.49)$$

$$\mathbb{I} |\mu\rangle = \lambda_\mu^2 |\mu\rangle \quad (2.50)$$

$$\therefore \lambda_\mu = \pm 1, \quad \text{si } \alpha_\mu \text{ es hermítico}, \quad (2.51)$$

dado que la traza de la matriz está dada por la suma de los elementos en la diagonal,  $\alpha_\mu$  tiene que ser una matriz de dimensión par. Finalmente, retomamos nuestro operador hamiltoniano de Dirac,

$$\hat{H}_D = \left( \alpha \cdot \mathbf{P} + \beta m \right),$$

proponemos a  $\hat{H}$  hermitiano para que sus eigenvalores sean reales, entonces;

$$\alpha_i = \alpha_i^\dagger \quad y \quad \beta = \beta^\dagger; \quad (2.52)$$

para espacios 1 y 2 dimensional espacial, al ser la dimensión de  $\alpha_i$  par, nuestros elementos que obedecen las reglas de anticonmutación son las matrices de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad y \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Así, en un sistema unidimensional, las dos matrices de Dirac  $\alpha_x$  y  $\beta$  son cualquiera de las tres matrices de Pauli, por ejemplo,

$$\alpha_x = \sigma_x \quad y \quad \beta = \sigma_z.$$

En dos dimensiones, las tres matrices de Dirac son las matrices de Pauli,

$$\alpha_x = \sigma_x, \quad \alpha_y = \sigma_y \quad y \quad \beta = \sigma_z. \quad (2.53)$$

<sup>3</sup>En general los objetos que satisfacen estas estructuras, forman el espacio vectorial de las álgebras de Clifford

En tres dimensiones, dada las dimensiones par de nuestras matrices con relaciones de anti-conmutación, tenemos que tomarnos matrices de dimensión  $4 \times 4$  ya que las tres matrices de Pauli no son suficientes, una elección conocida es la *representación de Pauli-Dirac* [14]:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x \otimes \sigma_i, \quad \beta = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & -\sigma_0 \end{pmatrix} = \sigma_z \otimes \sigma_0, \quad \text{y} \quad \sigma_0 = \mathbb{I}_2. \quad (2.54)$$

Entonces, si el hamiltoniano de Dirac es un operador matricial de  $4 \times 4$  este debe de actuar sobre una función de 4 componentes, este elemento es conocido como espinor de Dirac o biespinores:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (2.55)$$

### 2.1.3. Algunos Aspectos de la Ecuación de Dirac

#### Densidad de Probabilidad y Corriente de Probabilidad

Las expresiones para la corriente de probabilidad y densidad de probabilidad para las soluciones de la ecuación de Dirac se obtienen de forma análoga a las de la ecuaciones de Schrödinger y de Klein-Gordon. Dado que las funciones de onda son espinores de 4 componentes, el conjugado complejo de la función de onda tiene que ser reemplazado por el hermitiano conjugado,  $\psi^* \rightarrow \psi^\dagger = (\psi^*)^T$ . El hermitiano conjugado de la ecuación (2.37) es simplemente,

$$-i\partial_t\psi^\dagger = i\partial_x\psi^\dagger\alpha_x^\dagger + i\partial_y\psi^\dagger\alpha_y^\dagger + i\partial_z\psi^\dagger\alpha_z^\dagger + m\psi^\dagger\beta^\dagger. \quad (2.56)$$

Usando las propiedades de hermiticidad de las matrices  $\alpha$  y  $\beta$ , calculamos una expresión para  $\psi^\dagger$  multiplicada por la diferencia de las ecuaciones (2.37) y (2.56)), y el volvemos a multiplicar por  $\psi$ , lo que nos lleva al resultado,

$$\nabla \cdot (\psi^\dagger \alpha \psi) + \partial_t(\psi^\dagger \psi) = 0,$$

en término de las cuatro componentes de los espinores de Dirac, la densidad de probabilidad es,

$$\rho = \psi^\dagger \psi = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_3^* \psi_3 + \psi_4^* \psi_4,$$

por lo que Dirac ha resuelto el problema de probabilidad negativa.

#### Espín y la Ecuación de Dirac

La formulación de la mecánica cuántica en el esquema de Heisenberg (Heisenberg Picture) nos dice que la evolución temporal del sistema está dado por la evolución de los operadores observables  $\hat{O}$ ,

$$\frac{dO}{dt} = \frac{d\langle \hat{O} \rangle}{dt} = i \langle \psi | [\hat{H}, \hat{O}] | \psi \rangle. \quad (2.57)$$

Por lo tanto, si un operador conmuta con el hamiltoniano el valor esperado es una constante de movimiento. Consideremos el hamiltoniano de la partícula libre de Dirac, y veamos como es su relación de conmutación con el operador de momento angular  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{P}}$ , esto es:

$$[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{L}}] = [\alpha \cdot \hat{\mathbf{P}} + m\beta\mathbb{I}, \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{P}}] = [\alpha \cdot \hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{P}}] = -i\alpha \times \hat{\mathbf{P}}.$$

Por otro lado, definimos

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\hat{\Sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \sigma \end{pmatrix},$$

la relación de conmutación con el Hamiltoniano de Dirac es,

$$[\hat{H}_D, \hat{\mathbf{S}}] = i\alpha \times \hat{\mathbf{P}},$$

definimos el momento angular total como  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ , y este nuevo operador si conmuta con el Hamiltoniano de Dirac, por lo que las partículas relativistas tienen como propiedad intrínseca el espín, de un cálculo de eigenenergías llegamos a que  $s = \frac{1}{2}$ .

#### 2.1.4. Simetrías Discretas en la Ecuación de Dirac

Existen dos transformaciones unitarias discretas de importancia en los fenómenos físicos, estos son: transformación de paridad  $\mathcal{P}$  y transformación de inversión temporal  $\mathcal{T}$ . Ahora definiremos estas transformaciones en el ámbito de la ecuación de Dirac [14, 17].

##### Ecuación de Dirac Covariante

Antes de definir las transformaciones discutiremos la forma covariante de la ecuación de Dirac. En la ecuación (2.54) se dió una representación del álgebra de Dirac, sin embargo, es más usual construir una representación para la ecuación de Dirac en forma covariante:

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0, \quad (2.58)$$

el producto de las matrices  $\gamma$  son:

$$(\gamma^0)^2 = 1, \quad (2.59)$$

$$(\gamma^i)^2 = -1, \quad i \in \{1, 2, 3\} \quad (2.60)$$

$$\gamma^\mu \gamma^\nu = -\gamma^\nu \gamma^\mu. \quad (2.61)$$

$$(2.62)$$

Las relaciones de anticonmutación de los elementos de la ecuación (2.62) está dado como:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}, \quad (2.63)$$

entonces, una elección para la representación del álgebra es [14, 18]:

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_y \otimes \sigma_i \quad (2.64)$$

### Simetría de Paridad

La transformación de paridad  $\mathcal{P}$  corresponde a una inversión espacial desde el origen,

$$x' = -x, \quad y' = -y \quad z' = -z \quad y \quad t' = t,$$

la invarianza de la ecuación (2.58) bajo la transformación de paridad implica que debe ser equivalente a,

$$(i\gamma^\mu \partial'_\mu - m) \psi'(x') = 0 \quad \text{donde } \psi' = \mathcal{P}\psi,$$

por lo tanto, se tiene que cumplir que:

$$\mathcal{P}^{-1} \left( i \left( \gamma^0 \frac{\partial}{\partial x^0} + \gamma^i \frac{\partial}{\partial (-x^i)} \right) - m \right) \mathcal{P}\psi = \left( i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - m \right) \psi \quad (2.65)$$

$$\mathcal{P}^{-1}\gamma^0\mathcal{P} = \gamma^0, \quad \mathcal{P}^{-1}\gamma^i\mathcal{P} = -\gamma^i \Rightarrow \mathcal{P}|\psi\rangle = \gamma^0|\psi\rangle. \quad (2.66)$$

Entonces, ya tenemos una representación para la transformación de paridad y podemos ver como actúa  $\mathcal{P}$  sobre las matrices de Dirac en la ecuación (2.64).

### Simetría de Inversión Temporal

La simetría de inversión temporal  $\mathcal{T}$  actúa de la siguiente manera:

$$t' = -t \quad x' = x, \quad y' = y \quad z' = z.$$

Ahora tenemos que definir la ecuación de Dirac conjugada,

$$(-i\gamma^{\mu*} \partial'_\mu - m) \psi^* = 0.$$

Antes de calcular la representación matricial de  $\mathcal{T}$ , proponemos el ansatz  $\mathcal{T}|\psi\rangle = B|\psi^*\rangle$ , esto lo sustituimos en la ecuación de Dirac (2.58) y partimos de manera análoga al caso anterior:

$$B^{-1}(-i\gamma^{\mu*})B = i\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 \Rightarrow B = i\gamma^1\gamma^3, \quad \mathcal{T}|\psi\rangle = i\gamma^1\gamma^3|\psi^*\rangle. \quad (2.67)$$

el resultado de la ecuación (2.67) es una representación para  $\mathcal{T}$  y como actúa sobre las matrices de Dirac.

## 2.2. Semimetales de Nodos Topológicos

En esta sección presentamos uno de los resultados de la ecuación de Dirac en la construcción de las matrices hermitianas, importante en la construcción de modelos genéricos de semimetales de nodos topológicos.

### 2.2.1. Modelo de 4 bandas

En la descripción de los materiales con simetrías de inversión temporal  $\mathcal{T}$  y paridad  $\mathcal{P}$  presentes, es posible tener una transición directa en un punto crítico de aislante normal a aislante topológico (similar a las transiciones del modelo SSH), donde se da la formación de un biespinor de Dirac (3+1-dimensional quasi-fermión de Dirac sin masa) en un punto crítico. Esto ocurre para momentos  $\vec{k}$  invariante ante inversión temporal  $\mathcal{T}$ , el cual por simplicidad podemos asumir el punto  $\Gamma$  con  $\vec{k} = 0$ .

La aproximación  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  alrededor del punto  $\Gamma$ , toma la forma genérica:

$$H_0 = \sum_{a=1}^3 k_a \gamma_a + m \gamma_4, \quad \gamma_\mu (\mu = 1, \dots, 5); \quad (2.68)$$

con los elementos de las matrices de la representación de Dirac (hemos definido dos representaciones anteriormente), adicionalmente se toma un elemento extra al álgebra  $\gamma^5 = i \prod_{\mu=0}^4 \gamma^\mu$ , para una elección arbitraria y fija, uno puede construir una colección de 10 matrices dado por sus productos:

$$\gamma_{\mu\nu} = -\frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \text{ con } \mu < \nu.$$

Los resultados son  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{b}'$ ,  $\mathbf{p}$  y un escalar  $\varepsilon$ . Es interesante que al tomar la matriz unidad uno genera una base de las matrices hermitianas, por lo que dependiendo de la simetría  $\mathcal{P}$  y  $\mathcal{T}$  que uno imponga en su hamiltoniano, se puede agregar estos términos de perturbación alrededor de los puntos críticos. Las simetrías de los elementos de matrices de Dirac hermitianas se resume en la tabla (2.1).

Operador	$\mathcal{T}$	$\mathcal{P}$
$\mathbf{b} = (\gamma_{23}, \gamma_{13}, \gamma_{12})$	-1	+1
$\mathbf{p} = (\gamma_{14}, \gamma_{24}, \gamma_{34})$	+1	-1
$\mathbf{b}' = (\gamma_{15}, \gamma_{25}, \gamma_{35})$	-1	+1
$\varepsilon = \gamma_{45}$	+1	-1

Tabla 2.1: Transformaciones ante las simetrías  $\mathcal{T}$  y  $\mathcal{P}$  de las matrices hermitianas de Dirac

Es importante que en esta generalización que cuando uno tiene matrices hermitianas que preservan la simetría  $\mathcal{P}$  o  $\mathcal{T}$ , uno puede agregar estos términos. De nuestro interés es mencionar las condiciones para obtener nodos lineales [4].

#### Perturbaciones que Rompen $\mathcal{T}$

Un hamiltoniano general que preserva paridad y rompe la simetría de reversión temporal de acuerdo a la tabla (2.1), está dado por,

$$H_1 = H_0 + \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{v} \cdot \mathbf{b}'. \quad (2.69)$$

$$H_1 = h_0 + v b_1$$

**Perturbación en  $b'$** , supongamos que para una rotación  $\mathcal{O}(3)$  y con el término  $\mathbf{u} = 0$ , esto es tener el hamiltoniano  $H_1 = H_0 + vb'_x$ , y con relación de dispersión

$$\epsilon_1(|u| = 0) = \pm \sqrt{(\sqrt{m^2 + k_2^2 + k_3^2} \pm v)^2 + k_1^2} \quad (2.70)$$

para este caso, cuando  $|v| > m$ , hay dos bandas interesecadas a lo largo en una circunferencia, definido por  $k_2^2 + k_3^2 = v^2 - m^2$  y  $k_1 = 0$ .

**Perturbación  $\mathbf{u} \parallel \mathbf{v}$** , para el caso  $m = 0$ , podemos realizar una rotación en el sistema, de tal forma que,  $\mathbf{u} = (u, 0, 0)$  y  $\mathbf{v} = (v, 0, 0)$ , donde el espectro está dado como

$$\epsilon_1(m = 0) \pm \left[ u^2 + v^2 + k^2 \pm 2\sqrt{u^2v^2 + u^2k_1^2 + v^2(k_2^2 + k_3^2)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.71)$$

Para el caso  $|u| < |v|$ , se forman la línea nodal en  $k_1 = 0$  y  $k_2^2 + k_3^2 = v^2 - u^2$ .

### Perturbaciones que Rompen $\mathcal{T}$

Para sistemas con rompimiento en la simetría de paridad, y manteniendo la simetría de inversión temporal, el hamiltoniano con coeficientes reales más general es

$$H_2 = H_0 + \mathbf{w} \cdot \mathbf{p} + \lambda \epsilon. \quad (2.72)$$

De manera análoga, realizando una rotación llegamos a  $H_2 = H_0 + wp_1 + \lambda \epsilon$ . La relación de dispersión está dado como

$$\epsilon_2 = \pm \left[ m^2 + w^2 + \lambda^2 + k^2 \pm 2\sqrt{\lambda^2 k_1^2 + (w^2 + \lambda^2)(k_2^2 + k_3^2)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.73)$$

para  $m = 0$ , se forma una línea nodal para  $k_1 = 0$ ,  $k_2^2 + k_3^2 = w^2 + \lambda^2$ .

### 2.2.2. Sistema de Dos Niveles

De manera análoga al caso de cuatro bandas, al agregar la matriz identidad se puede construir una base para las matrices hermitianas con coeficientes reales [19],

$$H(\vec{k}) = d_0(\vec{k})\mathbb{I} + \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma}, \quad \vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (2.74)$$

en general uno denomina a estos sistemas como modelo de dos niveles, pero en nuestro caso nos referimos a modelo de dos bandas.

Las líneas nodales descritas anteriormente ocurren en bandas sin degeneración. Por lo que podemos describir sistemas de líneas nodales en sistema de dos bandas a partir de la ecuación (2.74).

## 2.3. Fases Geométricas en la Ecuación de Schrödinger

En la sección anterior se habló de la mecánica cuántica y la relatividad especial solo para introducir la ecuación de Dirac que se empleará durante toda la discusión siguiente. Regresando a la mecánica cuántica de baja energía, es importante la consideración de la aproximación adiabática en la evolución de los estados cuánticos. Primero definimos la fase de Berry o fase geométrica para un nivel de energía sin degeneración. Después, analizamos el caso para niveles de energía con degeneraciones donde se define la matriz de rotación, del cual es importante destacar que para este caso podemos encontrar fases no abelianas [20].

### 2.3.1. Fase de Berry en Sistemas sin Degeneración

La fase de Berry es una fase de ángulo (tomando valores de 0 a  $2\pi$ ) que describe la evolución de la fase global de un vector complejo que es desplazado sobre un camino en su espacio vectorial. El estudio de estas fases en la teoría de bandas de sistemas cuánticos ha sido importante para los modelos de electrones en cristales, en especial su aplicación en la dinámica de sistemas adiabáticos para cristales finitos [21, 22]. Consideremos un sistema que varía lentamente con los parámetros  $\boldsymbol{\lambda}(t)$ , a cada instante  $t$ , la ecuación de Schrödinger es,

$$H_{\boldsymbol{\lambda}} |n, \boldsymbol{\lambda}\rangle = \varepsilon_{n,\boldsymbol{\lambda}} |n, \boldsymbol{\lambda}\rangle, \quad (2.75)$$

si agregamos al estado  $|n, \boldsymbol{\lambda}\rangle$  una fase  $\chi_n(\boldsymbol{\lambda}(t))$ , seguirá cumpliendo la ecuación (2.75). Ahora supongamos un nivel de energía  $\varepsilon_{n\boldsymbol{\lambda}}$  que mantiene una brecha de energía mínima  $\Delta_0$  durante el curso de su evolución y de acuerdo a la aproximación adiabática, se debe de cumplir que  $\Omega_0 \ll \Delta_0/\hbar$ , de tal forma que un estado inicial  $|n, \boldsymbol{\lambda}_0\rangle$  permanecerá en nivel o banda  $n$ . Después de un tiempo  $t$ , el estado evolucionará al estado  $|n, \boldsymbol{\lambda}_t\rangle$ , multiplicado por un factor de fase dinámica,

$$|n, \boldsymbol{\lambda}_0\rangle \rightarrow |\Psi_{n\boldsymbol{\lambda}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_{n,\boldsymbol{\lambda}(t')}} |n, \boldsymbol{\lambda}(t)\rangle.$$

Además, es posible desarrollar una fase  $\gamma_n(\boldsymbol{\lambda}(t))$  dependiente de  $\boldsymbol{\lambda}$ , en general,

$$|n, \boldsymbol{\lambda}_0\rangle \rightarrow |\Psi_{n\boldsymbol{\lambda}}(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_{n,\boldsymbol{\lambda}(t')}} |n, \boldsymbol{\lambda}(t)\rangle. \quad (2.76)$$

En la era temprana de la mecánica cuántica se pensaba que esta fase podía ser removida por el factor de fase  $\chi_n(\boldsymbol{\lambda}(t))$ . Sin embargo, Berry demostró lo contrario en 1984 [23].

La fase  $\gamma_n$  está constreñida por la ecuación de Schrödinger temporal,

$$H |\Psi_{n\boldsymbol{\lambda}}(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_{n\boldsymbol{\lambda}}(t)\rangle. \quad (2.77)$$

Sustituyendo la ecuación (2.76) en la ecuación (2.77), se obtiene:

$$\frac{d\gamma_n(t)}{dt} = i \left\langle n, \boldsymbol{\lambda} \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n, \boldsymbol{\lambda} \right\rangle \quad (2.78)$$

$$\rightarrow \gamma_n(t) = i \int_0^t dt' \left\langle n, \boldsymbol{\lambda} \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| n, \boldsymbol{\lambda} \right\rangle. \quad (2.79)$$

Dado un periodo o un cambio cíclico de los parámetros,

$$\boldsymbol{\lambda}(0) \rightarrow \boldsymbol{\lambda}(T) = \boldsymbol{\lambda}(0)$$

se obtiene,

$$\gamma_n(T) = i \oint_C d\boldsymbol{\lambda} \cdot \left\langle n, \boldsymbol{\lambda} \left| \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right| n, \boldsymbol{\lambda} \right\rangle, \quad (2.80)$$

donde  $C$  es un lazo o circuito en el espacio de parámetros de  $\boldsymbol{\lambda}$ . La fase  $\gamma_n(T)$  o  $\gamma_n(C)$ , se llama la fase de Berry y es adquirida para el estado  $|\Psi_n\rangle$  después de que realiza un ciclo en el nivel de energía  $n$ . Esto solo dependerá de la geometría del lazo  $C$  y no de la pendiente de  $\boldsymbol{\lambda}$ , siempre y cuando las transiciones de interbanda puedan ser despreciables.

### Transformación de Norma

El integrando de la ecuación (2.80), se define como la conexión de Berry,

$$\mathbf{A}_n(\boldsymbol{\lambda}) \equiv i \left\langle n, \boldsymbol{\lambda} \left| \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right| n, \boldsymbol{\lambda} \right\rangle. \quad (2.81)$$

Si agregamos una fase dependiente de  $\lambda$  al estado instantáneo

$$|n, \boldsymbol{\lambda}\rangle \rightarrow |n, \boldsymbol{\lambda}'\rangle = e^{i\chi(\boldsymbol{\lambda})} |n, \boldsymbol{\lambda}\rangle,$$

donde  $e^{i\chi(\boldsymbol{\lambda})}$  es una función univaluada, entonces

$$\mathbf{A}_n(\boldsymbol{\lambda}) \rightarrow \mathbf{A}'_n(\boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{A}_n(\boldsymbol{\lambda}) - \frac{\partial \chi}{\partial \boldsymbol{\lambda}}.$$

Esto es similar a la transformación de norma de un potencial vectorial en electromagnetismo. Antes del descubrimiento de Berry, las personas pensaban que al resolver la ecuación diferencial  $\partial\chi(\boldsymbol{\lambda})/\partial\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{A}_n(\boldsymbol{\lambda})$ , se obtiene que  $\mathbf{A}'_n(\boldsymbol{\lambda})$  es cero y puede ser removida [24]. Sin embargo, es posible sólo si la integral de camino en el lazo para la fase  $\gamma_n(C)$  es cero. Si no es el caso, tenemos que  $\gamma_n(C) \pmod{2\pi}$  es una invariante norma,

$$\gamma'_n(C) = \oint_C d\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{A}'_n(\boldsymbol{\lambda}) \quad (2.82)$$

$$= \oint_C d\boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{A}_n(\boldsymbol{\lambda}) - \chi(\boldsymbol{\lambda}(T)) + \chi(\boldsymbol{\lambda}(0)) \quad (2.83)$$

$$= \gamma_n(C) + 2\pi \times m \quad m \in \mathbb{Z} \quad (2.84)$$

por lo que es imposible remover  $\mathbf{A}_n(\boldsymbol{\lambda})$  por una transformación de norma. Cuando el espacio de parámetros es tridimensional, entonces uno puede aplicar el teorema de Stokes para escribir la fase de Berry, como una integral de superficie sobre un área  $S$  que tiene como frontera  $C$ ,

$$\gamma_n(C) = \int_S d^2\mathbf{a} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} \times \mathbf{A}_n \quad (2.85)$$

$$= \int_S d^2\mathbf{a} \cdot \mathbf{F}_n, \quad (2.86)$$



En el cual  $\mathbf{F}_n \equiv \nabla_{\lambda} \times \mathbf{A}_n$  es llamada la curvatura de Berry. En dimensiones más altas, el teorema de Stokes aún sigue siendo válido, pero necesita ser reescrito en términos de formas diferenciales. Una interpretación de la curvatura de Berry se da al considerar un pequeño lazo  $\square$ ,

$$\gamma_n(\square) \simeq d^2\mathbf{a} \cdot \mathbf{F}_n,$$

donde  $d^2\mathbf{a} = d^2a\hat{\mathbf{n}}$ , entonces,

$$\mathbf{F}_n \cdot \hat{\mathbf{n}} \simeq \frac{\gamma_n(\square)}{d^2a}.$$

Entonces, si hacemos tender el área de diferencia a cero, se tiene que la curvatura de Berry en  $\gamma$ , es igual al cociente de la fase de Berry para un lazo infinitesimal alrededor del punto y el área del del lazo.

### 2.3.2. Matriz de Rotación de Berry para Sistemas Cuánticos con Degeneración

Se puede construir el análisis al caso de niveles de energía con degeneración [25]. En este caso para un nivel de energía dado tenemos distintas funciones de onda, lo que trae como consecuencia que la conexión de Berry y la curvatura de Berry se conviertan en matrices con vectores en las entradas y matrices, respectivamente. Por simplicidad, consideremos un nivel de energía  $\varepsilon_{n\lambda}$  con sólo 2 eigenestados ortonormales globalmente (Esto es que la degeneración esta definida en toda la banda),  $|n, 1, \lambda\rangle$  y  $|n, 2, \lambda\rangle$ , adicionalmente, cumplen con la aproximación adiabática. Después de un tiempo  $t$ , la evolución de los estados estará dado por:

$$|\Psi_{n,1}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_{n\lambda}(t')} \times (|n, 1, \lambda(t)\rangle \Gamma_{11}(t) + |n, 2, \lambda(t)\rangle \Gamma_{21}(t)), \quad (2.87)$$

$$|\Psi_{n,2}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_{n\lambda}(t')} \times (|n, 1, \lambda(t)\rangle \Gamma_{12}(t) + |n, 2, \lambda(t)\rangle \Gamma_{22}(t)) \quad (2.88)$$

En notación de índices, tenemos ( $\alpha \in \{1, 2\}, \beta \in \{1, 2\}$ )

$$|\Psi_{n\beta}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_{n\lambda}(t')} \sum |n\alpha\lambda(t)\rangle \Gamma_{\alpha\beta}(t). \quad (2.89)$$

Se llama a  $\Gamma_{\alpha\beta}$  matriz de rotación de Berry, para ser consistentes con la condición de ortonormalidad, establecemos

$$\langle \Psi_{n\alpha} | \Psi_{n\beta} \rangle = \delta_{\alpha\beta},$$

además, la matriz de rotación de Berry debe ser unitaria,

$$\Gamma^\dagger \Gamma = \Gamma \Gamma^\dagger = 1.$$

De manera análoga, sustituimos en la ecuación de Schrödinger

$$H |\Psi_{n,\beta}(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_{n,\beta}(t)\rangle,$$

uno obtendrá,

$$\frac{d\Gamma_{\alpha\beta}}{dt} = - \sum_{\gamma} \left\langle n\alpha\lambda \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n\gamma\lambda \right\rangle \Gamma_{\gamma\beta} \quad (2.90)$$

$$= i \sum_{\gamma} \dot{\lambda}(t) \cdot \mathbf{A}_{\alpha\gamma}^{(n)}(\lambda) \Gamma_{\gamma\beta}, \quad (2.91)$$

ahora definimos

$$\mathbf{A}_{\alpha\beta}^{(n)}(\lambda) \equiv i \left\langle n\alpha\lambda \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \right| n\beta\lambda \right\rangle,$$

donde notamos que la conexión de Berry es una matriz con vectores en sus entradas,  $\vec{\mathcal{A}}^{(n)}$ . Ahora damos la ecuación con la solución para la matriz de rotación de Berry  $\Gamma(t) \in U(2)$  para  $n$  fija y arbitraria. Primero consideremos un tiempo infinitesimal  $dt$ :

$$\Gamma(t + dt) = \Gamma(t) + i dt \dot{\lambda}(t) \cdot \vec{\mathcal{A}}(t) \Gamma(t), \quad (2.92)$$

$$\simeq e^{i dt \dot{\lambda}(t) \cdot \vec{\mathcal{A}}(t)} \Gamma(t). \quad (2.93)$$

Realizamos particiones del camino completo  $[\lambda(t), \lambda(0)]$ , así que:

$$\Gamma(t) = \dots e^{i d\lambda \cdot \vec{\mathcal{A}}(\lambda_1)} e^{i d\lambda \cdot \vec{\mathcal{A}}(\lambda_0)} \Gamma(0), \quad (2.94)$$

$$\equiv P e^{i \int_{\lambda_0}^{\lambda(t)} d\lambda \cdot \vec{\mathcal{A}}(\lambda)}, \quad \Gamma(0) = 1, \quad (2.95)$$

$P$  es el operador de ordenamiento de camino, debido a la complejidad en las integrales, es común realizar su cálculo numéricamente.

Algunas veces uno se puede encontrar con el cálculo de la matriz  $\Gamma$  para energías que no están globalmente degenerados (existen regiones sin degeneración). En tales casos, el factor de fase dinámico en la ecuación (2.89) necesita ser cambiado a  $e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_{n\gamma\lambda}(t')}$  y del lado derecho de la ecuación (2.91) está multiplicado por  $e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (\varepsilon_{n\gamma\lambda} - \varepsilon_{n\alpha\lambda})}$ . De igual manera se puede definir la conexión y la curvatura, aunque la matriz de rotación está mezclado con la fase de otros niveles.

### Covariante de Norma

De manera análoga al caso anterior se construye la matriz  $\Gamma$  con factores extras dados por una matriz  $\mathcal{U}$  y se tiene que para caminos cerrados se cumple,

$$\Gamma'[C] = \mathcal{U}^\dagger(\lambda_0) \Gamma[C] \mathcal{U}(\lambda_0),$$

lo que nos dice que la matriz de rotación de Berry es covariante de norma. La curvatura de Berry  $\vec{\mathcal{F}}$  está definida como,

$$\vec{\mathcal{F}} = \nabla_{\vec{k}} \times \vec{\mathcal{A}} - i \vec{\mathcal{A}} \times \vec{\mathcal{A}}, \quad (2.96)$$

si tenemos que  $\vec{\mathcal{F}} = \vec{0}$  decimos que el sistema tiene una *conexión plana*.

### Cálculo Numérico de la Matriz de Rotación de Berry e Invariante de Norma en Sistemas Degenerados

Debido a que la matriz de rotación de Berry es covariante de norma, no puede ser medida, sin embargo existen cantidades asociadas a invariantes de norma, pero primero vamos a definir un método numérico para aproximar el cálculo de  $\Gamma$ . La ecuación correspondiente al cálculo numérico de la matriz de rotación de Berry usando la ecuación (2.95) se define a partir de las siguientes consideraciones [26]. Realizamos una partición del lazo  $C$  en  $N$  pasos dado como  $\{\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{N-1}, \lambda_N\}$  con  $\lambda_N = \lambda_0$ . Entonces, para cada paso se obtiene,

$$\left[ e^{id\lambda \cdot \vec{A}(\lambda_l)} \right]_{\alpha\beta} \approx \delta_{\alpha\beta} + id\lambda \cdot \mathbf{A}_{\alpha\beta}(\lambda_l) \quad (2.97)$$

$$= \langle \alpha \lambda_l | \beta \lambda_l \rangle - d\lambda \cdot \left\langle \alpha \lambda_l \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} \right| \beta \lambda_l \right\rangle \quad (2.98)$$

$$= \langle \alpha \lambda_l | \beta \lambda_l \rangle + d\lambda \cdot \left\langle \frac{\partial}{\partial \lambda} \alpha \lambda_l \left| \beta \lambda_l \right. \right\rangle \quad (2.99)$$

$$\approx \langle \alpha \lambda_{l+1} | \beta \lambda_l \rangle \quad (2.100)$$

En todo el camino, se tiene,

$$\Gamma_{\alpha\beta}(C) = \langle \alpha \lambda_0 | \beta_{N-1} \lambda_{N-1} \rangle \cdots \langle \beta_2 \lambda_2 | \beta_1 \lambda_1 \rangle \langle \beta_1 \lambda_1 | \beta \lambda_0 \rangle.$$

La expresión correspondiente en términos de matrices es,

$$\Gamma(C) = \mathcal{M}_{N-1} \cdots \mathcal{M}_1 \mathcal{M}_0, \quad \text{donde definimos } \langle \alpha \lambda_{l+1} | \beta \lambda_l \rangle. \quad (2.101)$$

una matriz unitaria, podemos definir su forma diagonalizada como

$$\Gamma(C) = \begin{pmatrix} e^{i\gamma_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & e^{i\gamma_D} \end{pmatrix}. \quad (2.102)$$

sabemos que para las matrices se pueden definir dos invariantes, estos son: la traza y el determinante. En la teoría de norma la traza de la matriz de rotación de Berry se puede definir como el operador *Wilson loop* que caracteriza al transporte paralelo [27],

$$\mathcal{W}_\gamma^A = \text{Tr}(\Gamma(C)) \quad (2.103)$$

$$= \text{Tr} \left\{ P \exp \left( \oint_\gamma \vec{A}(\vec{k}) \cdot d\vec{l} \right) \right\} \quad (2.104)$$

$$= \sum_{i=1}^D e^{i\gamma_i}. \quad (2.105)$$

En el estudio de los materiales topológicos es más común la elección del determinante,

$$\det(\Gamma(C)) = e^{i \sum_{i=1}^D \gamma_i} \quad (2.106)$$

$$= \det(\prod_{l=0}^{N-1} \mathcal{M}_l) \quad (2.107)$$

por lo que la fase de Berry total sería,

$$\sum_{i=1}^D \gamma_i = \text{Im} \ln(\det(\prod_{l=0}^{N-1} \mathcal{M}_l)) \quad (2.108)$$

## 2.4. Modelo de Amarre Fuerte: Modelo SSH

El modelo de SSH es fundamental para estudiar a las redes cristalinas por sus simetrías. Presentamos el modelo SSH para introducir las ideas de un hamiltoniano de dos bandas en el espacio de momentos, la diferencia de sistemas con fronteras y bulto, la simetría quirral, invariantes topológicas y la correspondencia bulto-frontera.

### 2.4.1. Hamiltoniano para Modelos de Amarre Fuerte

En la mecánica cuántica para sistemas de muchos cuerpos no se tiene una solución analítica de las ecuaciones, por lo que se utilizan métodos computacionales dadas por la teoría de estructura electrónica, y con técnicas experimentales adicionales uno puede obtener una mayor precisión en las soluciones [28]. Sin embargo, se puede construir el modelo de amarre fuerte que es un enfoque utilizado para describir las estructuras de bandas electrónicas en los sólidos. Aproximando el comportamiento de los electrones en una red cristalina al considerar sus interacciones principalmente con sus átomos o iones vecinos. El Hamiltoniano en los modelos de amarre fuerte representa la energía total de los electrones en una red cristalina. Se construye a partir de las integrales de *hopping* (que representan el salto de electrones entre orbitales) y las energías locales o términos *on-site* (energía de un electrón localizado en un sitio atómico). Adicionalmente, uno puede considerar simetrías que pueden reducir el número de parámetros libres en el modelo, como la simetría de inversión temporal, la simetría de inversión y las simetrías rotacionales, a menudo esto conduce a restricciones en la forma del Hamiltoniano. Estas restricciones permiten identificar propiedades únicas en los materiales. De igual manera se tiene una representación más manejable del comportamiento del sistema. Por otro lado, en otras condiciones se pueden revelar aspectos topológicos de los materiales, como su topología de banda, la aparición de estados de borde protegidos [29].

### 2.4.2. Modelo de Su-Schrieffer-Heeger(SSH)

En el estudio de los aislantes topológicos, el modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) sirve como un sistema concreto para comprender los fundamentos de aislantes topológicos. Este modelo describe fermiones sin espín que se mueven en una red unidimensional con integrales de salto alternantes (ver figura 2.1). En el modelo SSH, cada celda unitaria contiene dos sitios, designados A y B; en el modelo se asume que no hay interacciones entre electrones, centrándonos únicamente en su dinámica a través de un Hamiltoniano de una sola partícula. El modelo SSH examina el comportamiento de los fermiones en torno al estado base a temperatura y potencial químico cero, adhiriéndose al principio de exclusión de Pauli, lo que da como resultado el semillanado, característico de los aislantes simples

## Cadena lineal de dos sitios

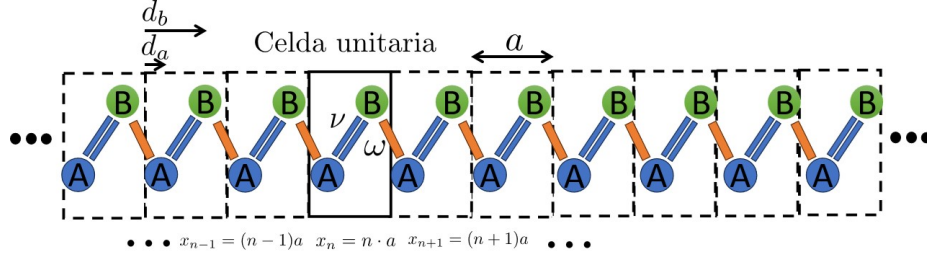


Figura 2.1: **Modelo SSH** una cadena lineal con amplitud de saltos alternantes (cadena de dos sitios).

como el poliacetileno. El comportamiento de la masa del modelo SSH es independiente de cómo se definan los bordes, a menudo utilizando condiciones de contorno periódicas para representar la masa como un anillo cerrado. El análisis de la masa implica la transformación de Fourier, lo que permite la representación de los hamiltonianos en el espacio de momento para los modelos de dos bandas, incluido el modelo SSH. Sin embargo, las propiedades físicas de la masa no se pueden discernir únicamente a partir de la relación de dispersión, sino que se requiere una comprensión más profunda de la estructura interna de los estados estacionarios representados por los vectores momento-espacio. Los bordes del modelo muestran un comportamiento distinto, especialmente en el límite termodinámico, lo que ayuda a diferenciar los estados de borde y de masa. El tratamiento de los bordes en los límites totalmente dimerizados frente a las definiciones prácticas es crucial para comprender el comportamiento del modelo cerca de las fronteras. El modelo SSH, que actúa como aislante topológico en una dimensión espacial, pone en relieve el papel de la simetría de inversión en la protección de sus propiedades topológicas. El Hamiltoniano del modelo, cuando se considera en la aproximación de Dirac, elucida la física anómala de frontera, caracterizada por estados de borde que persisten debido a simetrías específicas en el sistema. La presencia de estos estados límite protegidos surge de la interacción entre simetrías como la simetría de subred y la simetría de inversión. Estas simetrías preservan ciertas propiedades de los límites del sistema, dando lugar a fenómenos como estados límite de energía cero en la interfaz entre fases topológicas y triviales, anomalías de llenado y la protección de estados de borde.

### Estructura Electrónica del Bulto

El hamiltoniano en el espacio real asociado al modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) está dado como,

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N (|m, B\rangle \langle m, A| + \text{h.c.}) + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1, A\rangle \langle m, B| + \text{h.c.}),$$

donde  $A$  y  $B$  son los sitios y  $N$  es el número de celdas unitarias. La matriz hamiltoniana para una red de 4 celdas, está dado como

$$H = \begin{pmatrix} 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & w & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w & 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w & 0 & v \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 \end{pmatrix} \quad (2.109)$$

Existe una representación más práctica del hamiltoniano, el cual es definir la separación de los grados de libertad externos (la celda unitaria  $n$ ) de los grados de libertad internos (índice de subred  $\alpha$ ) [29]. Ahora podemos usar una base en producto tensorial,

$$|m, \alpha\rangle \rightarrow |m\rangle \otimes |\alpha\rangle \in \mathcal{H}_{\text{external}} \otimes \mathcal{H}_{\text{internal}},$$

con  $m = 1, 2, \dots, N$ ; y  $\alpha \in \{A, B\}$ . Como ya es sabido  $H$  es hermitiana y podemos hacer uso de la base de las matrices de Pauli (2.74),

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N |m\rangle\langle m| \otimes \sigma_x + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1\rangle\langle m| \otimes \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} + \text{h.c.}) \quad (2.110)$$

Como en cada sistema de estado sólido, la cadena larga del modelo SSH tiene un *bulto* y una *frontera*. El *bulto* se supone como una cadena larga con estados que son invariante ante traslaciones espaciales, por lo que se puede utilizar el teorema de Bloch y podemos definir la base de eigenestados como ondas planas,

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^N e^{ima \cdot k} |m\rangle \quad \text{para } k \in \{\delta_k, 2\delta_k, \dots, N\delta_k\} \quad \text{con } \delta_k = \frac{2\pi}{N} \quad (2.111)$$

a partir de esta base podemos definir el hamiltoniano de Bloch dada la transformada de Fourier, que está dado por,

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.112)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & v + w(\cos(k) - i\sin(k)) \\ v + w(\cos(k) + i\sin(k)) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.113)$$

$$= (v + w\cos(k))\sigma_x + w\sigma_y = \vec{d} \cdot \vec{\sigma}, \quad (2.114)$$

donde  $\vec{d} = (d_x, d_y, d_z) = (v + w\cos(k), w\sin(k), 0)$ , en esta notación sabemos que la energía está dado como,

$$H^2(k) = \vec{d} \cdot \vec{d} \mathbb{I} = E^2 \mathbb{I} \quad (2.115)$$

por lo que la energía del sistema está dado como

$$E_s = s\sqrt{\vec{d} \cdot \vec{d}} = |\vec{d}| \quad (2.116)$$

está energía presentará degeneraciones cuando  $E = 0$ , y esto solo se cumple para  $d_x = d_y = 0$ .

### Winding Number

Una observación es que las componentes del vector  $d$ , pueden ser representados en un plano  $XY$  como una circunferencia de radio  $r = |w|$  y centro en  $(v, w)$ . Entonces para ilustrar el winding number, es el número de vueltas que dara el vector  $\vec{d}$  alrededor del punto degeneración  $(0, 0)$ , entonces cuando  $|w| < |v|$  el círculo no encierra y no está definido para  $(0, 0)$  por lo que el winding number es cero (además uno puede imaginar que todos esos círculos pueden ser deformados al punto  $(v, w)$  sin tocar al punto de degeneración). El segundo caso es tener  $|w| > |v|$  en el interior del círculo está el punto de degeneración, por lo que no podemos deformar el círculo al punto  $(v, w)$  sin pasar por el punto de degeneración, entonces el winding number será 1 o -1 siendo la dirección de la vuelta que se da alrededor del punto de degeneración. El cálculo del winding number está definido como

$$n_W = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \ln(h(k)), \quad (2.117)$$

donde hemos definido:

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h^*(k) & 0 \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad h(k) = d_x(k) - i d_y(k).$$

Los resultados de la integral da los valores que se argumentaron anteriormente.

### Operador de Quiralidad Subred

El hamiltoniano del modelo SSH es *bipartita* (no hay transiciones entre sitios con el mismo índice de red). Podemos definir los proyectores de subred, lo cual se define como:

$$P_A = \sum_{m=1}^N |m, A\rangle \langle m, A|, \quad (2.118)$$

$$P_B = \sum_{m=1}^N |m, B\rangle \langle m, B|. \quad (2.119)$$

de estos operadores se define la simetría quiral, representado por  $\Sigma_S$ ,

$$\Sigma_S = P_A - P_B = \sigma_z \oplus \sigma_z \oplus \cdots \oplus \sigma_z = \bigoplus_{n=1}^N \sigma_z \quad (2.120)$$

$$\Sigma_S^\dagger \Sigma_S = 1, \quad \Sigma_S \text{ es una matriz hermitiana, unitaria y local.} \quad (2.121)$$

El operador  $\Sigma_S$ , multiplica todas las componentes de una función sobre la subred B por  $(-1)$  y para los estados de borde se debe de cumplir que su valor de expectación es 1 o  $-1$ .

### Topología y Estructura de Bandas

Ya hemos definido la relación de los parámetros con propiedades de energía cero y el winding number, ahora vemos como se manifiesta esto en la estructura de bandas. Primero,

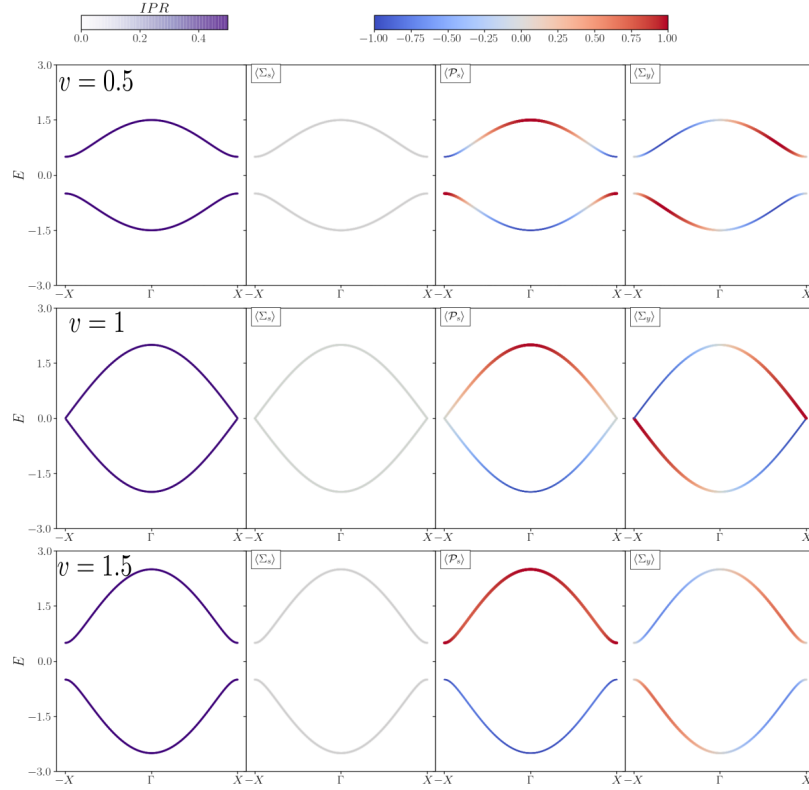


Figura 2.2: **Relación de dispersión** para el bulto del modelo SSH con tres valores del parámetro  $v$  y  $w = 1$ .

calculamos la estructura de bandas del bulto y los valores de expectación de los operadores  $\sigma_x$  [30].

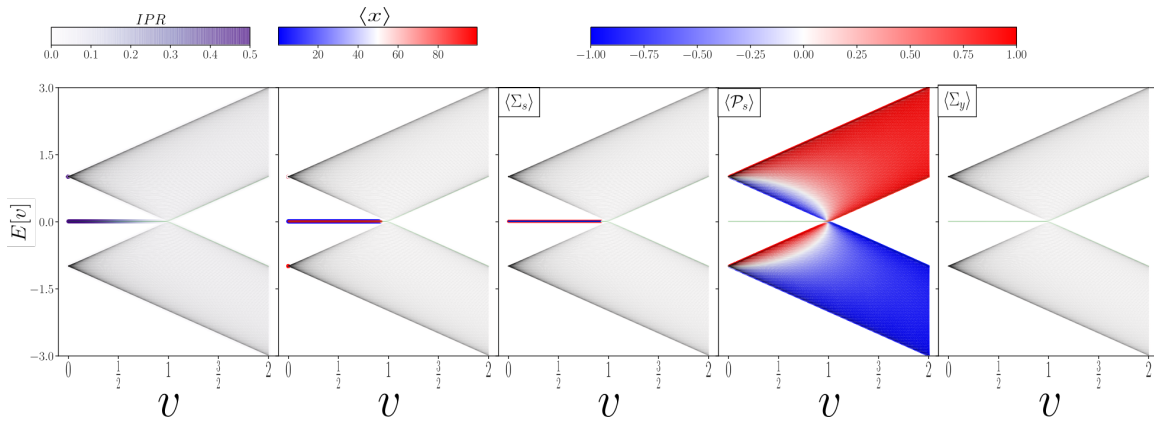
En la figura (2.2), observamos que hay una transición de aislante  $\rightarrow$  semimetal  $\rightarrow$  aislante pero para el caso  $v$  cuando el winding number es 1, el valor de  $\langle \sigma_x \rangle$  cambia durante el ciclo de  $k$ , que justo es lo que nos dice el winding number hay un efecto de curvatura o una fase geométrica en las funciones de onda. Ahora realizamos el estudio de la estructura de bandas para cadenas finitas, en nuestro caso consideramos una cadena con 100 celdas. Para las estructuras de subred es importante definir algunos operadores que ayudan a entender aspectos de los estados localizados, estados de borde, y polarización electrónica. El IPR [31] nos da una medida de la localización de los estados. En nuestro caso, realizamos el cálculo de la posición de expectación  $\langle \hat{x} \rangle$  para hablar de los estados de borde y bulto. De manera análoga al operador  $\Sigma_S$  definimos los otros dos operadores de subred asociados a las matrices de Pauli, estos operadores los listamos en la tabla (2.2).

Nuestro resultado concreto de la figura (2.3), es que para los estados de energía cero (bandas de color verde), son los estados que presentan mayor localización debido al valor del IPR. Estos estados corresponden a estados de borde debido a que  $\langle \hat{x} \rangle$  tiene valores cercano a cero y  $100 \cdot a$ . Adicionalmente, en los valores de expectación de  $\langle \Sigma_S \rangle$  se invierten los colores en relación a la barra de color de  $\langle \hat{x} \rangle$ , esto se espera ya que cuando se tiene el estado de borde en la primera celda el electrón debe estar mayormente localizado en el sitio A por lo que toma el valor 1, y cuando se está en el estado de borde en la posición



Operador de subred	Ecuación
IPR	$\sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{N_g} \sum_{g=1}^{N_g}  \Psi_{\lambda,n,g} ^2 \right)^2$
Posición esperada	$\langle \hat{x} \rangle = \langle \Psi_{\lambda,n}   \hat{x}   \Psi_{\lambda,n} \rangle$
Quiralidad de Subred	$\langle \Sigma_S \rangle = \langle \Psi_{\lambda,n}   \bigoplus_{n=1}^N \sigma_z   \Psi_{\lambda,n} \rangle$
Paridad de Subred	$\langle \mathcal{P}_S \rangle = \langle \Psi_{\lambda,n}   \bigoplus_{n=1}^N \sigma_x   \Psi_{\lambda,n} \rangle$
$\sigma_y$ de Subred	$\langle \Sigma_y \rangle = \langle \Psi_{\lambda,N}   \bigoplus_{n=1}^N \sigma_y   \Psi_{\lambda,N} \rangle$

Tabla 2.2: Valores de expectación de algunos operadores en una subred de N celdas unitarias


 Figura 2.3: Estructura de bandas para una cadena de 100 celdas del modelo SSH en función de  $v$ ,  $w = 1$ .

$\langle \hat{x} \rangle \approx 100 \cdot a$  el electrón está mayormente localizado en el sitio B, por lo que  $\langle \Sigma_S \rangle = 1$ . Por último, tenemos que para  $\langle \mathcal{P}_S \rangle$  nos da información de la curvatura o de la fase geométrica, debido a que tiene dos regiones con paridad  $\hat{\sigma}_x$  cuando el *winding number* es distinto de cero.

# 3 Modelos Continuos de Dos Niveles

En la segunda sección de nuestro capítulo anterior definimos la generalización de modelos de dos niveles que bajo simetría de paridad pueden contener semimetales de nodos topológicos. Este capítulo desarrollaremos modelos de dos bandas para semimetales topológicos con líneas nodales distribuida en nudos y enlaces toroidales  $T_{p,q}$  con hamiltonianos continuos  $H(\vec{k})$ , definido para el espacio de momentos cristalinos. Comenzamos con una definición de los nudos toroidales y calculamos el winding number asociado al mapeo de Hopf. Luego, construiremos un hamiltoniano continuo de dos bandas con la restricción de la simetría  $\mathcal{PT}$ , para realizar semimetales de nudos topológicos.

## 3.1. Nudos y Enlaces Toroidales

### 3.1.1. Mapeo de Hopf

El mapeo de Hopf sobre la 3-esfera  $\mathbb{S}^3$  consiste en generar una esfera a partir de lazos cerrados, para la Construcción de los nudos toroidales primero realizamos una restricción para generar una superficie toroidal  $\mathbb{S} \times \mathbb{S} \subset \mathbb{S}^3$ , esta superficie toroidal que alberga a los nudos  $T_k$  no se tiene que confundir con la superficie toroidal del homeomorfismo de la zona de Brillouin para un sistema con condiciones de periodicidad en dos direcciones. Al final, se impone una última restricción para generar lazos, estos lazos corresponderán a los nudos toroidales o enlaces toroidales. Los nudos y enlaces que consideramos están definidos:

#### Nudos y Enlaces

**Def:** Un Nudo no orientado es una encrustación o embebimiento suave y sin auto-intersecciones de  $\mathcal{S}^1$  en  $\mathcal{R}^3$ . Un enlace no orientado es un conjunto disjunto de curvas cerradas. El conjunto puede ser vacío o consistir de un elemento, por lo que un nudo es un caso particular de un enlace [9].

### Nudos y Enlaces Toroidales

**Def:** Un nudo o enlace Toroidal es un tipo especial de nudos definidos sobre una superficie toroidal en  $\mathbb{R}^3$ , estos están definidos a partir de dos números entero  $(p, q)$ , donde  $p$  es el número de vueltas alrededor del eje de simetría de la superficie toroidal y  $q$  es el número de vueltas alrededor de círculos en el interior del toro. El máximo común divisor  $\text{mcd}(p, q)$  definirá el tipo de curva, para  $\text{mcd}(p, q) > 1$  se definen enlaces toroidales y nudos toroidales para el otro caso. [32].

Ahora introducimos una construcción genérica para la aproximación de los modelos continuos de semimetales de nudos topológicos a través del mapeo de Hopf [11, 33]. Antes de presentar el modelo correspondiente al mapeo, definamos algunos de los conceptos a desarrollar. Primero, tomemos dos variables complejas  $z$  y  $w$ , con la constricción  $|z|^2 + |w|^2 = 1$ , lo cual describe una 3-esfera<sup>1</sup>  $\mathbb{S}^3$ , consideremos la siguiente superficie sobre la 3-esfera

$$|z|^p = |w|^q \quad (p, q) \in \mathbb{Z}^{2+} \quad \text{Enteros positivos}, \quad (3.1)$$

esta superficie es topológicamente un 2-toro. Este hecho resulta de expresar nuestros números complejos con la identidad de Euler  $z = |z|e^{i\theta_z}$  y  $w = |w|e^{i\theta_w}$ , de esta forma, al costreñir nuestras variables complejas en la 3-esfera  $|z|^2 + |w|^2 = 1$  los módulos asociados a los números complejos queda fijo, esto es que:

$$|z|^2 + |w|^2 = 1 \quad (3.2)$$

$$|z|^p = |w|^q \quad (3.3)$$

para resolver este sistema de ecuaciones, la ecuación (3.3) lo elevamos al exponente  $\frac{2}{p}$  y pasamos restando a lado izquierdo,

$$|z|^2 + |w|^2 = 1, \quad (3.4)$$

$$|z|^2 - |w|^{\frac{2q}{p}} = 0, \quad (3.5)$$

$$|w|^2 + |w|^{\frac{2q}{p}} = 1, \quad (3.6)$$

notemos que la ecuación (3.6) resulta de la suma de las dos ecuaciones anteriores. Así, los radios ahora están fijos y la superficie está parametrizada por las fases  $\theta_z$  y  $\theta_w$ , que están asociados a la dirección toroidal y poloidal, respectivamente.

Dada las constricciones anteriores, proponemos una función de dos variables complejas

$$f(z, w) \equiv z^p + w^q = 0, \quad (3.7)$$

está función representa una superficie con los valores de  $z$  y  $w$  dada las constricciones descritas anteriormente. Ahora sobre esta superficie añadimos una constricción extra, lo cual nos lleva a definir líneas, y estas curvas corresponderán a los nudos toroidales  $T_{p,q}$ .

<sup>1</sup>Esta proposición se observa si tomamos  $z = n_1 + in_2$  y  $w = n_3 + in_4$ ,

$$(n_1 + in_2)(n_1 - in_2)^2 + (n_3 + in_4)(n_3 - in_4)^2 = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 + n_4^2 = 1.$$

Adicionalmente, tenemos una ecuación asociada a la constricción de la superficie  $f(z, w)$ , expresado como:

$$z^p e^{ip\theta_z} + w^q e^{iq\theta_w} = 0 \quad \text{Expresando con la identidad de Euler} \quad (3.8)$$

$$|z|^p (e^{ip\theta_z} + e^{iq\theta_w}) = 0 \quad \text{donde} \quad |z|^p = |w|^q \quad (3.9)$$

$$e^{ip\theta_z} = -e^{iq\theta_w} \quad \text{Multiplicamos por} \quad e^{-iq\theta_w} \quad (3.10)$$

$$e^{ip\theta_z - iq\theta_w} = -1 = e^{i\pi} \quad (3.11)$$

$$p\theta_z - q\theta_w = \pi \pmod{2\pi} \quad (3.12)$$

### 3.1.2. Índice (winding number) del Mapeo $\mathbb{S}^3$ en $\mathbb{S}^2$

En la construcción de los nudos, se hereda una invariante asociado al mapeo Hopf de la esfera  $\mathbb{S}^3$  en  $\mathbb{S}^2$  para generar los nudos, esto está dado por el cálculo del índice (winding number) que es un caso general al mencionado en la subsección del modelo SSH [34]

$$n_W = \frac{1}{2\pi^2} \int dV \rho_W, \quad \text{definiendo} \quad \rho_W \equiv \epsilon^{abcd} n_a \partial_{k_x} n_b \partial_{k_y} n_c \partial_{k_z} n_d \quad (3.13)$$

La ecuación (2.117) es distinta la ecuación (3.13), y esto se debe que en general el winding number hace una exploración de los espacios topológicos con n-esferas  $\mathbb{S}^n$ , en el modelo SSH se caracterizaban los puntos degenerados con círculos  $\mathbb{S} \rightarrow \mathbb{S}^0$ , ahora para el mapeo de Hopf tenemos  $\mathbb{S}^3 \rightarrow \mathbb{S}^2$ . La elección de coordenadas para los valores  $k$  asociadas a  $\mathbb{S}^3$

$$N_1 = k_x, \quad N_2 = k_y, \quad N_3 = k_z, \quad N_4 = M - \frac{k^2}{2} \quad y \quad k^2 = \sum_{i \in \{x,y,z\}} k_i^2 \quad (3.14)$$

$M$  es definido como el parámetro de mapeo en  $\mathbb{R}^3$ . Sea  $N$  la norma asociado a estas 4 entradas de un vector con coordenadas  $(N_1, N_2, N_3, N_4)$

$$N^2 = N_1^2 + N_2^2 + N_3^2 + N_4^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 + \left(M - \frac{k^2}{2}\right)^2 = k^2 + M^2 - Mk^2 + \frac{k^4}{4} \quad (3.15)$$

Definimos los vectores normales para la construcción de  $\mathbb{S}^3$ :

$$n_1 = \frac{k_x}{N}, \quad n_2 = \frac{k_y}{N}, \quad n_3 = \frac{k_z}{N}, \quad n_4 = \frac{M - \frac{k^2}{2}}{N}. \quad (3.16)$$

En nuestro cálculo del winding number realizamos un cambio de coordenadas para  $k_x, k_y$  y  $k_z$  a coordenadas esféricas está dado como:

$$n_1 = \frac{k \cos \phi \sin \theta}{N}, \quad n_2 = \frac{k \sin \phi \sin \theta}{N}, \quad n_3 = \frac{k \cos \theta}{N}, \quad n_4 = \frac{M - \frac{k^2}{2}}{N}. \quad (3.17)$$

Debido a estos cambios de coordenadas debemos de especificar el diferencial de volumen y el gradiente,

$$dV = k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi \quad (3.18)$$

$$\nabla = \left( \partial_k, \frac{1}{k} \partial_\theta, \frac{1}{k \sin \theta} \partial_\phi \right) \quad (3.19)$$

De esta manera, los gradientes asociados a las componentes de  $\mathbf{n}$ , son:

$$\nabla n_1 = \left( \frac{(M^2 - \frac{k^4}{4}) \cos \phi \sin \theta}{N^3}, \frac{\cos \phi \cos \theta}{N}, \frac{\sin \phi}{N} \right) \quad (3.20)$$

$$\nabla n_2 = \left( \frac{(M^2 - \frac{k^4}{4}) \cos \phi \sin \theta}{N^3}, \frac{\sin \phi \cos \theta}{N}, \frac{-\cos \phi}{N} \right) \quad (3.21)$$

$$\nabla n_3 = \left( \frac{(M^2 - \frac{k^4}{4}) \cos \theta}{N^3}, \frac{-\sin \theta}{N}, 0 \right) \quad (3.22)$$

$$\nabla n_4 = \left( \frac{-k(M + \frac{k^2}{2})}{N^3}, 0, 0 \right) \quad (3.23)$$

Entonces, para calcular el índice realizamos la sustitución para  $\rho_W$ :

$$\rho_W = \det \left( \begin{array}{c|c|c|c} n_1 & n_2 & n_3 & n_4 \\ \hline \nabla n_1 & \nabla n_2 & \nabla n_3 & \nabla n_4 \end{array} \right) \quad (3.24)$$

$$= \det \left( \begin{array}{cccc} n_1 & n_2 & n_3 & n_4 \\ \partial_k n_1 & \partial_k n_2 & \partial_k n_3 & \partial_k n_4 \\ \frac{1}{k} \partial_\theta n_1 & \frac{1}{k} \partial_\theta n_2 & \frac{1}{k} \partial_\theta n_3 & \frac{1}{k} \partial_\theta n_4 \\ \frac{1}{k \sin \theta} \partial_\phi n_1 & \frac{1}{k \sin \theta} \partial_\phi n_2 & \frac{1}{k \sin \theta} \partial_\phi n_3 & \frac{1}{k \sin \theta} \partial_\phi n_4 \end{array} \right) \quad (3.25)$$

$$= \det \left( \begin{array}{cccc} \frac{k \cos \phi \sin \theta}{N} & \frac{k \sin \phi \sin \theta}{N} & \frac{k \cos \theta}{N} & \frac{M - \frac{k^2}{2}}{N} \\ \frac{(M^2 - \frac{k^4}{4}) \cos \phi \sin \theta}{N^3} & \frac{(M^2 - \frac{k^4}{4}) \sin \phi \sin \theta}{N^3} & \frac{(M^2 - \frac{k^4}{4}) \cos \theta}{N^3} & \frac{-k(M + \frac{k^2}{2})}{N^3} \\ \frac{\cos \phi \cos \theta}{N} & \frac{\sin \phi \cos \theta}{N} & \frac{-\sin \theta}{N} & 0 \\ \frac{\sin \phi}{N} & \frac{-\cos \phi}{N} & 0 & 0 \end{array} \right) \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N^6} \left[ k \cos \phi \sin \theta \left( 0 + 0 - k \left( M + \frac{k^2}{2} \right) (0 - \cos \phi \sin \theta) \right) \right. \\
&\quad - k \sin \phi \sin \theta \left( 0 + 0 - k \left( M + \frac{k^2}{2} \right) (0 + \sin \phi \sin \theta) \right) \\
&\quad + k \cos \theta \left( 0 + 0 - k \left( M + \frac{k^2}{2} \right) (-\cos^2 \phi \cos \theta - \sin^2 \phi \cos \theta) \right) - \\
&\quad \left( M - \frac{k^2}{2} \right) \left( M^2 - \frac{k^4}{4} \right) \left( \cos \phi \sin \theta (0 - \cos \phi \sin \theta) - \sin \phi \sin \theta (0 + \sin \phi \sin \theta) \right. \\
&\quad \left. + \cos \theta (-\cos^2 \phi \cos \theta - \sin^2 \phi \cos \theta) \right) \left. \right] \tag{3.27}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N^6} \left[ \left( M + \frac{k^2}{2} \right) k^2 \cos^2 \phi \sin^2 \theta + \left( M + \frac{k^2}{2} \right) k^2 \sin^2 \phi \sin^2 \theta + \right. \\
&\quad \left( M + \frac{k^2}{2} \right) k^2 (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) \cos^2 \theta - \left( M - \frac{k^2}{2} \right)^2 \left( M + \frac{k^2}{2} \right) \times \\
&\quad \left. (-\cos^2 \phi \sin^2 \theta - \sin^2 \phi \sin^2 \theta - \cos^2 \phi \cos^2 \theta - \sin^2 \phi \cos^2 \theta) \right] \tag{3.28}
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{N^6} \left[ \left( M + \frac{k^2}{2} \right) k^2 \sin^2 \theta + \left( M + \frac{k^2}{2} \right) k^2 \cos^2 \theta + \left( M - \frac{k^2}{2} \right)^2 \left( M + \frac{k^2}{2} \right) \right] \tag{3.29}$$

$$= \frac{1}{N^6} \left( M + \frac{k^2}{2} \right) \left( k^2 + \left( M - \frac{k^2}{2} \right)^2 \right) \tag{3.30}$$

$$= \frac{1}{N^4} \left( M + \frac{k^2}{2} \right). \tag{3.31}$$

Ahora ya podemos calcular el índice asociado al mapeo, el cual es:

$$n_W = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left( \frac{M + \frac{k^2}{2}}{(k^2 + (M - \frac{k^2}{2})^2)^2} \right) k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi \tag{3.32}$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{(M + \frac{k^2}{2}) k^2}{(k^2 + (M - \frac{k^2}{2})^2)^2} dk \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\phi \tag{3.33}$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} I_1 \cdot I_2 = \frac{1}{2\pi^2} 4\pi \cdot I_1 = \frac{2}{\pi} \cdot I_1. \tag{3.34}$$

Entonces resolvemos ambas integrales por separado, donde  $I_2$  es el área de una esfera de radio 1 o el valor de ángulo sólido de la esfera que es  $4\pi$ , la primera integral se resuelve de manera numérica con *Wolfram Mathematica*.

## Cálculo Numérico de la integral del Winding Number

## Wolfram Mathematica

```

In[1]:= I[m_] := Chop[Integrate[ $\frac{(m + \frac{1}{2} * k^2) * k^2}{(k^2 + (m - \frac{1}{2} * k^2) * k^2)^2}$ , {k, 0, Infinity}]];
In[2]:= I[1]
Out[2]= 1.5708
In[3]:= I[0]
Out[3]= 0.7854
In[4]:= I[-1]
Out[4]= 0

```

En general se obtiene ,

$$\int_0^{\infty} \frac{(M + \frac{k^2}{2})k^2}{(k^2 + (M - \frac{k^2}{2})^2)} dk \approx \frac{\pi}{2} \quad \text{si } m > 0, \quad (3.35)$$

$$\int_0^{\infty} \frac{k^4}{2(k^2 + \frac{k^4}{4})^2} dk = \frac{\pi}{4}, \quad (3.36)$$

$$\int_0^{\infty} \frac{(M + \frac{k^2}{2})k^2}{(k^2 + (M - \frac{k^2}{2})^2)} dk = 0 \quad \text{si } m < 0. \quad (3.37)$$

Entonces, el índice asociado al mapeo es:

$$n_W = \begin{cases} 1 & \text{Si } M > 0 \\ \frac{1}{2} & \text{Si } M = 0 \\ 0 & \text{En otros casos} \end{cases} \quad (3.38)$$

Sin embargo, el winding number sólo toma valores enteros, por lo que el valor  $n_W = \frac{1}{2}$  no está permitido y esto lo notamos ya que observamos que existe degeneración en el punto  $(k_x, k_y, k_z) = (0, 0, 0)$ .

### 3.1.3. Ecuación del Toro para los Nudos Toroidales

Para ilustrar los nudos y enlaces toroidales tomaremos el caso de  $M = 0.5$  en nuestra ecuación (3.14). La ecuación del toro en coordenadas cartesianas es [35],

$$(x^2 + y^2 + z^2 + R^2 - r^2)^2 - 4R^2(x^2 + y^2) = 0 \quad (3.39)$$

Al tomarnos  $M = 0.5$ , nuestras coordenadas están dadas por:

$$N_1 = k_x, \quad N_2 = k_y, \quad N_3 = k_z, \quad N_4 = \frac{1}{2}(1 - k^2). \quad (3.40)$$

La norma asociada a este cuatro vector es,

$$N = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 + \frac{1}{4}(1 - k^2)^2} = \frac{1}{2}\sqrt{4k^2 + 1 - 2k^2 + k^4} = \frac{1}{2}(1 + k^2),$$

ahora el mapeo de nuestro  $\mathbb{S}^3$  están dados como:

$$n_1 = \frac{2k_x}{1 + k^2}, \quad n_2 = \frac{2k_y}{1 + k^2}, \quad n_3 = \frac{2k_z}{1 + k^2}, \quad n_4 = \frac{1 - k^2}{1 + k^2}.$$

Para obtener los nudos toroidales se tiene que cumplir que:

$$n_1^2 + n_2^2 = r_1^2 \quad \rightarrow \quad 4(k_x^2 + k_y^2) = r_1^2(1 + k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^2. \quad (3.41)$$

$$n_3^2 + n_4^2 = r_2^2 \quad \rightarrow \quad 4k_z^2 + (1 - k^2)^2 = r_2^2(1 + k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^2. \quad (3.42)$$

De la ecuación (3.41) obtenemos que,

$$(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 + 1)^2 - \frac{4}{r_1^2}(k_x^2 + k_y^2) = 0, \quad (3.43)$$

comparando la ecuación (3.43) con la ecuación (3.39), podemos identificar la ecuación del toro, donde:

$$R = \frac{1}{r_1}, \quad R^2 - r^2 = 1 \rightarrow r^2 = R^2 - 1 = \frac{1 - r_1^2}{r_1^2} = \frac{r_2^2}{r_1^2}.$$

dado que  $r_1^2 + r_2^2 = 1$ , tenemos que  $r_2 < 1$  si  $r_1 \neq 0$ , esto nos dice que  $R > r$



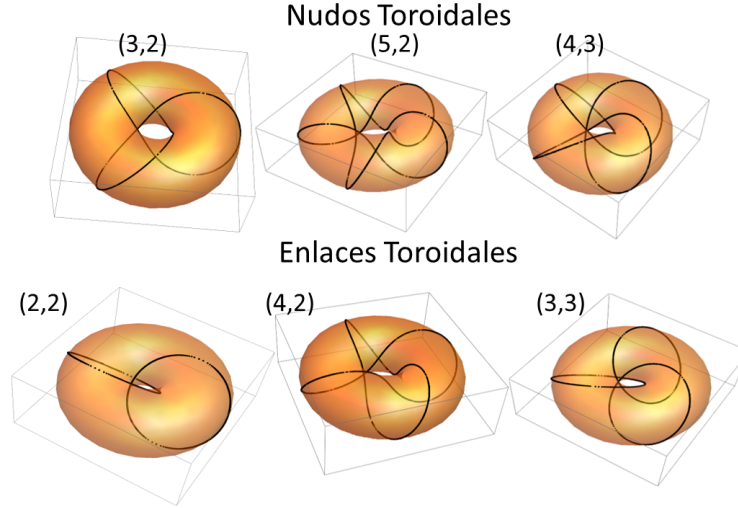


Figura 3.1: Nudos y enlaces toroidales  $T_{p,q}$  para una superficie toroidal dado por el parámetro  $M = 0.5$ .

### 3.2. Modelo de dos Bandas para Semimetales Topológicos de Nudo

En la segunda sección del capítulo dos discutimos que es posible obtener un modelo de dos bandas con líneas nodales a partir de la ecuación (2.74), recordemos que la ecuación está definida como

$$H(\vec{k}) = d_0(\vec{k})\mathbb{I} + \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \quad \vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

La simetría  $\mathcal{PT}$  en el hamiltoniano, impone que  $H^*(\vec{k}) = H(\vec{k})$ , así en el modelo de dos bandas se tiene que  $d_y(\vec{k}) = 0$ , en adición, queremos que en el modelo las energías sean simétricas respecto a la energía cero lo que lleva  $d_0(\mathbf{k})=0$ . Nuestro modelo de dos bandas empleado es:

$$H(\vec{k}) = d_x(\vec{k})\sigma_x + d_z(\vec{k})\sigma_z, \quad (3.44)$$

la relación de dispersión de este hamiltoniano es análoga al modelo SSH,

$$E_s(\vec{k}) = s\sqrt{d_x^2(\vec{k}) + d_z^2(\vec{k})}, \quad s = \pm,$$

donde las energías dadas por  $s = +$  se denomina banda de conducción y  $s = -$  es la banda de valencia, la generación de nodos sucede cuando la energía es  $E = 0$ , donde las bandas  $s$  se tocan, lo que sucederá dadas las siguientes condiciones:

$$d_x(\vec{k}) = d_z(\vec{k}) = 0.$$

### Modelo Continuo de Semimetal de Nudo Toroidal Topológico

**Def.** Sean,  $H(\vec{k})$  un hamiltoniano de dos niveles con simetría  $\mathcal{PT}$  definido en un espacio de momentos  $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$  (hamiltoniano continuo); y  $f : \mathbb{T}^2 \subset \mathbb{C}^2 \rightarrow D \subset \mathbb{C}$  con  $a(\vec{k})$  la parte real de  $D$  (dominio de  $f$ ) y  $b(\vec{k})$  la parte imaginaria de  $D$ . Entonces,

$$H(\vec{k}) = a(\vec{k})\sigma_x + b(\vec{k})\sigma_z,$$

es un semimetal de nudo toroidal topológico  $T_{p,q}$  para:

$$f = \left( \frac{k_x + ik_y}{\sqrt{k^2 + (M - \frac{1}{2}k^2)^2}} \right)^p + \left( \frac{k_z + i(M - \frac{1}{2}k^2)}{\sqrt{k^2 + (M - \frac{1}{2}k^2)^2}} \right)^q, \quad (3.45)$$

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm \sqrt{a^2(\vec{k}) + b^2(\vec{k})} = \pm |f|^2, \quad \text{relación de dispersión.} \quad (3.46)$$

Los nodos están definidos por el conjunto de soluciones de  $T_{p,q} \subset D$ , definido por  $f = 0$ .

Entonces, para la ecuación (3.46), si  $\text{mcd}(p, q) > 1$  tendremos enlaces toroidales, el winding number está dado como:

$$n_W = \begin{cases} 1 & \text{Si } M > 0 \\ 0 & \text{Si } M < 0 \end{cases} \quad (3.47)$$

# 4 Semimetales Topológicos de Nudos en Redes Cúbicas

En este capítulo desarrollaremos modelos de redes cúbicas con la menor interacción a vecinos cercanos, estos modelos corresponden a semimetales topológicos de nudos y enlaces toroidales dado por el modelo continuo definido anteriormente. Consideramos una red cúbica en 3 dimensiones de momento debido a su simplicidad en los vectores de red, en los que se romperán las condiciones de periodicidad. Comenzamos realizando exploraciones de las bandas de energía para el bulto en los puntos de alta simetría de la red cúbica, luego realizaremos el estudio de las bandas y los niveles de energía cero al romper las condiciones de periodicidad en una dirección. Luego, propondremos bloques finitos constituidos por estos modelos de red y realizamos los cálculos de las bandas, la densidad de estados, la conductancia y los operadores de subred de la tabla (2.2).

## 4.1. Construcción de los Hamiltonianos Periódicos en una Red Cúbica

### 4.1.1. Red Cúbica

Dada una red cúbica en el espacio real, obtenemos una red cúbica en el espacio recíproco. Los vectores bases en el espacio real son:

$$\vec{v}_1 = (a, 0, 0), \quad (4.1)$$

$$\vec{v}_2 = (0, a, 0), \quad (4.2)$$

$$\vec{v}_3 = (0, 0, a). \quad (4.3)$$

Entonces, los vectores bases de la red recíproca son:

$$\vec{b}_1 = \left( \frac{2\pi}{a}, 0, 0 \right), \quad (4.4)$$

$$\vec{b}_2 = \left( 0, \frac{2\pi}{a}, 0 \right), \quad (4.5)$$

$$\vec{b}_3 = \left( 0, 0, \frac{2\pi}{a} \right). \quad (4.6)$$

a continuación se presenta la primera zona de Brillouin de la red cúbica (ver figura 4.1), donde los puntos que se destacan corresponden a la siguiente definición:

$$X \cdot \vec{b}_1 = 0.5, \quad Y \cdot \vec{b}_2 = 0.5, \quad Z \cdot \vec{b}_3 = 0.5, \quad (4.7)$$

por lo que estos puntos corresponden a los vectores:

$$X = \left(\frac{\pi}{a}, 0, 0\right) \quad Y = \left(0, \frac{\pi}{a}, 0\right) \quad Z = \left(0, 0, \frac{\pi}{a}\right) \quad (4.8)$$

En adelante utilizaremos estos puntos para los caminos en el cálculo de la relación de dispersión y los vectores serán los que definirán nuestra aproximación  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  alrededor del punto  $\Gamma$ .

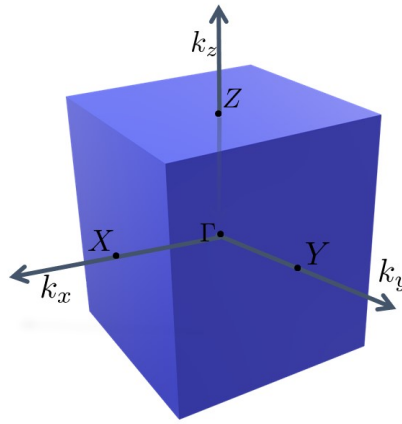


Figura 4.1: Primera zona de Brillouin de una red cúbica y los puntos de alta simetría.

### 4.1.2. Semimetales de Nodos Topológicos en Redes Cúbicas

Recordemos que nuestro modelo está dado por la ecuación (3.44), de manera explícita es

$$H(\vec{k}) = \begin{pmatrix} d_z(M, \vec{k}) & d_x(M, \vec{k}) \\ d_x(M, \vec{k}) & -d_z(M, \vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

donde  $d_x(M, \vec{k})$  y  $d_z(M, \vec{k})$  están dados por la ecuación (3.46), y hemos agregado su dependencia del parámetro  $M$ . Realizar la expansión  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  alrededor de la energía cero, basta con tener

$$f' = \left(k_x + ik_y\right)^p + \left(k_z + i\left(m - \frac{1}{2}k^2\right)\right)^q, \quad (4.10)$$

de este modo la expresión corresponde a polinomios de tres variables y el parámetro  $M$ . Ahora estas funciones obtenidas del mapeo  $f'$  podemos interpretarlo como un límite continuo de una red cristalina. Por lo tanto, para identificar una estructura cristalina de red

cúbica en cada uno de los modelos, podemos representar los polinomios como el límite de una expansión de series de Taylor para las funciones senos y cosenos, que expresan la periodicidad del cristal. Para ello es importante, recordar cuales son las expansiones de Taylor para la función seno y coseno despreciando  $\mathcal{O}(x^3)$  con enfoque en la red cúbica [36]:

$$\frac{1}{a} \sin k_i \cdot a \approx k_i, \quad (4.11)$$

$$\frac{2}{a^2} (1 - \cos k_i \cdot a) \approx \frac{4}{a^2} \sin^2 \frac{k_i \cdot a}{2} \approx k_i^2. \quad (4.12)$$

Donde  $a$  es el parámetro de la red cúbica, que en adelante se asignará  $a = 1$ .

### Mapeo de Wilson

Un punto de partida para la construcción de modelos de redes cúbicas es la *construcción de hamiltonianos de Bloch a partir del mapeo de Wilson*, esto consiste en tomar para cada dirección  $k_j$  y un término de masa  $m$  (En nuestro caso es el parámetro del mapeo) [37],

$$-i\partial_j \mapsto \sin k_j =: k_j, \quad (4.13)$$

$$m \mapsto m + B \sum_{j=1}^3 [1 - \cos(k_j)] =: \mu(\vec{k}), \quad (4.14)$$

$\mu(\vec{k})$  son parámetros de red que definen las brechas de banda. Dados estos términos del mapeo, proponemos un modelo de red asociado a los polinomios de la ecuación (4.10).

#### Modelo de Red Cúbica Directa de Semimetal Topológico de Nudo Toroidal

**Def.** Sean,  $H_B(\vec{k})$  un hamiltoniano de Bloch de dos niveles con simetría  $\mathcal{PT}$  definido en un espacio de momentos  $\vec{k} \in \mathbb{T}^3$  (hamiltoniano periódico) y  $f : \mathbb{T}^3 \rightarrow D \subset \mathbb{C}$  con  $a(\vec{k})$  la parte real de  $D$  dominio de  $f$  y  $b(\vec{k})$  la parte imaginaria de  $D$ . Entonces,

$$H(\vec{k}) = a(\vec{k})\sigma_x + b(\vec{k})\sigma_z,$$

es una red de semimetal de nudo toroidal topológico  $T_{p,q}$  para:

$$f = (\sin k_x + i \sin k_y)^p + \left( \sin k_z + i \left( \sum_{j \in \{x,y,z\}} \cos k_j - m \right) \right)^q, \quad (4.15)$$

los nodos estarán dados por el conjunto de soluciones de  $f = 0$ .

El término  $m$  es un término de mapeo y no un término de masa, en nuestros sistemas de dos niveles el término de masa está dado por  $m_z \sigma_z$  como se planteo en la ecuación (2.53).

### Modelos de Red de Mínima Interacción (*Minimal Lattice Model*)

Los modelos red de mínima interacción resultan de la siguiente aproximación a los términos  $k_i^2$ , esto es [11]:

$$\sin^2 k_i \approx k_i^2. \quad (4.16)$$

Por otro lado, cuando se presenten productos de senos y cosenos, necesitaremos las identidades trigonométricas para expresar el producto en sumas y restas de ángulos:

$$\sin(k_i + k_j) = \sin k_i \cos k_j + \sin k_j \cos k_i, \quad (4.17)$$

$$\sin(k_i - k_j) = \sin k_i \cos k_j - \sin k_j \cos k_i, \quad (4.18)$$

$$\cos(k_i + k_j) = \cos k_i \cos k_j - \sin k_i \sin k_j, \quad (4.19)$$

$$\cos(k_i - k_j) = \cos k_i \cos k_j + \sin k_i \sin k_j. \quad (4.20)$$

### Modelo de Red Mínima de Semimetales de Nodos Topológicos

**Def.** Un modelo de red de mínima interacción es el modelo que considera a los vecinos cercanos más cercanos, si dado el polinomio,

$$f' = \left(k_x + ik_y\right)^p + \left(k_z + i\left(m - \frac{1}{2}k^2\right)\right)^q$$

se realizan las siguientes aproximaciones en los polinomios resultantes:

$$k_i \approx \sin k_i, \quad (4.21)$$

$$k_i^2 \approx \sin^2 k_i, \quad (4.22)$$

$$M - \frac{1}{2}k_i^2 \approx \sum_{j=1}^3 \cos(k_j) - m. \quad (4.23)$$

Definimos  $m = 3 - M$ .

### 4.1.3. Redes Mínimas de Semimetales Topológicos de Nodos Toroidales

Debido a su implementación en métodos numéricos se construyen los modelos de redes cúbicas con semimetales topológicos de nudos toroidales con la aproximación de vecinos cercanos más cercanos.

#### Modelo Nudo Trivial (*Nodal line Topological Semimetal*)

A continuación presentamos como obtener un modelo de aro nodal topológico (*nodal line Topological semimetal*), pero dado que es el caso de nudo trivial no se realizó la caracterización de sus propiedades electrónicas. Empezamos por el primer polinomio que se presenta en el nudo trivial o línea nodal de aro, el que corresponde con los pares (0,1) de la función  $f'$ , estas funciones corresponden a:

$$d_x(M, \vec{k}) = M - \frac{1}{2}k^2 \quad d_z(\vec{k}) = k_z. \quad (4.24)$$

Entonces el modelo de red, para estos polinomios se calcula a partir de las aproximaciones de senos y cosenos:

$$d_x = M - 3 + 3 - \frac{1}{2} \sum_j k_j^2, \quad j \in \{x, y, z\}, \quad (4.25)$$

$$= -m + \sum_j \left(1 - \frac{1}{2} k_j^2\right), \quad m = 3 - M, \quad (4.26)$$

$$\approx \sum_j \cos k_j - m. \quad (4.27)$$

la componente real  $d_z$ , es

$$d_z = k_z, \quad (4.28)$$

$$d_z \approx \sin k_z. \quad (4.29)$$

Al final las funciones para el modelo de red son:

$$d_x = \sin k_z, \quad d_z = \sum_j \cos k_j - m. \quad (4.30)$$

### Modelo Nudo Trivial inclinado

En el cuerpo de trabajo solo se especifica cuales son los modelos asociados a primos relativos. Sin embargo, se puede tomar los enteros  $p = 1$  y  $q$  cualquier entero positivo, los cuales corresponden a un nudo trivial inclinado, dado que  $z$  corresponde a la ecuación de un plano, el caso del nudo trivial inclinado corresponde a  $p = 1$  y  $q = 1$ :

$$d_x = k_x + k_z, \quad d_z = k_y + M - \frac{1}{2} k^2. \quad (4.31)$$

Las funciones periódicas asociados

$$d_x = \sin k_x + \sin k_z, \quad (4.32)$$

$$d_z = \sin k_y + \sum_j \cos k_j - m. \quad (4.33)$$

Ahora sustituyamos los senos y cosenos en termino de las exponenciales para el modelo de red:

$$d_x = \frac{-i}{2} (e^{ik_x} - e^{-ik_x}) + \frac{-i}{2} (e^{ik_z} - e^{-ik_z}) \quad (4.34)$$

$$d_z = \frac{-i}{2} (e^{ik_y} - e^{-ik_y}) + \left( \sum_j \frac{1}{2} (e^{ik_j} + e^{-ik_j}) - m \right) \quad (4.35)$$

$$= \frac{1-i}{2} e^{ik_y} + \frac{1+i}{2} e^{-ik_y} + \frac{1}{2} (e^{ik_x} + e^{-ik_x}) + \frac{1}{2} (e^{ik_z} + e^{-ik_z}) - m \quad (4.36)$$

**Modelo Enlace Toroidal (2,2) (Link-Nodal Semimetal)**

El modelo para una línea nodal de Nodos entrelazados o eslabón de Hopf (Hopf Link) corresponden a los primos relativos  $p = 2$  y  $q = 2$ , los polinomios asociado al modelo continuo son:

$$d_x = k_x^2 - k_y^2 + k_z^2 - \left(M - \frac{1}{2}k^2\right)^2, \quad (4.37)$$

$$d_z = 2k_x k_y + 2k_z \left(M - \frac{1}{2}k^2\right) \quad (4.38)$$

De manera análoga expresamos los polinomios como una aproximación a senos y cosenos, los cuales proponemos:

$$d_x = \sin^2 k_x - \sin^2 k_y + \sin^2 k_z - \left(\sum_j \cos k_j - m\right)^2 \quad (4.39)$$

$$d_z = 2 \sin k_x \sin k_y + 2 \sin k_z \left(\sum_j \cos k_j - m\right). \quad (4.40)$$

En la función  $d_x$ , para el último término se desarrolla el binomio como:

$$\left(\sum_j \cos k_j - m\right)^2 = \left(\sum_j \cos k_j\right)^2 - 2m \sum_j \cos k_j + m^2, \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} &= \left(\sum_j \cos^2 k_j + 2 \cos k_x (\cos k_y + \cos k_z) + 2 \cos k_y \cos k_z\right) \\ &\quad - 2m \sum_j \cos k_j + m^2. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Introduciendo este desarrollo en  $d_x$ :

$$\begin{aligned} d_x &= (\sin^2 k_x + \sin^2 k_z - \sin^2 k_y - \sum_j \cos^2 k_j) - \\ &\quad 2(\cos k_x \cos k_y + \cos k_x \cos k_z + \cos k_y \cos k_z) + 2m \sum_j \cos k_j - m^2 \end{aligned} \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} &= (-1 - \cos 2k_x - \cos 2k_y) - \cos(k_x + k_y) - \cos(k_x - k_y) - \cos(k_x + k_z) - \\ &\quad \cos(k_x - k_z) - \cos(k_y + k_z) - \cos(k_y - k_z) + 2m \sum_j \cos k_j - m^2 \end{aligned} \quad (4.44)$$

para la función  $d_z$ , tenemos que:

$$d_z = \cos(k_x - k_y) - \cos(k_x + k_y) + \sum_j (\sin(k_z + k_j) + \sin(k_z - k_j)) - 2m \sin k_z \quad (4.45)$$



**Modelo del Nudo Toroidal(3,2) o Nudo Trébol(knot Nodal Semimetal)**

El modelo para el nudo de trébol está asociado con los enteros  $p = 3$  y  $q = 2$ , el polinomio asociado al modelo continuo es:

$$d_x(M, \vec{k}) = k_x^3 - 3k_x k_y^2 + k_z^2 - (M - \frac{1}{2}k^2)^2 \quad (4.46)$$

$$d_z(M, \vec{k}) = -k_y^3 + 3k_y k_x^2 + 2k_z(M - \frac{1}{2}k^2) \quad (4.47)$$

Entonces para proponer el modelo de red, tomamos:

$$d_x(M, \vec{k}) = 2 \sin k_x (1 - \cos k_x) - 6 \sin k_x (1 - \cos k_y) + \sin^2 k_z - \left( \sum_j \cos k_j - m \right)^2 \quad (4.48)$$

$$d_z(M, \vec{k}) = -2 \sin k_y (1 - \cos k_y) + 6 \sin k_y (1 - \cos k_x) + 2 \sin k_z \left( \sum_j \cos k_j - m \right) \quad (4.49)$$

Ahora expresamos el modelo de red en términos de senos y cosenos en suma de ángulos:

$$\begin{aligned} d_x = & -4 \sin k_x - \sin 2k_x + 3(\sin(k_x + k_y) + \sin(k_x - k_y)) + \left( \sin^2 k_z - \sum_j \cos^2 k_j \right) \\ & - (\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y) + \cos(k_x + k_z) + \cos(k_x - k_z) + \cos(k_z + k_y) \\ & + \cos(k_z - k_y)) + 2m \sum_j \cos k_j - m^2 \end{aligned} \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} = & -4 \sin k_x - \sin 2k_x + 3(\sin(k_x + k_y) + \sin(k_x - k_y)) + \\ & \left( -1 - \frac{\cos 2k_x + \cos 2k_y}{2} - \cos 2k_z \right) \\ & - (\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y) + \cos(k_x + k_z) + \cos(k_x - k_z) + \\ & \cos(k_z + k_y) + \cos(k_z - k_y)) + 2m \sum_j \cos k_j - m^2 \end{aligned} \quad (4.51)$$

$$\begin{aligned} d_z = & 4 \sin k_y + \sin 2k_y - 3(\sin(k_x + k_y) + \sin(k_y - k_x)) + \sum_j (\sin(k_z + k_j) \\ & + \sin(k_z - k_j)) - 2m \sin k_z \end{aligned} \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} = & m i (e^{ik_z} - e^{-ik_z}) - 4i (e^{ik_y} - e^{-ik_y}) - \\ & \frac{i}{2} \sum_j (e^{i(k_z+k_j)} - e^{-i(k_z+k_j)} + e^{i(k_z-k_j)} - e^{-i(k_z-k_j)}) - \\ & \frac{3i}{2} (e^{i(k_x+k_y)} - e^{-i(k_x+k_y)} - e^{i(k_x-k_y)} + e^{-i(k_x-k_y)}) + \frac{i}{2} (e^{2ik_y} - e^{-2ik_y}) \end{aligned} \quad (4.53)$$

**Modelo de Enlace Toroidal (4,2) (Solomon's knot Topological Semimetal)**

Nuestro último modelo por analizar es el nudo de Solomon (enlace toroidal  $T_{4,2}$ ) el cual está asociado con los enteros  $p = 4$  y  $q = 2$ , los polinomios asociados son:

$$d_x = k_x^4 - 6k_x^2 k_y^2 + k_y^4 + z^2 - (M - \frac{1}{2}k^2)^2 \quad (4.54)$$

$$d_z = 4k_x^3 k_y - 4k_x k_y^3 + 2k_z (M - \frac{1}{2}k^2) \quad (4.55)$$

realizando nuestra aproximación en senos y cosenos,

$$d_x = 2 \sin^2 k_x (1 - \cos k_x) - 12 \sin^2 k_x (1 - \cos k_y) + 2 \sin^2 k_y (1 - \cos k_y) + \sin^2 k_z - \left( \sum_j \cos k_j - m \right)^2 \quad (4.56)$$

$$d_z = 8 \sin k_y \sin k_x (1 - \cos k_x) - 8 \sin k_x \sin k_y (1 - \cos k_y) + 2 \sin k_z \left( \sum_j \cos k_j - m \right) \quad (4.57)$$

Sin pérdida de generalidad, tenemos los siguientes polinomios de senos y cosenos,

$$\begin{aligned} d_x &= -10 \sin^2 k_x - \sin 2k_x \sin k_x + 12 \sin^2 k_x \cos k_y + 2 \sin^2 k_y - \sin 2k_y \sin k_y + \sin^2 k_z \\ &\quad - \sum_j \cos^2 k_j - (\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y) + \cos(k_x + k_z) + \cos(k_x - k_z) \\ &\quad + \cos(k_z + k_y) + \cos(k_z - k_y)) + 2m \sum_j \cos k_j - m^2 \quad (4.58) \\ &= -1 - \frac{9}{2}(1 - \cos 2k_x) + \frac{1}{2}(\cos(2k_x + k_x) - \cos(2k_x - k_x)) + 6(1 - \cos 2k_x) \cos k_y \\ &\quad - \cos 2k_y + \frac{1}{2}(1 - \cos 2k_y) + \frac{1}{2}(\cos(2k_y + k_y) - \cos(2k_y - k_y)) - \cos 2k_z - \\ &\quad (\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y) + \cos(k_x + k_z) + \cos(k_x - k_z) + \cos(k_z + k_y) \\ &\quad + \cos(k_z - k_y)) + 2m \sum_j \cos k_j - m^2 \quad (4.59) \end{aligned}$$

$$d_z = -4 \sin k_y \sin 2k_x + 4 \sin k_x \sin 2k_y + \sum_j (\sin(k_z + k_j) + \sin(k_z - k_j)) - 2m \sin k_z \quad (4.60)$$

$$d_z = 2(\cos(2k_x + k_y) - \cos(2k_x - k_y)) + 2(\cos(2k_y - k_x) - \cos(2k_y + k_x)) + \sum_j (\sin(k_z + k_j) + \sin(k_z - k_j)) - 2m \sin k_z \quad (4.61)$$

**Obervación Importante**

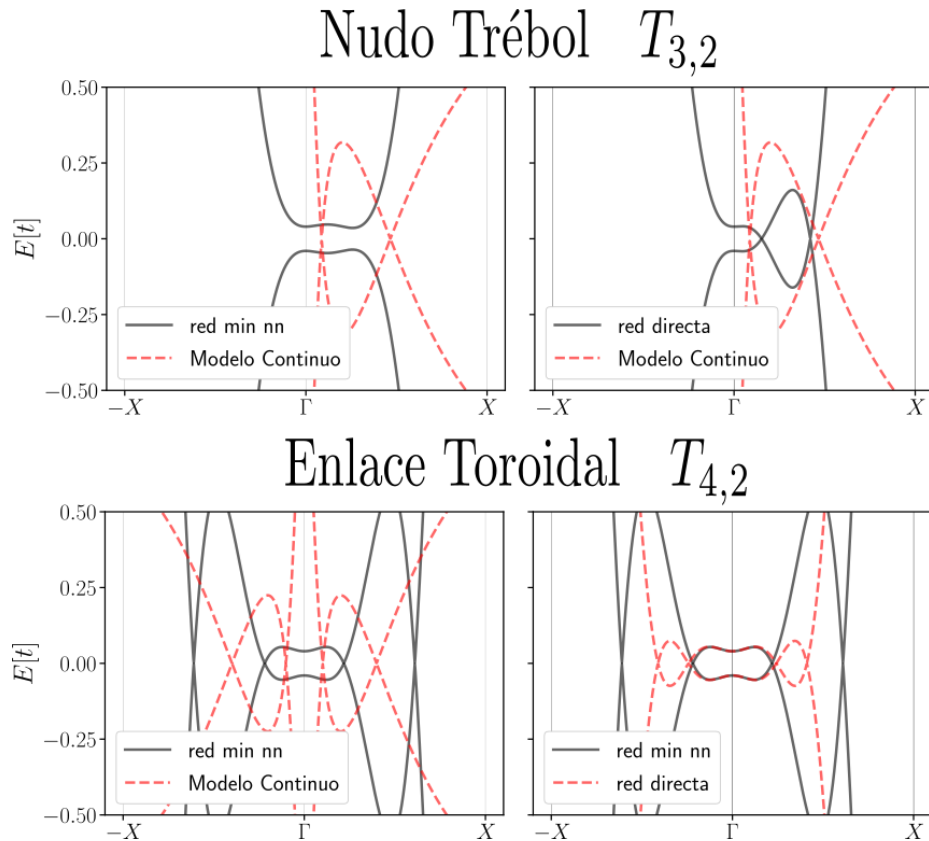
Notamos que para los valores  $p \leq 2$  y  $q \leq 2$  los modelos de redes cúbicas son los mismos en ambas aproximaciones de los nodos topológicos.

## 4.2. Energía de Bulto en los Semimetales Topológicos de Nudo

En esta sección presentamos los resultados de modelar las redes cúbicas mencionadas anteriormente, donde realizamos una exploración de la energía de Fermi ( $E_F = 0$  por la simetría electrón hueco). Además, construimos los modelos de red en el paquete de python *pythb* para romper condiciones de periodicidad en alguna dirección dado los vectores base de la red. En adelante definimos  $k_{\perp}$  a la dirección donde hemos roto condiciones de periodicidad.

### 4.2.1. Aproximación de los Nodos de Los Modelos de Red

Primero, hacemos mención de la diferencia de aproximar los nodos con los modelos de red. Dado los modelos de red para los nudos  $T_{3,2}$  y  $T_{4,2}$ . En la figura (4.2), para el caso del nudo trébol hacemos notar que en general para el término  $m = 3.2$  el modelo de red de mínima interacción es un aislante, mientras que el modelo de red directa si presenta el mismo número de nodos. Por otro lado, el modelo de enlace toroidal presenta el mismo número de nodos; comparando ambos modelos de red observamos que la red directa tiene los nodos más cercanos al punto  $\Gamma$ . Sin embargo, en el modelo de mínima interacción desta que los conos generados alrededor de los nodos son conos con mayor pendiente, debido a esto estudiaremos las propiedades electrónica del modelo de red de mínima interacción.


 Figura 4.2: Aproximación de los nodos del modelo continuo en los modelos de red para  $m = 3.2$ 

### 4.2.2. Simetría de las Bandas

La construcción de los modelos continuos para cualquier modelo de red es importante cuando realizamos la caracterización topológica, y esto es porque si tomamos de ejemplo una red tridimensional, es más fácil trabajar con  $\mathbb{R}^3$  a  $\mathbb{T}^3$ . Es por eso que en la figura (4.3), hemos representado como evolucionan las bandas del bulto por el parámetro  $m$ , donde destacamos que mientras se tenga el mismo número de nodos, las bandas tendrán la misma topología, sin embargo para  $m = 3.0$  no se cumple debido a que como mencionamos en el cálculo del *winding number* no está definido el mapeo de Hopf, por lo que no tienen la misma topología el modelo continuo y de red. En la figura (4.3) tenemos el mismo comportamiento de los operadores en las bandas. En comparación con las bandas del modelo SSH en la figura (2.2), existían puntos en donde cambiaban los valores de expectación, sin embargo en los semimetales topológicos estos cambios estarán dados por los nodos.

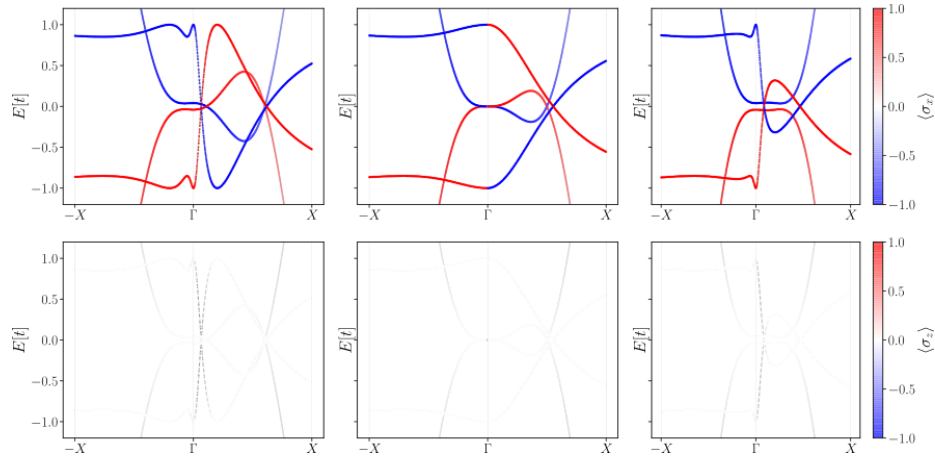


Figura 4.3: Energía de bulto en el semimetal topológico de nudo toroidal  $T_{3,2}$ , valores de expectación del operador de inversión  $\hat{\sigma}_x$  y el operador  $\hat{\sigma}_z$ , y de izquierda derecha  $m = 2.8$ ,  $m = 3.0$ ,  $m = 3.2$

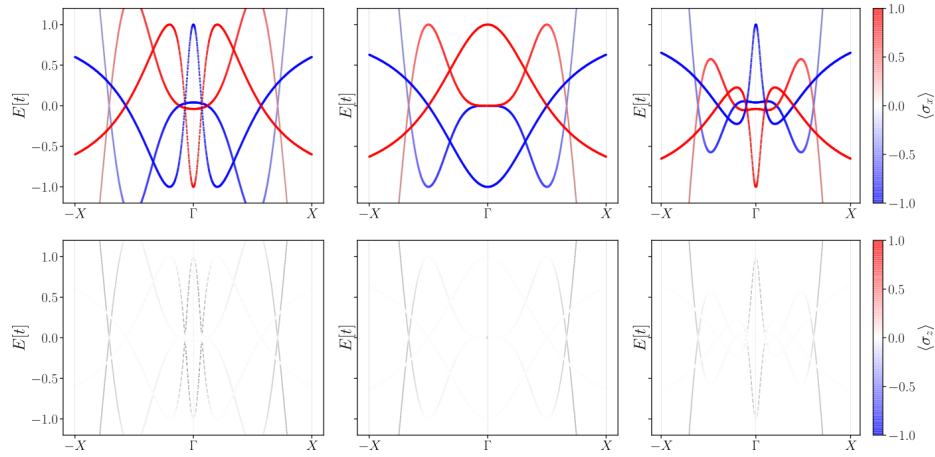


Figura 4.4: Energía de bulto en el semimetal topológico de nudo toroidal  $T_{4,2}$ , valores de expectación del operador de Inversión  $\sigma_x$  y el operador  $\sigma_z$ , y de izquierda derecha  $m = 2.8$ ,  $m = 3.0$ ,  $m = 3.2$

### 4.2.3. Energía de Fermi

En esta parte realizamos el cálculo de los nodos donde es importante visualizar los nudos y las transiciones que sufren en la evolución del parámetro  $m$ .

Además, definimos un hamiltoniano  $H'$  con término de masa como

$$H' = H_{\mathcal{PT}} + m_z \sigma_z. \quad (4.62)$$

A partir del término de masa  $m_z$  esperamos romper la degeneración de los nodos, en nuestro caso realizamos una búsqueda de los nodos donde se abrirá una brecha de energía para identificar la deformación en los nudos.

**Evolución de los Nudos sin Término de masa**

A continuación presentamos los nudos generados por las redes cúbicas de nudo  $T_{2,2}$ ,  $T_{3,2}$  y  $T_{4,2}$ . En la figura (4.5), observamos que el valor del parámetro  $m$  están dados alre-

**Transiciones a partir del parámetro de mapeo  $m$   
Enlace Toroidal (2,2)**

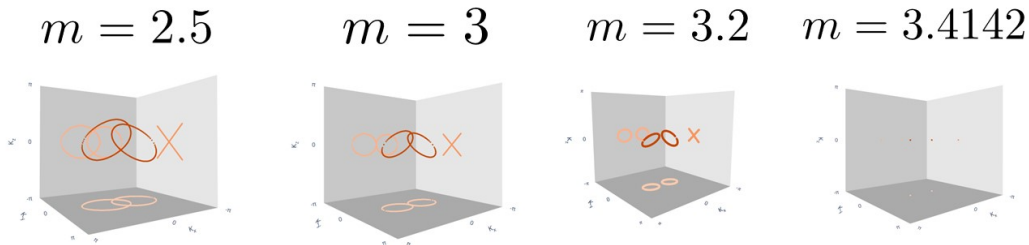


Figura 4.5: Evolución de la Energía de Fermi por el parámetro  $m$

dedor del punto crítico  $m = 3.0$ , decimos que es crítico debido a que corresponde al valor  $M = 0$  donde no está definido el *winding number*. Dado  $m < 3$  se tiene un enlace de aros (*nodal-link*). Con  $m = 3.0$  no se tiene definido un nudo debido a que en los nudos no deben haber puntos de intersección. Para  $m > 3$ , tenemos que el enlace se separa en dos aros o líneas nodales. De las figuras (4.6) y (4.7), en general observamos que cuando se está en un valor cercano y menor de  $m = 3.0$  se forma el nudo  $T_{p,q}$ , para el valor crítico los nudos se degeneran y forma una *flor* en el punto  $\Gamma$  y los pétalos corresponden al número  $p$  dado el nudo  $T_{p,q}$ , para  $m > 3$  se rompe la flor y los pétalos se deforman en lazos hasta degenerarse en un punto. Observamos que existirá un valor crítico al cual la red corresponda a un aislante normal.

En la figura (4.6), tenemos que para  $m = 2.5$  ya no se forma el nudo trébol  $T_{3,2}$ , es por eso que especificamos que el término  $m$  debe ser cercano al valor crítico  $m = 3.0$ , adelante veremos como se comportan los estados de borde para el bulto de esta red.

### Transiciones a partir del parámetro de mapeo Nudo Toroidal (3,2)

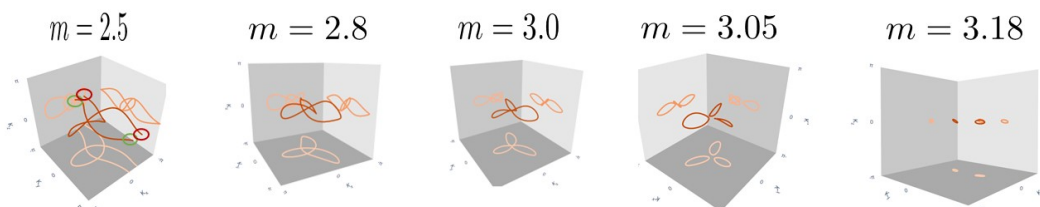


Figura 4.6: Evolución de la Energía de Fermi por el parámetro  $m$ .

### Transiciones a partir del parámetro de mapeo $m$ Enlace Toroidal (4,2)

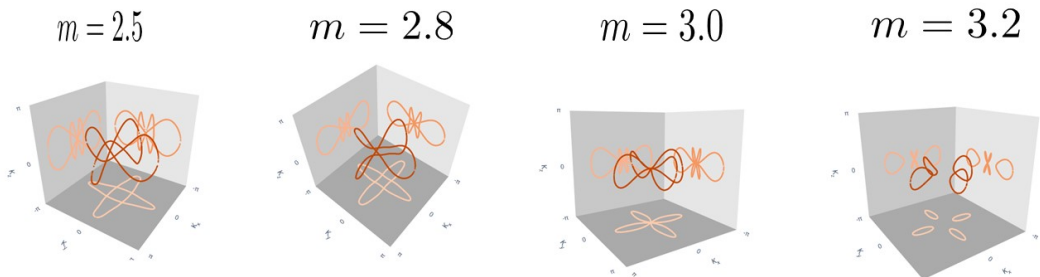


Figura 4.7: Evolución de la Energía de Fermi por el parámetro  $m$ .

#### Evolución de los Nudos con Término de Masa $m_z$

De acuerdo a la ecuación (4.62), agregaremos un término de masa. Empezamos con agregar un término de masa  $T_{2,2}$  y  $T_{4,3}$ .

En las figuras (4.6) y (4.7), observamos que se deforman los nodos cercanos al punto  $\Gamma$  y los enlaces pasan a ser nudos triviales o un aro. No está presente la transición correspondiente al nudo trébol, pero paso la misma transición de formarse un nudo trivial.

Después, tenemos un análisis para el nudo trébol con  $m = 2.8$ , este análisis corresponde al conjunto de término de masa  $m_z \in \{0, 0.045, 0.058, 0.06, 0.07\}$ , este conjunto de

**Transiciones con el término de masa  $m_z$ , para  $m = 3.0$   
Enlace Toroidal (2,2)**

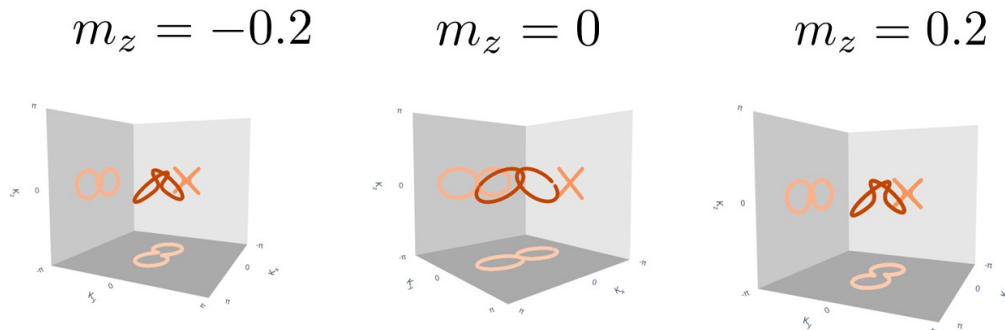


Figura 4.8: Deformación del enlace  $T_{2,2}$  alrededor del punto crítico  $m = 3.0$ , en función del término de masa  $m_z$ .

**Transiciones con el término de masa  $m_z$ , para  $m = 3.0$   
Enlace Toroidal (4,2)**

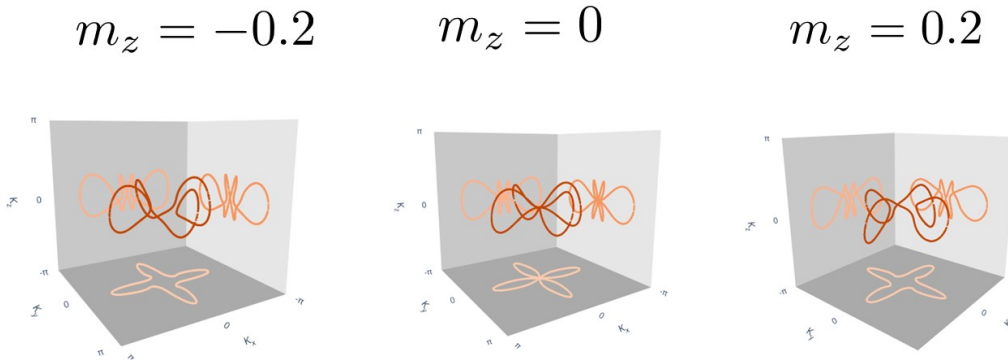


Figura 4.9: Deformación del enlace  $T_{4,2}$  alrededor del punto crítico  $m = 3.0$ , en función del término de masa  $m_z$ .

parámetros corresponde a los reportados el 2017 en el trabajo [11]. las transiciones que sufre el nudo son los siguiente: nudo trébol, tres aros enlazados, dos aros no enlazados, aro o nudo trivial. Esto lo podemos constatar con lo obtenido en la figura (4.10)



**Transiciones con el término de masa  $m_z$  para  $m = 2.8$   
Nudo Toroidal (3,2)**

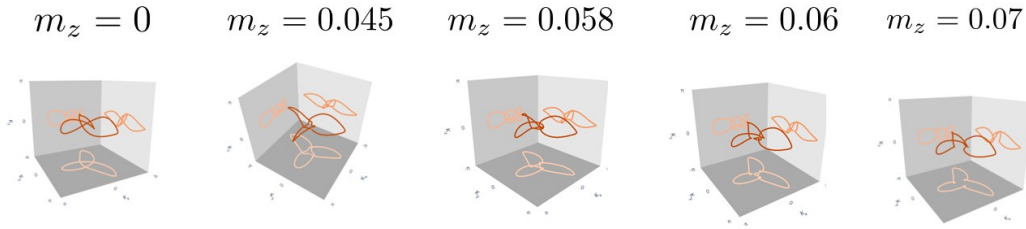


Figura 4.10: Evolución de la energía de Fermi del parámetro  $m$ .

### 4.3. Rompiendo la Periodicidad en Una Dirección

De la discusión del modelo SSH en la sección 4 del segundo capítulo, sabemos que existe una correspondencia del bulto con los estados de borde al romper las condiciones de periodicidad.

#### 4.3.1. Estructura de Bandas sin Término de Masa

En las figuras (4.11), (4.12), (4.13), (4.14), (4.15) y (4.16), hemos realizado el cálculo de la estructura de bandas correspondiente a 201 capas paralelas al vector de red recíproca en la que hemos roto las condiciones de periodicidad. La construcción de estos bloques y restringir las condiciones de periodicidad se realizaron en la paquetería *pythtb*.

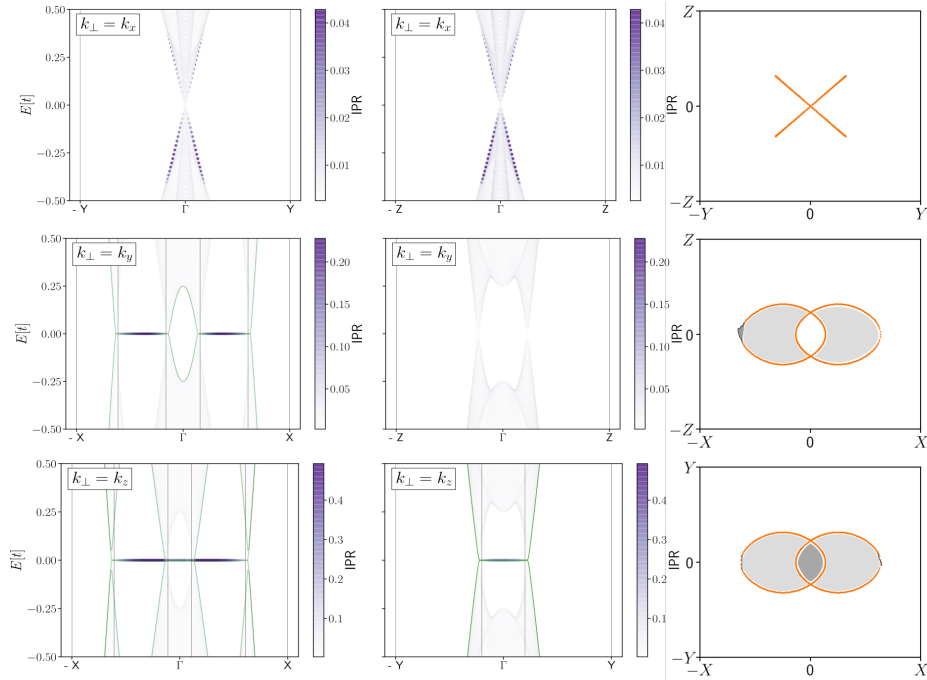


Figura 4.11: Estructura de bandas de 200 capas de semimetal topológico  $T_{2,2}$  con  $m = 2.5$ . Cálculo del IPR y bandas planas.

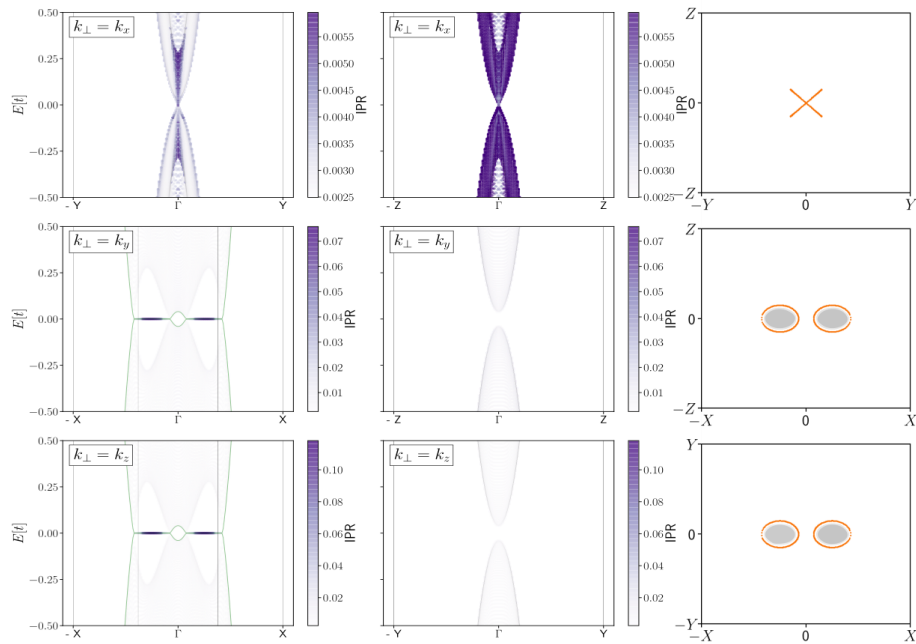


Figura 4.12: Estructura de bandas de 200 capas de semimetal topológico  $T_{2,2}$  con  $m = 3.2$ . Cálculo del IPR y bandas planas.

Como se vio en la subsección anterior, tomamos la estructura de bandas para  $m = 3.0$  debido a que en  $m = 3.2$  es un aislante y no estamos interesados en evaluar las propiedades electrónicas en esos estados.

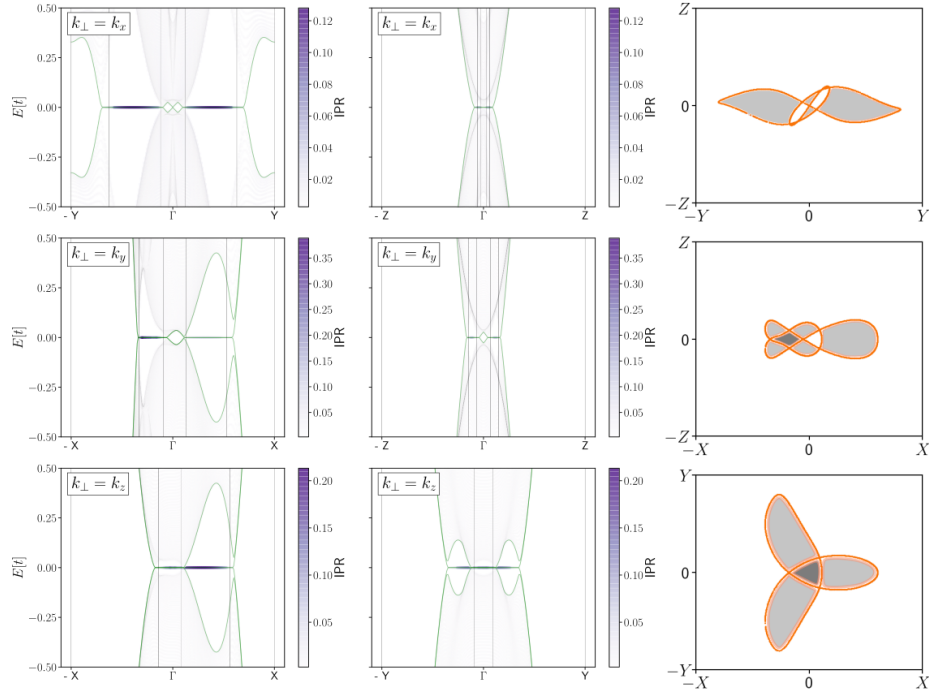


Figura 4.13: Estructura de bandas de 200 capas de semimetal topológico  $T_{3,2}$  con  $m = 2.8$ . Cálculo del IPR y bandas planas.

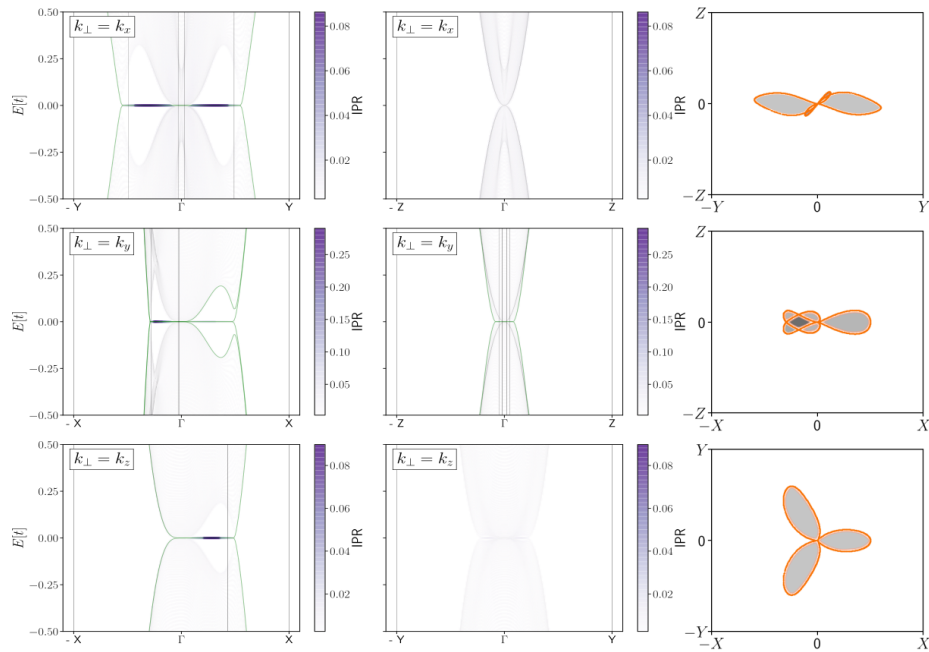


Figura 4.14: Estructura de bandas de 200 capas de semimetal topológico  $T_{3,2}$  con  $m = 3.0$ . Cálculo del IPR y bandas planas.

Observamos que los estados de borde están restringidos a ocurrir en zonas confinadas por la proyección de los nudos en los planos periódicos. Observamos que cuando se tiene un

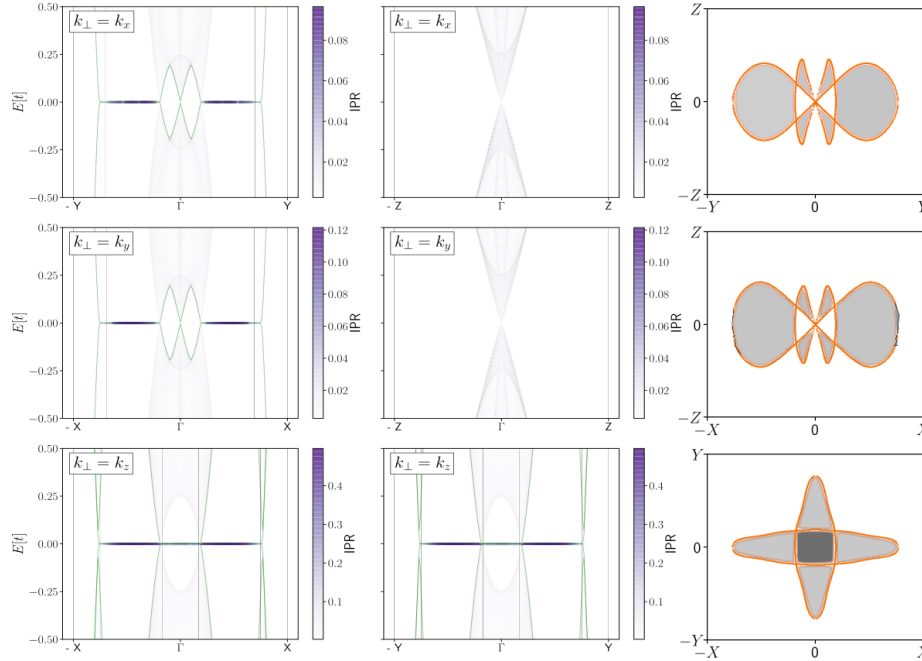


Figura 4.15: Estructura de bandas de 200 capas de semimetal topológico  $T_{4,2}$  con  $m = 2.5$ . Cálculo del IPR y bandas planas.

nudo o enlace, existen más de un estado de borde, los cuales representamos con un color negro (tercera columna de cada figura). En el caso  $m > 3$  corresponden a los estados de borde de un semimetal de línea nodal topológico. De manera análoga al modelo SSH se realizó el valor de expectación de la posición de los planos, y se observó que los nodos correspondían a estados de borde, pero no poseen la simetría  $\Sigma_S$ , debido a que el electrón está mayormente localizado en el centro de una celda unitaria. Entonces observamos que la transición de los nudos es similar a un semimetal topológico de línea nodal, y el *winding number* estará asociado con estados de borde extra.

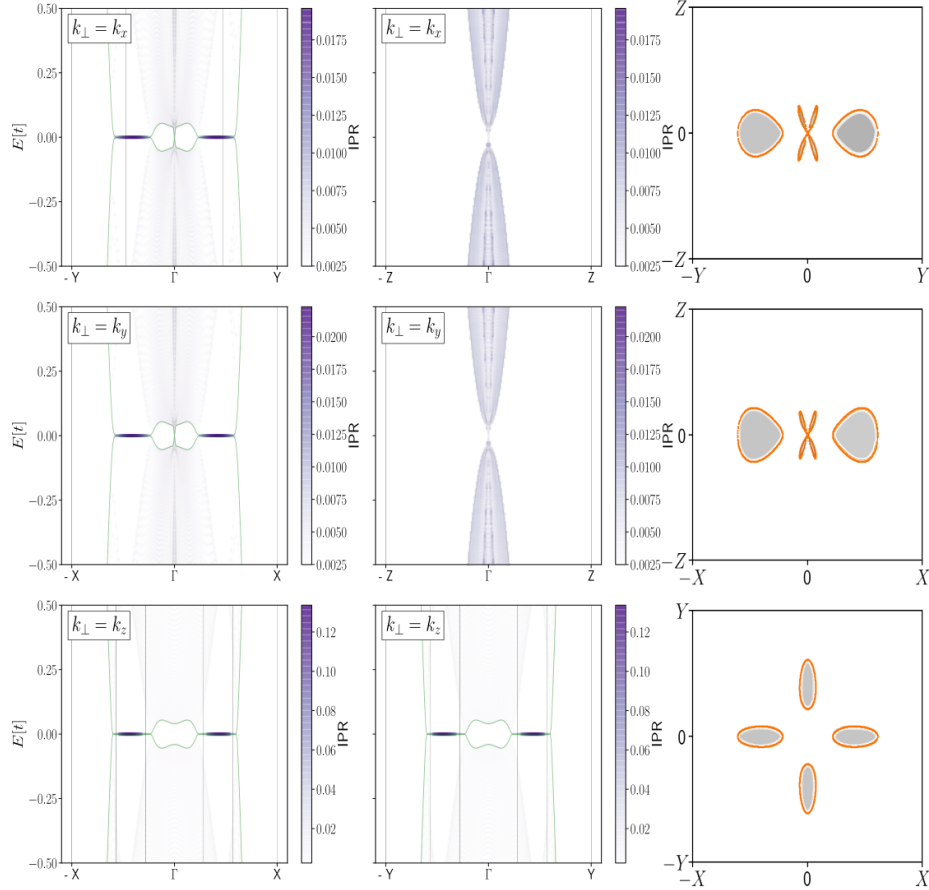


Figura 4.16: Estructura de bandas de 200 capas de semimetal topológico  $T_{4,2}$  con  $m = 3.2$ . Cálculo del IPR y bandas planas.

### 4.3.2. Evolución de los Estados de Borde en el Semimetal topológico de Nudo Trébol con $m = 2.8$

Como se observó anteriormente, podemos asociar una superficie de banda plana a las estructuras de bandas. En la figura (4.17), observamos como se va dando la transición, lo cual destaca que al romper la periodicidad en la dirección y añadir un término de masa, rompe con la degeneración. Aunque hay planos en los cuales no podemos romper esta degeneración, similar a los estados presentes en el modelo  $T_{3,2}$  y  $k_{\perp} = k_y$ , son estados robustos.

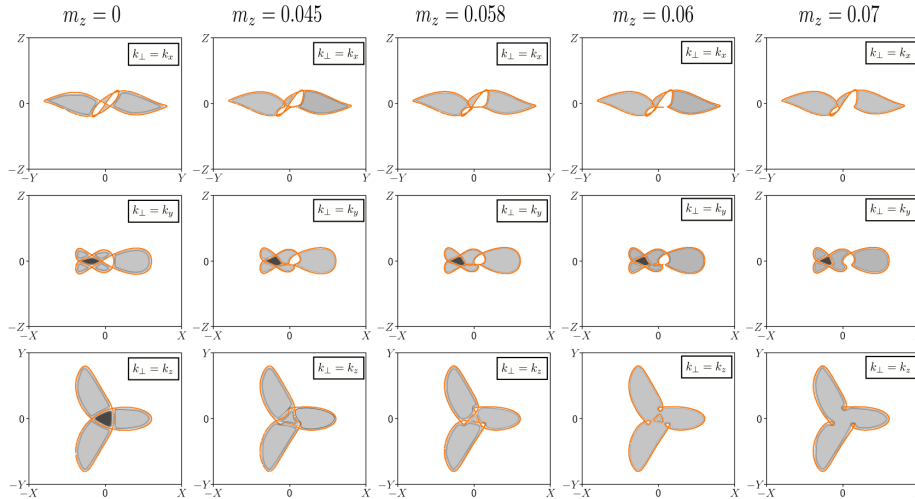


Figura 4.17: Evolución de las bandas planas en el nudo trébol con término de masa, las regiones más oscuras representan una degeneración.

### 4.3.3. Estados Localizados con Energía Distinta de Cero en $m = 2.5$

Al evaluar la energía de Fermi en la figura (4.6), observamos que ya no se forma el nudo trébol para  $m = 2.5$ . Sin embargo, estudiamos su estructura de bandas. Lo interesante de la figura (4.18) es que tenemos estados localizados a una energía distinta de cero, este estado también corresponde a un estado de borde mayormente localizado. Observamos como evoluciona el operador  $\Sigma_S$ , y debido a la evolución de los nodos generados, el operador  $\Sigma_S$  corresponde con la evolución de los nodos.

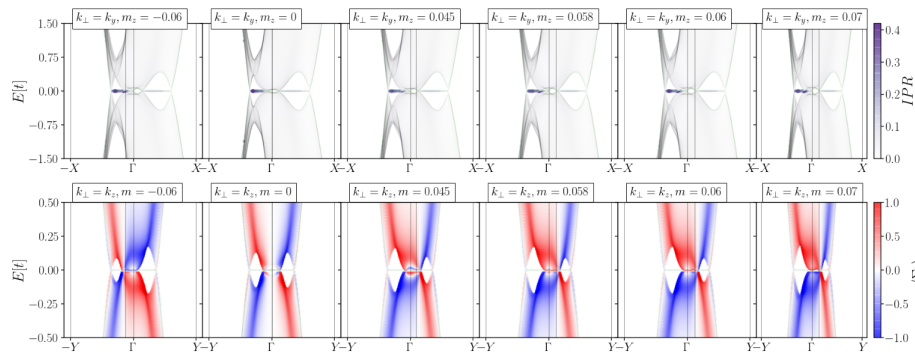


Figura 4.18: Estados de Borde a Energía distinta de cero.

## 4.4. Transporte Electrónico en Bloques: Terminales en la Dirección $z$

Kwant es un modulo de python que nos permite realizar cálculos numéricos de transporte cuántico en sistemas descritos por un hamiltoniano de amarre fuerte de cualquier dimensionalidad y geometría; de interés especial son los cálculos de propiedad de transporte como la

matriz de dispersión, la conductancia y los flujos de corriente [38]. En esta sección presentaremos resultados de la conductancia asociados a la topología de las bandas al mantener canales en la dirección  $z$ , los canales y terminales corresponderán a bloques semi-infinitos de semimetales topológicos de nudo y enlaces toroidales.

#### 4.4.1. Método Landauer-Büttiker

El método de *Landauer-Büttiker* es importante para el estudio del transporte cuántico a la nanoescala. Aunque el uso de este método no es aplicable en sistemas con interacción.

A continuación construiremos los resultados de la teoría de dispersión cuántica en 1 canal individual e independiente. Adicionalmente, obtendremos la ecuación de Landauer, el caso de multicanales no se obtendrá, pero partimos del hecho de que la paquetería *kwant* define las matrices de la zona de dispersión y de las terminales, para obtener los cálculos numéricos de la conductancia [39].

#### Método de Diferencias Finitas Aplicado a la Ecuación de Schrödinger 1D con Potencial Finito en una Región

El hamiltoniano que define a nuestro sistema, está dado como,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}),$$

sea  $\psi(x)$  un elemento de la base del espacio de Hilbert correspondiente a  $H$ , entonces la ecuación de eigenvalores está dado como:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (4.63)$$

$$\left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right) \psi(x) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (4.64)$$

ahora definimos nuestro potencial finito como:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ v(x) & x \in \{0, l\}, \\ 0 & x > l. \end{cases} \quad (4.65)$$

Entonces, debido a las condiciones de frontera de las regiones, proponemos las soluciones para nuestro sistema como:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \psi_I(x) & x < 0, \\ \psi_{II}(x) & x \in [0, l], \\ \psi_{III}(x) & x > l. \end{cases} \quad (4.66)$$

Cada una satisface las ecuaciones diferenciales:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = E\psi_I(x), \quad (4.67)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} + V(x)\psi_{II}(x) = E\psi_{II}(x), \quad (4.68)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_{III}(x)}{dx^2} = E\psi_{III}(x), \quad (4.69)$$

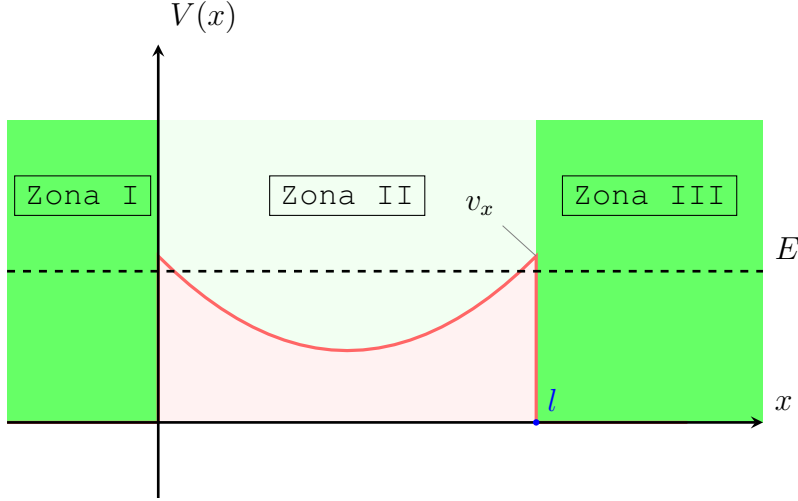


Figura 4.19: Potencial finito en una región dada por la ecuación (4.65).

la solución para la primera y tercera ecuación diferencial corresponde a la solución de onda plana definida para partículas libre, la función correspondientes son las ondas planas:

$$\psi_I(x) = A_I e^{i \cdot k \cdot x} - B_I e^{-i \cdot k \cdot x} \quad (4.70)$$

$$\psi_{III}(x) = A_{II} e^{i \cdot k \cdot x} - B_{II} e^{-i \cdot k \cdot x}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{en ambos casos.} \quad (4.71)$$

Sin embargo, para la segunda ecuación diferencial no necesariamente hay solución analítica con  $v(x)$  arbitrario, un método de aproximar estas soluciones es por el método de diferencias finitas, el cual consiste en realizar una discretización de nuestro espacio, para el caso 1D, tomamos:

$$x_n = na, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N. \quad a = \frac{l}{N}. \quad (4.72)$$

Entonces, recordemos como se define a la derivada,

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x_n} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\psi(x_n + a) - \psi(x_n)}{a}, \quad (4.73)$$

para la segunda derivada, se tiene:

$$\left. \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \right|_{x_n} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{d\psi(x+a)|_{x_n} - d\psi(x)|_{x_n}}{a}, \quad (4.74)$$

$$= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{a} \left( \frac{\psi(x_n + a) - \psi(x_n)}{a} - \frac{\psi(x_n) - \psi(x_n - a)}{a} \right), \quad (4.75)$$

$$= \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\psi(x_n + a) - 2\psi(x_n) + \psi(x_n - a))}{a^2}. \quad (4.76)$$

En la figura (4.20), resumimos estas ideas. Ahora realizamos la sustitución de la aproxima-



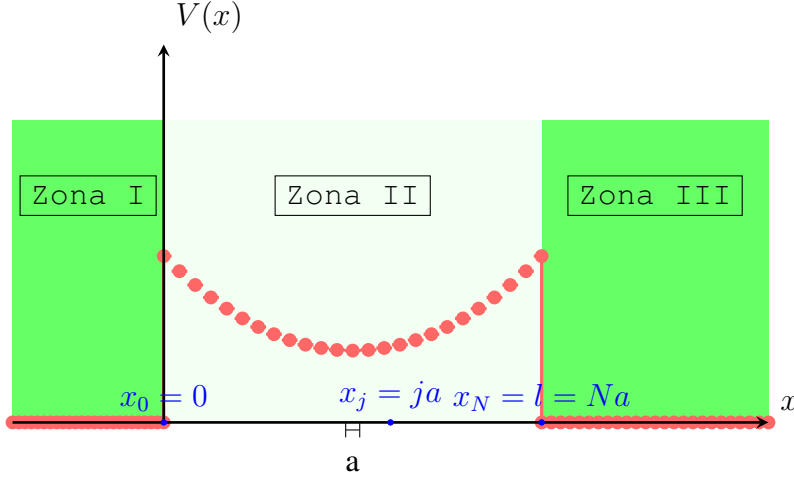


Figura 4.20: Discretización del espacio con un potencial definido en una región (zona de dispersión).

ción de los operadores para cualquier punto  $x_n$ :

$$\psi(x_n) = \psi_n, \quad (4.77)$$

$$v(x_n) = V_n, \quad (4.78)$$

$$\left. \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \right|_{x_n} \approx \frac{\psi(x_n + a) - 2\psi(x_n) + \psi(x_n - a)}{a^2}. \quad (4.79)$$

Sustituimos estas aproximación a nuestra ecuación diferencial (4.68):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1}) + V_n\psi_n = E\psi_n, \quad (4.80)$$

$$(4.81)$$

en adelante realizamos la sustitución  $t = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ ,

$$-t\psi_{n-1} + (V_n + 2t)\psi_n - t\psi_{n+1} = E\psi_n \quad (4.82)$$

$$-\psi_{n+1} - \psi_{n-1} + V'_n\psi_n = E\psi_n, \quad \text{definimos } (V_n + 2t) = V'_n. \quad (4.83)$$

De manera análoga al caso continuo, donde las soluciones de la región  $I$  y  $II$ , la solución del caso discreto, corresponden a una cadena semi-infinita:

$$\psi_n = e^{i\cdot k \cdot x_n} - r e^{-i\cdot k \cdot x_n} \quad n \leq 0 \quad (4.84)$$

$$\psi_n = \mathfrak{t} e^{i\cdot k \cdot x_n} \quad n > N \quad (4.85)$$

$$E = -2 \cos(k \cdot a), \quad \text{relación de dispersión.} \quad (4.86)$$

Donde hemos asignado en este sistema de ecuaciones una onda entrante por la Zona  $I$ ,  $r$  denota el coeficiente de la onda reflejada y en la Zona  $III$  en  $\mathfrak{t}$  identificamos la onda transmitida. Entonces la ecuación diferencial por el método de diferencias finitas corresponde

con cumplir:

$$n = 0 : r e^{-ik} - \psi_1 = -e^{ik}, \quad (4.87)$$

$$n = 1 : r + (E - V_1') \psi_1 + \psi_2 = -1, \quad (4.88)$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad = \quad \vdots$$

$$n = j : \psi_{j-1} + (E - V_j') \psi_j + \psi_{j+1} = 0, \quad (4.89)$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad = \quad \vdots$$

$$n = N : \psi_{N-1} + (E - V_N') \psi_N + \mathfrak{t} e^{ik(N+1)} = 0, \quad (4.90)$$

$$n = N + 1 : \psi_N - \mathfrak{t} e^{ikN} = 0. \quad (4.91)$$

Ahora el problema se reduce a calcular el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{pmatrix} e^{-i \cdot k} & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 1 & E - V_1 & 1 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & E - V_2 & 1 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & E - V_j & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 1 & E - V_N & e^{-ik \cdot (x_N + a)} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 & -e^{ik \cdot x_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_j \\ \vdots \\ \psi_N \\ \mathfrak{t} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -e^{i \cdot k} \\ -1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.92)$$

### Matriz de Dispersión

Adicionalmente, de la ecuación (4.92) definimos la matriz de dispersión  $S$ ,

$$S = \begin{pmatrix} r & \mathfrak{t} \\ \mathfrak{t}' & r' \end{pmatrix} \quad (4.93)$$

donde  $r'$  y  $\mathfrak{t}'$  corresponde a los coeficientes de tomar el caso de la onda plana entrante por la zona III y con una transmisión  $\mathfrak{t}'$  en la zona I. A partir de estos coeficientes, definimos:

$$T_{L \rightarrow R} = |\mathfrak{t}|^2, \quad \text{Coeficiente de transmisión de izquierda a derecha,} \quad (4.94)$$

$$R_{L \rightarrow R} = |r|^2, \quad \text{Coeficiente de reflexión de izquierda a derecha,} \quad (4.95)$$

$$T_{R \rightarrow L} = |\mathfrak{t}'|^2, \quad \text{Coeficiente de transmisión de derecha a izquierda,} \quad (4.96)$$

$$R_{R \rightarrow L} = |r'|^2, \quad \text{Coeficiente de reflexión de derecha a izquierda.} \quad (4.97)$$

A partir de estos coeficientes uno obtiene,

$$|\mathfrak{t}|^2 = (1 - |r|^2) \quad (4.98)$$

$$|\mathfrak{t}'|^2 = (1 - |r'|^2) \quad (4.99)$$

que la matriz  $S$  cumple que,

$$S S^\dagger = 1, \quad S \text{ es una matriz unitaria.} \quad (4.100)$$

### Ecuación de Landauer: Conductancia para un Canal

Entonces ya hemos planteado una aproximación del problema de dispersión de una partícula. Entonces, podemos construir una aproximación en la conductancia en un canal con dispersores elásticos y física estadística cuántica a partir de la transmisión y reflexión en el canal [40]. Partiendo de la primera fórmula de Landauer,

$$G' = \frac{e^2}{h} \frac{T}{1-T} = \frac{e^2}{h} \frac{T}{R}. \quad (4.101)$$

Los casos límites de la ecuación (4.101): Primero tenemos  $T \rightarrow 0$  y esto corresponde a una conductancia pequeña y proporcional a  $T$  y corresponde a cálculos realizados en teoría de perturbación. El segundo caso es tener  $T \rightarrow 1$  y  $R \rightarrow 0$ , donde vemos que la conductancia se hace muy grande  $G'$  y esto hace sentido con tener resistencia en las zonas dispersoras.

### Derivación Heurística

Recordemos la ecuación de la conservación de la probabilidad (2.19), donde podemos definir la corriente de probabilidad, asociado a la corriente eléctrica  $J$ ,

$$J(x) = i \frac{\hbar}{2m} \left( \psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - \psi(x) \frac{\partial \psi^*(x)}{\partial x} \right). \quad (4.102)$$

En el espacio discretizado, tiene la siguiente ecuación,

$$J(x_n) \approx i \frac{\hbar}{2m} \left( \psi^*(x_n) \left( \frac{\psi(x_{n+1}) - \psi(x_n)}{a} \right) - \psi(x_n) \left( \frac{\psi^*(x_{n+1}) - \psi^*(x_n)}{a} \right) \right), \quad (4.103)$$

$$= i \frac{\hbar}{2m} \left( \psi^*(x_n) \cdot \frac{\psi(x_{n+1})}{a} - \psi(x_n) \cdot \frac{\psi^*(x_{n+1})}{a} \right), \quad a = 1, \quad (4.104)$$

$$= i \frac{t}{\hbar} (\psi_{n+1} \cdot \psi_n^* - \psi_n \cdot \psi_{n+1}^*), \quad \text{recordemos } t = \frac{\hbar^2}{2m} \quad (4.105)$$

$$= i \frac{1}{\hbar} (\psi_{n+1} \cdot \psi_n^* - \psi_n \cdot \psi_{n+1}^*), \quad \text{con } t = 1. \quad (4.106)$$

Para las terminales con solución de ondas planas, se tiene

$$\psi_n = e^{ik \cdot x_n} = e^{ik \cdot n}. \quad (4.107)$$

Entonces, la corriente asociada a las terminales está dado como:

$$J_n = i \frac{1}{\hbar} (e^{ik \cdot (n+1)} e^{-ik \cdot n} - e^{-ik \cdot (n+1)} e^{ik \cdot n}), \quad (4.108)$$

$$= i \frac{1}{\hbar} (e^{ik} - e^{-ik}), \quad (4.109)$$

$$= \frac{1}{\hbar} 2 \sin(k), \quad (4.110)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k}, \quad (4.111)$$

$$= \frac{1}{\hbar} v(k), \quad v(k) \equiv \frac{\partial E(k)}{\partial k}. \quad (4.112)$$

Para los estado dispersados de la ecuación (4.84), la corriente está dada como:

$$J_n = i \frac{1}{\hbar} \left( (e^{ik \cdot (n+1)} + r e^{-ik \cdot (n+1)}) (e^{-ik \cdot n} + r e^{ik \cdot n}) - (e^{-ik \cdot (n+1)} + r e^{ik \cdot (n+1)}) (e^{ik \cdot n} + r e^{-ik \cdot n}) \right), \quad (4.113)$$

$$= i \frac{1}{\hbar} (e^{ik} + |r|^2 e^{-ik} - e^{-ik} - |r|^2 e^{ik}), \quad (4.114)$$

$$= \frac{1}{\hbar} 2 \sin(k) (1 - |r|^2), \quad (4.115)$$

$$= \frac{1}{\hbar} v(k) (1 - |r|^2), \quad (4.116)$$

$$= \frac{1}{\hbar} v(k) |\mathbb{t}|^2. \quad (4.117)$$

Entonces, realizamos el cálculo de la ecuación asociado a la corriente eléctrica  $I$ . Supongamos que las terminales no están en equilibrio térmico, al entrar en contacto generarán una corriente dada a partir de las funciones de distribución  $f_L$  y  $f_R$  que corresponde a la distribución de electrones en las terminales de la *zona I* y *zona III*, respectivamente;

$$I = \frac{e}{\hbar} \int \frac{dk}{2\pi} (v_k |\mathbb{t}|^2 f_L(E(k)) - v_k |\mathbb{t}'|^2 f_R(E(k))), \quad (4.118)$$

donde  $e$  es la carga del electrón y hemos sustituido nuestro resultado de la corriente de probabilidad  $J$ . Recordemos la distribución de Fermi-Dirac de los electrones en las terminales

$$f_L(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_L)/kT_L} + 1}, \quad (4.119)$$

$$f_R(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu_R)/kT_R} + 1}. \quad (4.120)$$

En la cadena lineal, podemos obtener la siguiente ecuación que relaciona la velocidad de grupo con la densidad de estados,

$$dE = v(k) dk, \quad (4.121)$$

ahora tenemos la siguiente ecuación para la corriente

$$I = \frac{e}{h} \int dE |\mathbb{t}|^2 (f_L(E(k)) - f_R(E(k))), \quad h = 2\pi\hbar. \quad (4.122)$$

Realizamos una aproximación para bajas temperaturas, esto es considerando el potencia química de las terminales  $\mu_L$  y  $\mu_R$ ,

$$eV = \mu_L - \mu_R \quad (4.123)$$

$$\mu_L = E_F + \frac{eV}{2}, \quad (4.124)$$

$$\mu_R = E_F - \frac{eV}{2}. \quad (4.125)$$

Esto nos permite calcular un valor aproximado de la integral de la ecuación (4.122),

$$I = \frac{e^2}{h} |\mathfrak{t}(E_F)|^2 V \quad (4.126)$$

partir de la ley de un Ohm podemos definir la conductancia como

$$G = \frac{I}{V} = \frac{e^2}{h} |\mathfrak{t}(E_F)|^2,$$

correspondiente a la formula de Landauer.

#### 4.4.2. Conductancia en Semimetales Topológicos de Nudos

Para realizar nuestro estudio sistemático de la propiedades electrónicas de los semimetales topológicos de nudos, hemos realizado el cálculo del *winding number* y ver sus efectos en los *modos de energía cero*. Ahora rompemos la periodicidad en dos direcciones. De manera análoga a los canales unidimensionales anteriormente descritos, proponemos un bloque rectangular, las terminales son de base cuadrada y su dimensión en celdas unitarias corresponde a  $30 \times 30 \times 2$ , la región de dispersión corresponde con un bloque rectangular de base cuadrada, las dimensiones están dadas por  $30 \times 30 \times 90$ . Esto corresponde al sistema representado en la figura (4.21). En adelante, reportaremos el cálculo aproximado de la conductancia.

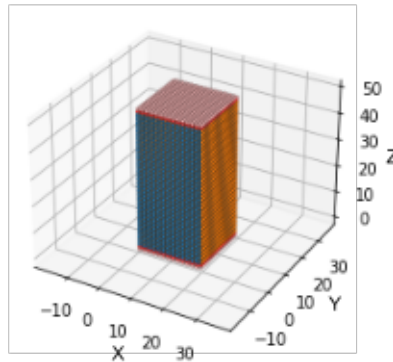


Figura 4.21: Nano bloque de algún semimetal topológico de nudo arbitrario en *kwant*. Las celdas con color rojo corresponden a las terminales con dimensiones  $30 \times 30 \times 2$ , con un color más claro se indica que en esa zona hay condiciones de periodicidad. Las dimensiones del canal son  $30 \times 30 \times 90$

#### Conductancia en Función del Parámetro $m$

En adelante mostramos los resultados para los semimetales topológicos  $t_{2,2}$ ,  $t_{3,2}$  y  $t_{4,2}$ , donde identificaremos las transiciones que tendrá al variar el parámetro  $m$  alrededor del valor crítico  $m = 3$ .

#### *CAPÍTULO 4. SEMIMETALES TOPOLÓGICOS DE NUDOS EN REDES CÚBICAS*61

En general, de los siguientes resultados es que en estos bloques no hay estados de borde, y a energía cero no hubo un valor para la conductancia. Para el valor  $m = 3.2$  tenemos brechas de energía.

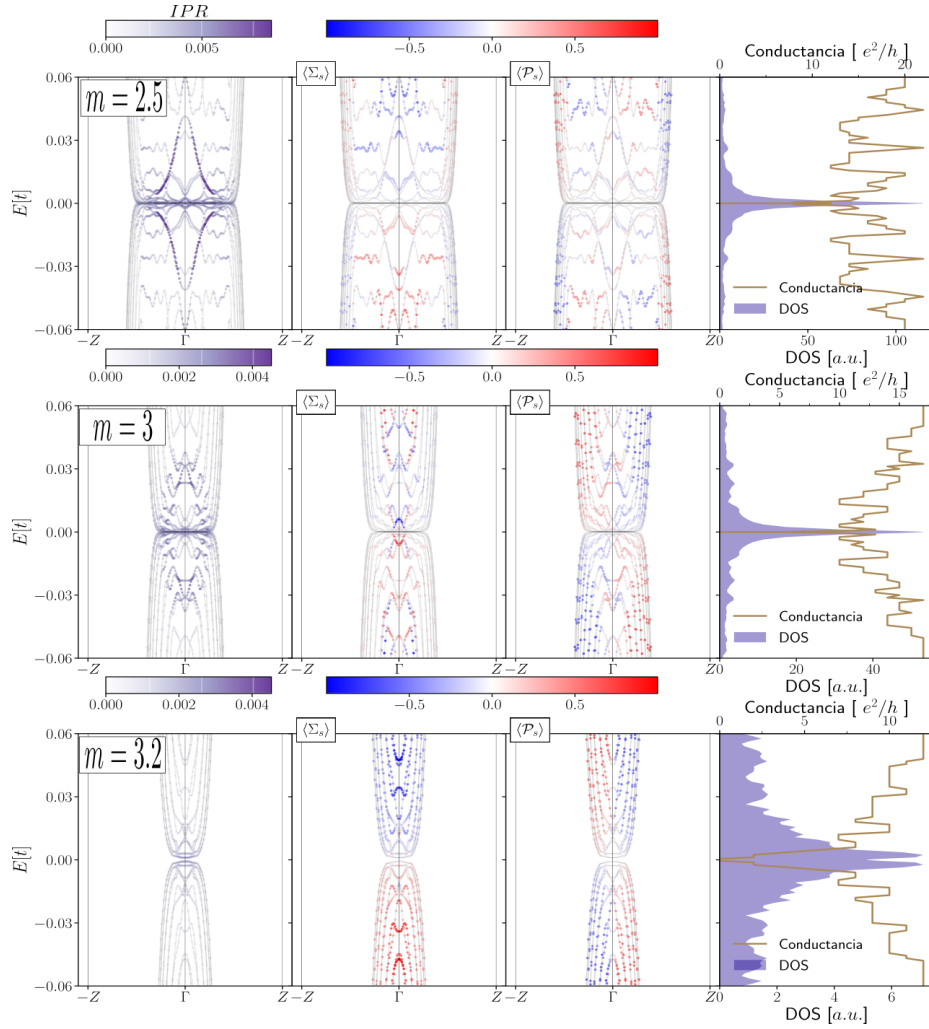


Figura 4.22: Conductancia en el semimetal topológico de enlace toroidal (2,2).

En la figura (4.22), tenemos que para  $m \leq 3$  existen estados mayormente localizados que tienen valor cero para los operadores  $\Sigma_S$  y  $\mathcal{P}_S$ . Hay estados con valores de  $\Sigma_S$  y  $\mathcal{P}_S$  igual a 1 y  $-1$  para  $m \geq 3$ . La conductancia es cero en la energía de Fermi, y esto es contrario a la densidad de estados, por lo que vemos que estos estados de banda plana no conducen. En energías alrededor de la energía de Fermi tenemos una conductancia proporcional a la densidad de estados, a partir de cierto valor de energía las bandas tienen máximos y mínimos por lo que la conductancia tiene fluctuaciones, pero vemos que para las energías propuestas  $E < 0.05$  la conductancia es cercana a la dada a las energías cercanas a la energía de Fermi, conforme  $m$  aumenta la conductancia disminuye y para  $m = 3.2$  hay una brecha de energía, esto está igual reflejada en la densidad de estados.

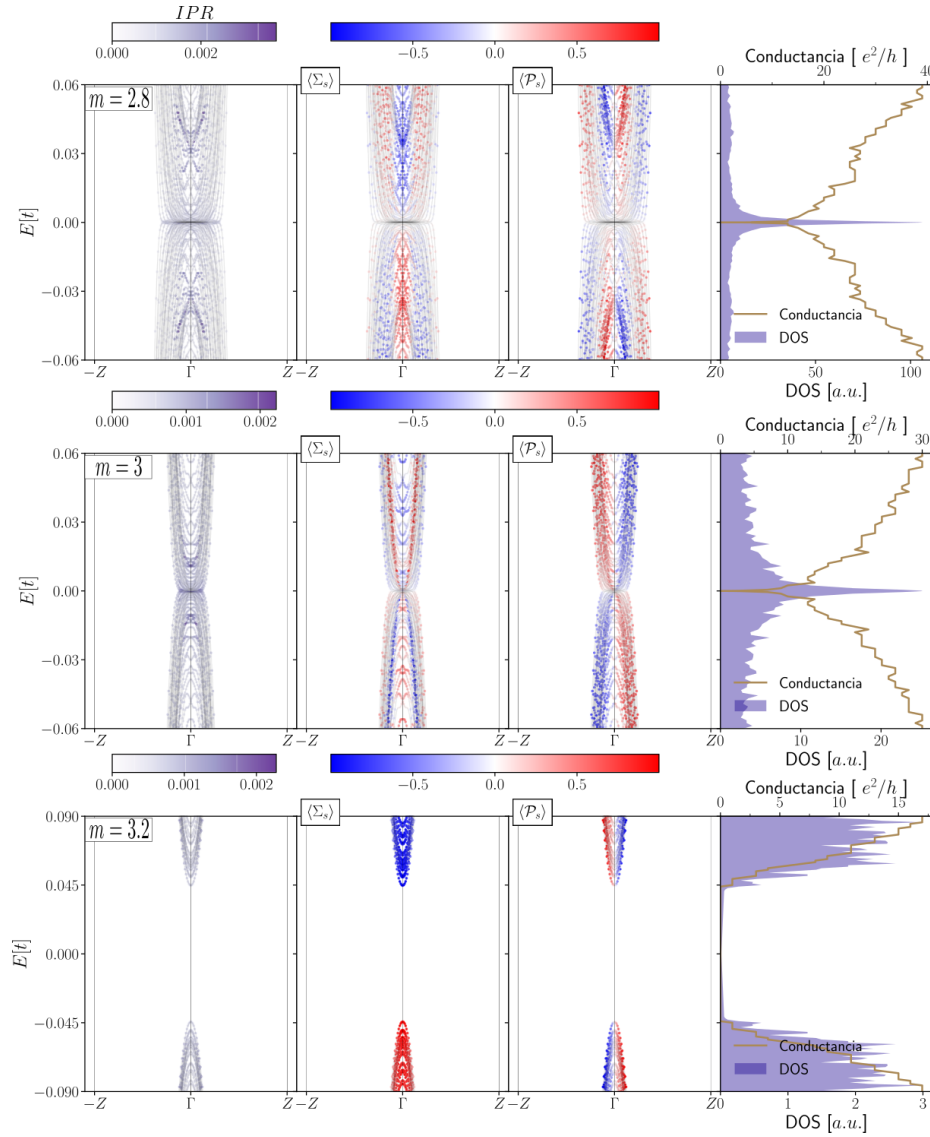


Figura 4.23: Conductancia en el semimetal topológico de nudo toroidal (3,2).

A diferencia de nudo  $T_{2,2}$ , en la figura (4.23) para energías  $|E| \leq 0.05$ , es mayor la conductancia, esto debido a la densidad de estados, además en sus bandas no hay estados son máximos y mínimos (puntos de Van Hove), por lo que la conductancia no fluctúa, esto se nota para  $m \leq 3$ . Seguimos teniendo estados de banda plana alrededor de la energía de Fermi que no conducen, como se esperaba de los cálculos para  $m = 3.2$  el material es un aislante y tenemos que la brecha de energía es alrededor de  $\Delta E \approx 0.09$ . En  $m \leq 3$  los valores de  $\Sigma_S$  y  $\mathcal{P}_S$  tienen valores distinto de cero en algunas bandas y en las bandas planas no si tienen valor cero, distinto a lo que ocurre con el modelo SSH.



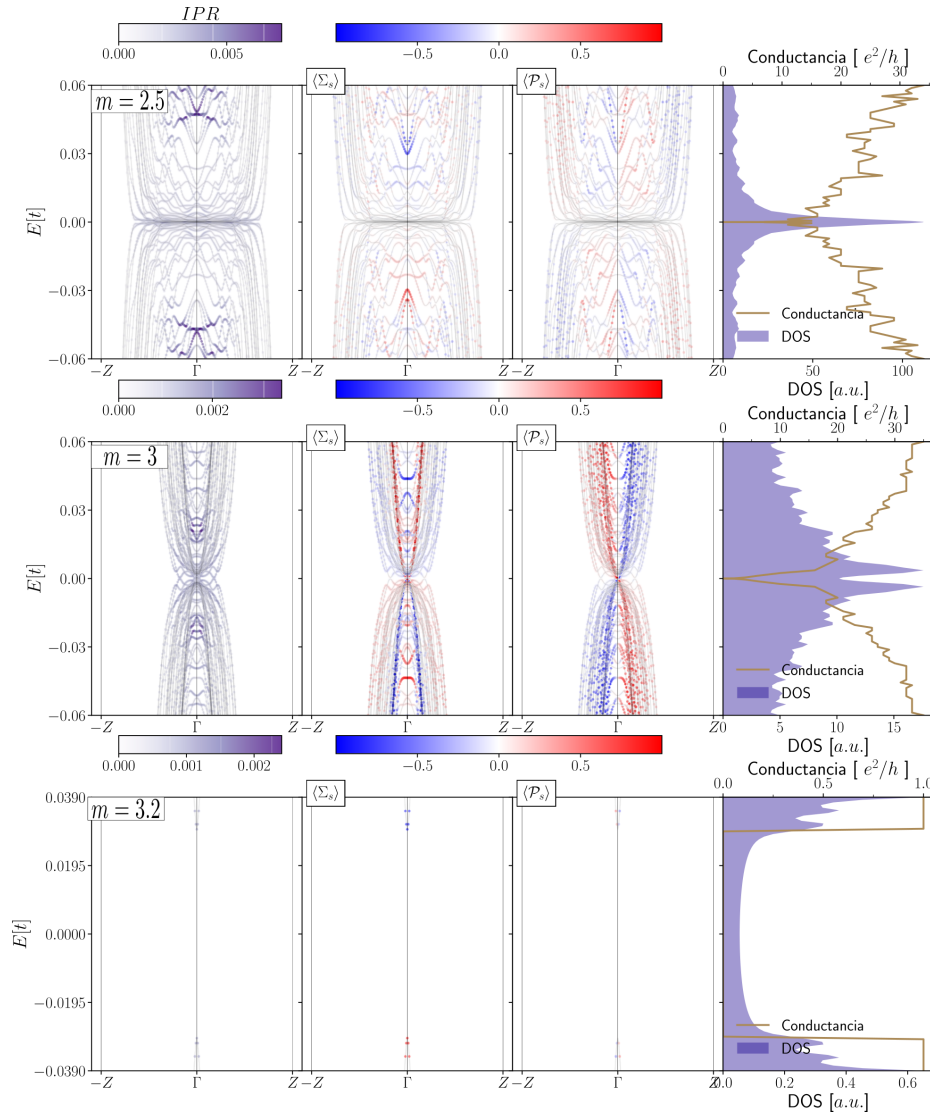


Figura 4.24: Conductancia en el semimetal topológico de enlace toroidal (4,2).

En la figura (4.24) notamos que para  $m = 3.2$  no corresponde con un semimetal como esperábamos de los cálculos anteriores del espectro de bandas en  $T_{4,2}$ . Con brecha de energía  $\Delta E \approx 0.7$ . Para  $m = 3.0$  también tenemos una brecha de energía en la densidad de estados. Idéntico al segundo renglón de la figura (4.24), el operador  $\Sigma_S$  tiene valor de 1 o  $-1$  sobre una línea cónica que se forma en el espectro de bandas. Un aspecto adicional es que el operador  $\mathcal{P}_S$  tiene valores cercanos a cero para  $m = 2.5$ .

**Conductancia al añadir término de masa  $m_z$  con  $m = 3$** 

Ahora realizamos la exploración de las transiciones dadas por el término de masa  $m_z$ . Primero exploramos la perturbación alrededor del punto crítico  $m = 3$ . Lo segundo es estudiar la perturbación del término de masa para el modelo de nudo trébol, que sabemos que sufre una transición en sus componentes hasta llegar a ser un nudo trivial.

En general tenemos que la densidad de estados y la conductancia son la misma para  $m_z$ , estos que:

$$DOS(E(m_z)) = DOS(E(-m_z)), \quad (4.127)$$

$$G(E(m_z)) = G(E(-m_z)). \quad (4.128)$$

Lo que esperábamos ya que  $E \propto \sqrt{\dots + m_z^2}$ .

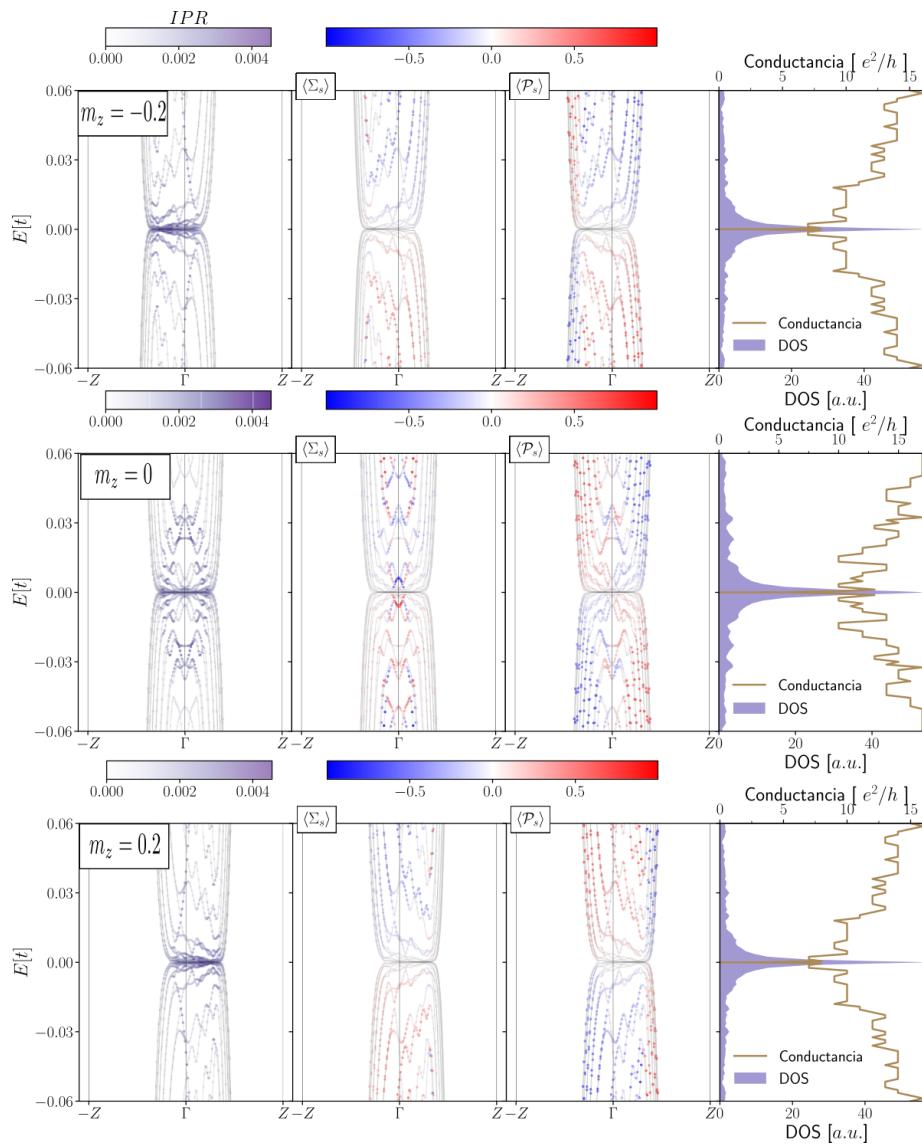


Figura 4.25: Conductancia en el semimetal topológico de enlace toroidal (2,2) con  $m = 3.0$ .

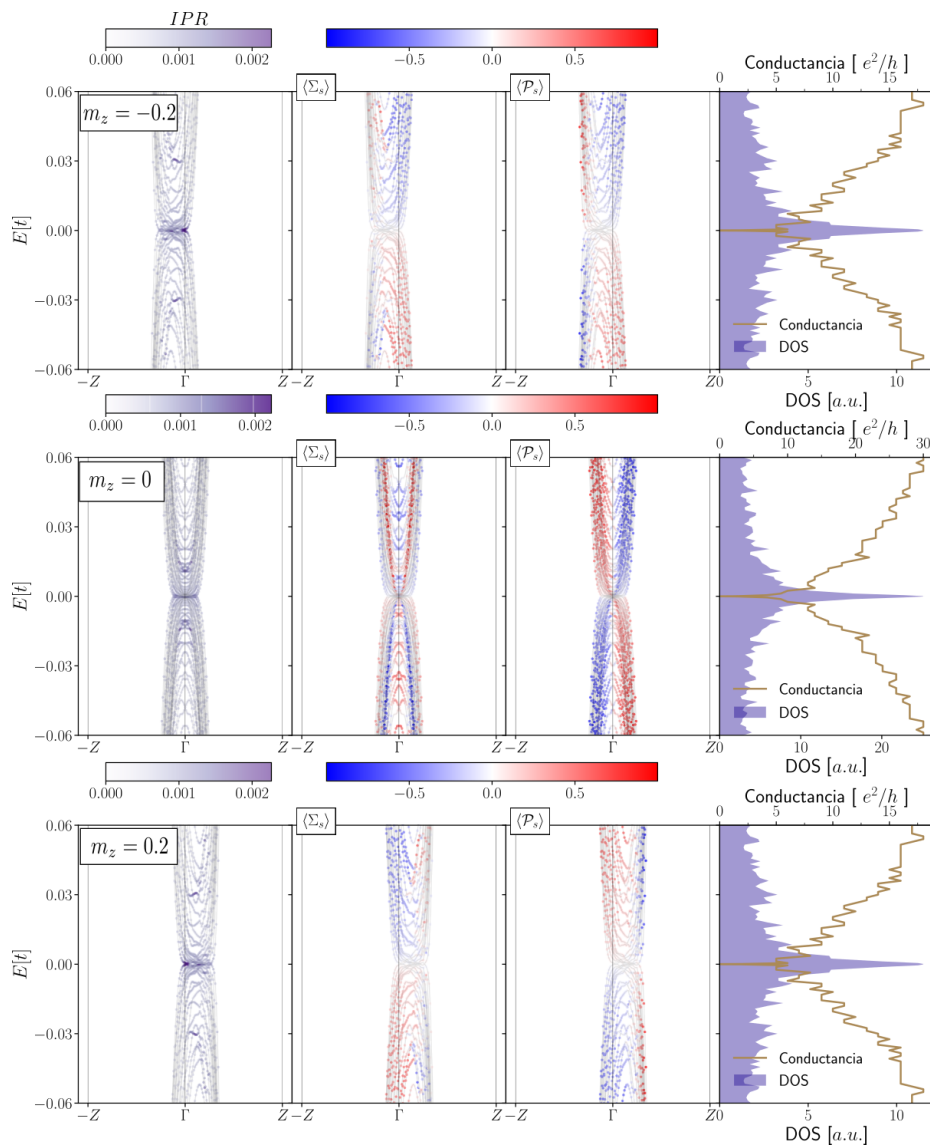


Figura 4.26: Conductancia en el semimetal topológico de nudo toroidal (3,2) con  $m = 3.0$ .



topología de sus bandas.

En la figura (4.28), tenemos que hay una inclinación en la banda plana alrededor de la energía de Fermi, esto provoca un ligero cambio en la conductancia, ya que igual tenemos que se reducen los estados que son bandas con mayor número de puntos de Van Hove. Adicionalmente del operador  $\Sigma_S$  hace destacar una banda en forma cónica alrededor del punto  $\Gamma$ , lo que observamos es que para el caso de nudo trivial  $m_z = 0.07$  del derecho del cono, el valor del operador  $\Sigma_S$  ya no es 1 o  $-1$ . Igual se puede hacer perceptible unos ligeros cambios en los estados mayormente localizados en el bulto. Observamos que para ningún valor se obtuvo una brecha de energía.

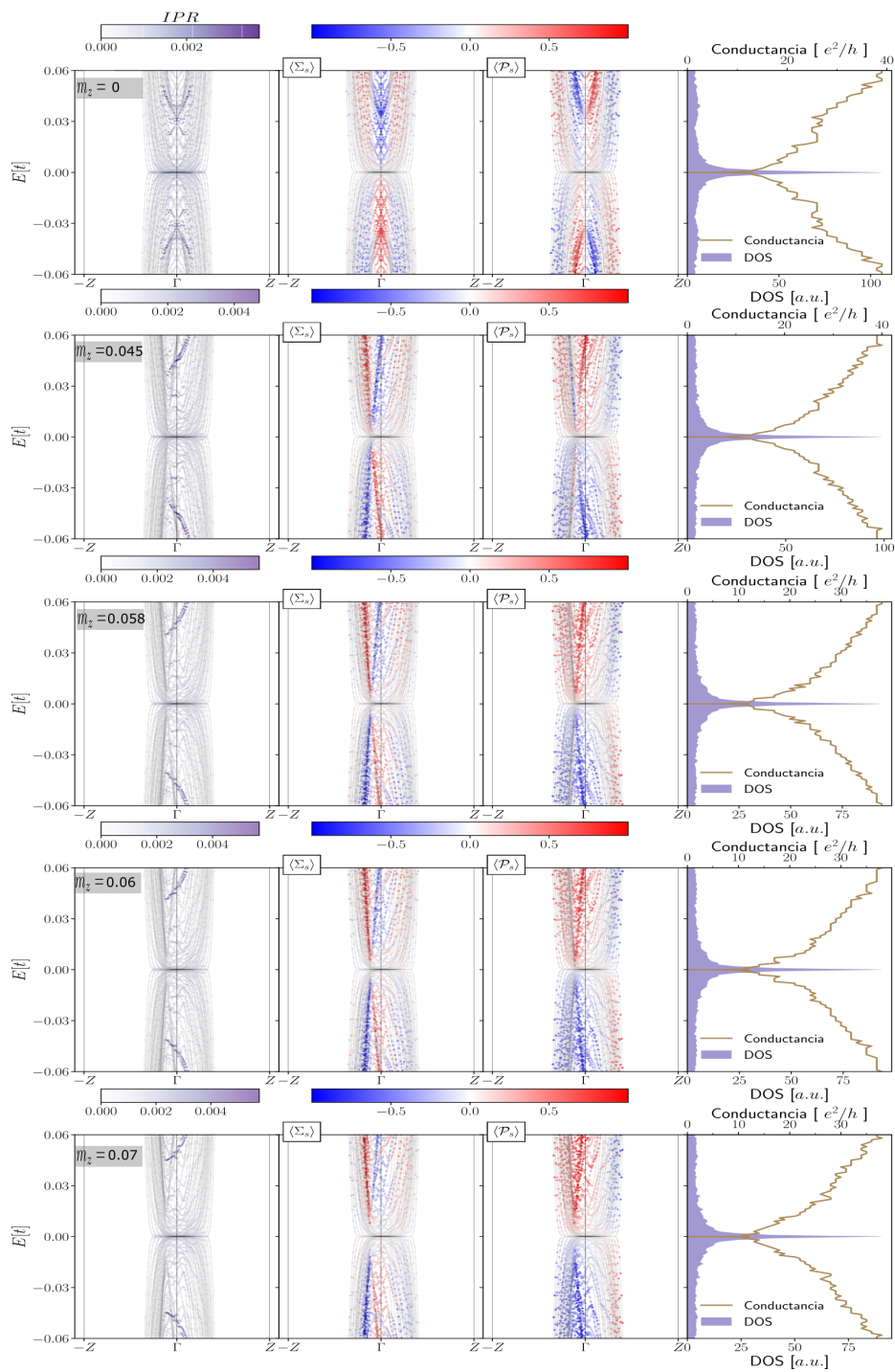


Figura 4.28: Conductancia en el semimetal topológico de nudo toroidal (3,2) con  $m = 2.8$ .

**Conductancia en el Enlace Toroidal (4,2) con  $m = 3.2$ , aumentando el tamaño de los canales**

Sabemos que para  $m = 3.2$  el semimetal topológico no debe corresponder a un aislante, por lo que para este caso propusimos un nuevo bloque con las dimensiones de canal  $40 \times 40 \times 120$  y la terminales de  $40 \times 40 \times 2$ .

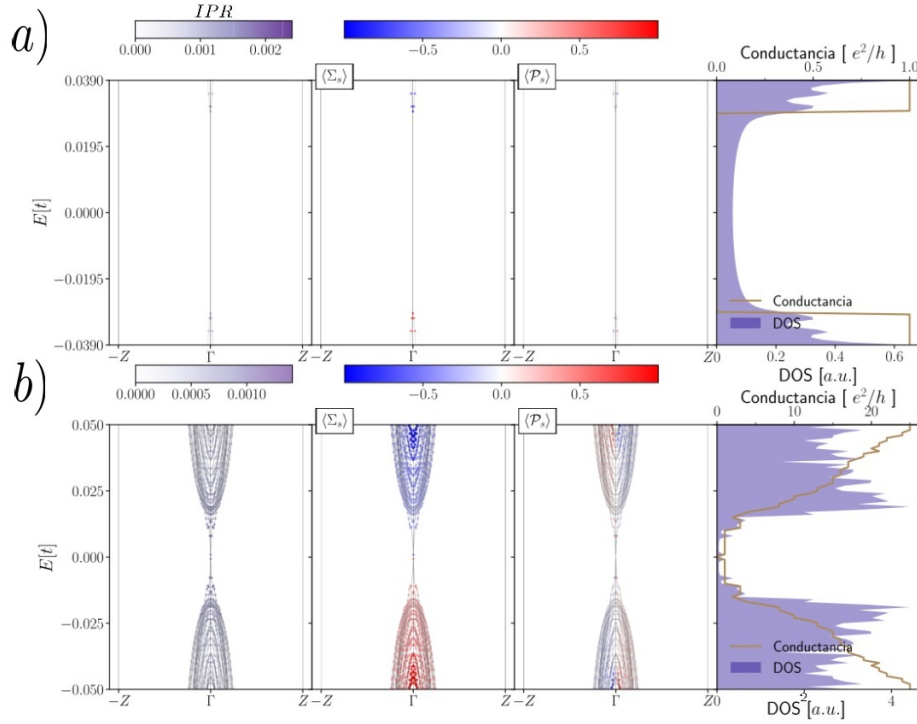


Figura 4.29: Conductancia en el semimetal topológico de enlace toroidal (4,2) con  $m = 3.2$ . a) Terminales de dimensiones  $30 \times 30 \times 2$ . b) Terminales de dimensión  $40 \times 40 \times 2$ .

En la figura (4.29), tenemos que la brecha de energía se redujo alrededor de  $\Delta E \approx 2 \times 10^{-5}$ , también notamos que el estado conductor que aparece solo corresponde a una banda y tiene una forma cónica alrededor del punto  $\Gamma$ . De igual forma tenemos un aumento en la conductancia debido a la densidad de estados, vemos que a diferencia de la fase aislante, los valores para sus operadores  $\Sigma_S$  y  $\mathcal{P}_S$  no son 1 o  $-1$  como el caso del modelo SSH o el nudo trébol con  $m = 3.2$ , justo porque esperamos que el modelo  $T_{4,2}$  no corresponda a un aislante en  $m = 3.2$ .

# 5 Fases Geométricas de los Semimetales Topológicos de Nudo

Anteriormente se discutió algunas de las propiedades de transporte electrónico para semimetales de nudos topológicos de dos bandas con modelos de red y su correspondencia con el *winding number*. Ahora retomando nuestro modelo continuo, realizamos el estudio de las fases geométricas de los nudos dados por la fase de Berry; y realizaremos una búsqueda de semimetales topológicos de nudos de cuatro bandas, estos modelos deben de tener degeneración para calcular su matriz de rotación de Berry.

## 5.1. Teoría de homotopía en los nudos toroidales.

Como sabemos la fase de Berry y la matriz de rotación de Berry están definidos por ciclos, o lo que es equivalente a lazos en el espacio de parámetros  $\lambda$ . Clasificar a los espacios a partir de lazos cerrados corresponde con la teoría de homotopía en topología [41]. La manera de entender esto es dividir el espacio en zonas donde no se pueden deformar los lazos en puntos. Tomemos como primer ejemplo el modelo SSH donde construimos un espacio  $d_X d_Y$  asociado con las componentes de las matrices de Pauli hermitianas, vimos que este espacio corresponde al plano con un agujero entonces la región de los lazos correspondía a los lazos que podían deformarse en a puntos y los lazos que no se podían deformar a un punto.

El segundo caso es para un espacio con un Toro contenido, en este caso habrán tres zonas de lazos, los lazos en el interior del toro que no se pueden deformar a un punto debido a la frontera del toro, la segunda zona correspondiente a los lazos que pasan por el centro del toro y no pueden ser deformados a un punto en el interior del toro debido a la frontera definido en planos perpendiculares al plano de los generadores de la primera zona y los lazos que se pueden deformar a puntos corresponderán con los lazos que no son concéntricos al interior del toro y los lazos que se deforman en puntos para el exterior del toro sin rodear el plano de los generadores de la zona dos, ver figura (5.1).

Entonces, es importante como se caracterizarán las fases dependiendo como sean los lazos alrededor de los nudos. En el caso de nudos y enlaces toroidales, mencionamos que existen lazos como está descrito en la figura (5.2), donde para cada lazo se definen regiones. Además, decimos que para el caso de los nudos solo habrá un lazo generador, esto corresponde con tomar un lazo muy pequeño que rodea al nudo sin tener alguna intersección con el nudo. Por lo que solo en caso de tener un enlace podemos proponer más de un generador.



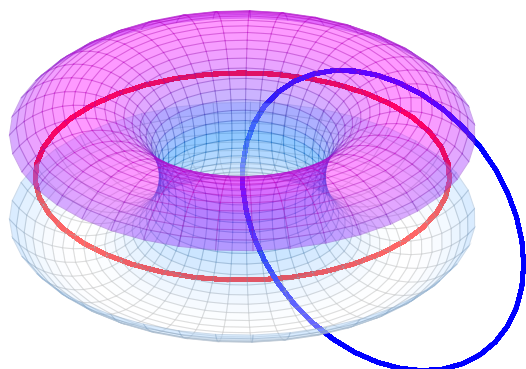
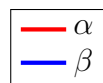


Figura 5.1: Generadores del grupo de homología del toro  $\mathbb{T}^2$ . Observamos que el generador  $\alpha$  no puede deformarse al centro del toro, por su parte el generador  $\beta$  son los lazos que pasan por el centro del toro y encierran en su interior lazos ortogonales a  $\alpha$ .

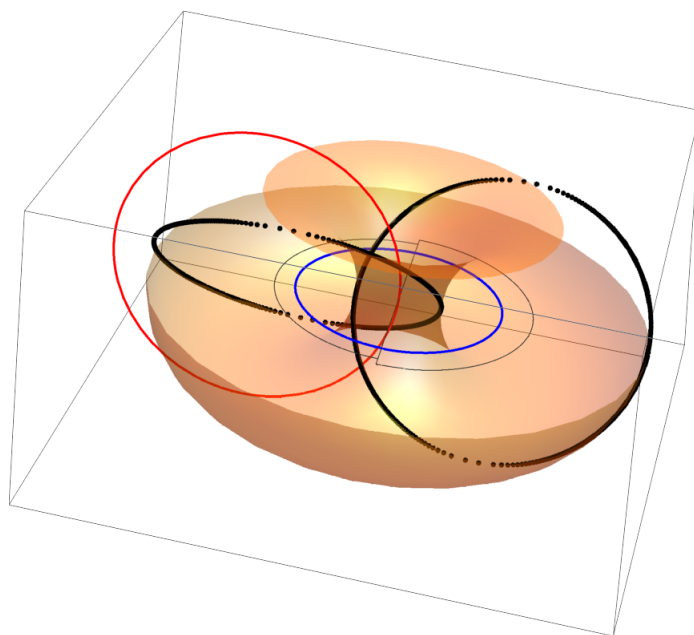


Figura 5.2: Generadores del grupo de homología para el enlace toroidal  $T_{2,2}$ , los puntos negros representa al enlace toroidal, adicionalmente a los generadores del grupo de homología del toro  $\mathbb{T}^2$ , (lazos rojo y azul) proponemos generadores que encierran una componente de los enlaces, representado por la línea negra difuminada.

### 5.1.1. Grupos de Cohomología de los Nudos Toroidales.

Recordemos que la homología de los nudos y enlaces será distinta debido al número de componentes de los enlaces, el cual corresponde al valor  $d = \text{mcd}(p, q)$ . La cohomología de los nudos es un campo en estudio activo [42, 43], y en nuestro trabajo está presente en el cálculo del operador Wilson loop para modelos continuos de cuatro bandas de semimetales topológicos de nudos. Los valores del Wilson loop a considerar serán en enfoque a los enlaces toroidales y corresponde a los lazos  $C_j$  que encierra a una componente  $j$  de un  $d$ -enlace toroidal representadas en la figura(5.3) . El cuadrado representa el conjunto  $(\phi_z, \phi_w \in \{0, 2\pi\} \times \{0, 2\pi\})$  que generan al nudo y las líneas de colores representa a un  $j$  componente de enlace.

Además, con este estudio del grupo de cohomología de los nudos para las matrices de rotación de Berry en los semimetales topológicos de nudos es similar al estudio de la holonomía en teoría de Chern-Simons en física de altas energías.

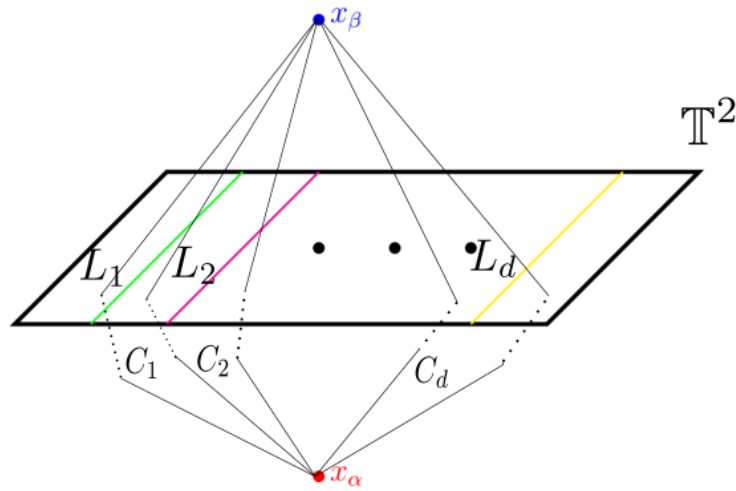


Figura 5.3: Cálculo de las integrales de camino en los nudos para definir su cohomología.

## 5.2. Fases de Berry en un Semimetal topológico de nudo de dos Bandas

Recordemos nuestro modelo continuo de dos bandas definido en la segunda sección del capítulo tres. Sobre ese modelo realizamos un estudio de la fase de Berry.

### 5.2.1. Fase de Berry para el hamiltoniano con simetría $\mathcal{PT}$

Definimos nuestro modelo general de hamiltoniano continuo para un semimetal topológico de nudo con simetría  $\mathcal{PT}$  y término de masa  $m_z$  como,

$$H(\vec{k}) = a(\vec{k})\sigma_x + (b(\vec{k}) - m_z)\sigma_z = \begin{pmatrix} b(\vec{k}) - m_z & a(\vec{k}) \\ a(\vec{k}) & -b(\vec{k}) - m_z \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

Una elección común de los eigenvectores unitarios asociados a este hamiltoniano son:

$$|\Psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2E(E - (b - m_z))}} \begin{pmatrix} b - m_z - E \\ a \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

$$|\Psi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2E(E + (b - m_z))}} \begin{pmatrix} b - m_z + E \\ a \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

ahora realizamos el cálculo de la conexión de Berry dada la ecuación (2.81),

$$\vec{A}_s = i \langle \Psi_s | \partial_{\vec{k}} | \Psi_s \rangle,$$

$$(\mathbf{A}_s)_j = i \langle \Psi_s | \partial_j | \Psi_s \rangle, \quad j = \{k_1, k_2, k_3\}, \quad b' = b - m_z, \quad (5.4)$$

$$= \frac{i}{\sqrt{2E(E + sb')}} \begin{pmatrix} b' + sE & a \end{pmatrix} \partial_j \frac{1}{\sqrt{2E(E + sb')}} \begin{pmatrix} b' + sE \\ a \end{pmatrix}, \quad N = \sqrt{2E(E + sb')}, \quad (5.5)$$

$$= \frac{i}{N} \begin{pmatrix} b' + sE & a \end{pmatrix} \left( \frac{1}{N} \begin{pmatrix} \partial_j(b' + sE) \\ \partial_j a \end{pmatrix} - \frac{\partial_j(E(E + sb'))}{N^3} \begin{pmatrix} b' + sE \\ a \end{pmatrix} \right), \quad (5.6)$$

$$= \frac{i}{N^4} \begin{pmatrix} b' + sE & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N^2 \partial_j(b' + sE) - (b' + sE) \partial_j(E(E + sb')) \\ N^2 \partial_j a - a \partial_j(E(E + sb')) \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

$$= \frac{i}{N^4} \begin{pmatrix} b' + sE & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(E + sb') \partial_j b' - b'(E + sb') \partial_j E \\ N^2 \partial_j a - a(E + sb') \partial_j E - aE \partial_j(E + sb') \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

por otro lado  $E = \sqrt{a^2 + b'^2}$ , luego,

$$\partial_j E = \partial_j \sqrt{a^2 + b'^2} = \frac{1}{2\sqrt{a^2 + b'^2}} (2a \partial_j a + 2b' \partial_j b'), \quad (5.9)$$

$$= \frac{1}{E} (a \partial_j a + b' \partial_j b'). \quad (5.10)$$

$$(\mathbf{A}_s)_j = i \langle \Psi_s | \partial_j | \Psi_s \rangle \quad (5.11)$$

$$= \frac{i}{N^4} \begin{pmatrix} b' + sE & a \end{pmatrix} \frac{1}{E} \times \begin{pmatrix} E^2(E + sb')\partial_j b' - b'(E + sb')(a\partial_j a + b'\partial_j b') \\ EN^2\partial_j a - a(E + sb')(a\partial_j a + b'\partial_j b') - aE(a\partial_j a + b'\partial_j b') - saE^2\partial_j b' \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

$$= \frac{i}{EN^4} \left( sE^2(E + sb')^2\partial_j b' - sb'(E + sb')^2(a\partial_j a + b'\partial_j b') + 2aE^2(E + sb')\partial_j a - a^2(E + sb')(a\partial_j a + b'\partial_j b') - a^2E(a\partial_j a + b'\partial_j b') - sa^2E^2\partial_j b' \right), \quad (5.13)$$

$$= \frac{i}{EN^4} \left[ \left( 2a(a^2 + b'^2)(E + sb') - sab'(E + sb')^2 - a^3(2E + sb') \right) \partial_j a + (s(a^2 + b'^2)(E + sb')^2 - sb'^2(E + sb')^2 - b'a^2(2E + sb') - saE^2) \partial_j b' \right], \quad (5.14)$$

$$= \frac{i}{EN^4} \left[ \left( 2ab'^2(E + sb') + a^3sb' - sab'(a^2 + 2b'^2 + 2sEb') \right) \partial_j a + \left( sa^2(E^2 + b'^2 + 2sEb') - b'a^2(2E + sb') - saE^2 \right) \partial_j b' \right], \quad (5.15)$$

$$= 0. \quad (5.16)$$

Los siguientes eigenvectores no unitarios asociado a este hamiltoniano:

$$|\Psi_{-}\rangle = \begin{pmatrix} \frac{b-m_z-E}{a} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\Psi_{+}\rangle = \begin{pmatrix} \frac{b-m_z+E}{a} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

tienen como conexión de Berry:

$$(\mathbf{A}_s)_j = i \langle \Psi_s | \partial_j | \Psi_s \rangle, \quad (5.18)$$

$$= i \begin{pmatrix} \frac{b'+sE}{a} & 1 \end{pmatrix} \partial_j \begin{pmatrix} \frac{b'+sE}{a} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad b' = b - m_z, \quad (5.19)$$

$$= i \begin{pmatrix} \frac{b'+sE}{a} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{a\partial_j(b'+sE) - (b'+sE)\partial_j a}{a^2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.20)$$

$$= \frac{i(b' + sE)}{a^3} \left( \frac{1}{E} \right) \left( E(a\partial_j b' - (b' + sE)\partial_j a) + sa(a\partial_j a + b'\partial_j b') \right) \quad (5.21)$$

$$= \frac{i(b' + sE)}{a^3 E} \left( (sa^2 - Eb' - sE^2)\partial_j a + (E + sb')a\partial_j b' \right), \quad sa^2 - sE^2 = -sb'^2, \quad (5.22)$$

$$= \frac{is(b' + sE)^2}{a^3 E} \left( a\partial_j b' - b'\partial_j a \right), \quad E + sb' = s(b' + sE). \quad (5.23)$$

Sin embargo, se trabajará con la siguiente elección de eigenvectores:

$$|\Psi_{-}\rangle = \begin{pmatrix} a \\ -E - b + m_z \end{pmatrix}, \quad |\Psi_{+}\rangle = \begin{pmatrix} a \\ E - b + m_z \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

la conexión de Berry:

$$(\mathbf{A}_s)_j = i \langle \Psi_s | \partial_j | \Psi_s \rangle, \quad (5.25)$$

$$= i \begin{pmatrix} a & sE - b' \end{pmatrix} \partial_j \begin{pmatrix} a \\ sE - b' \end{pmatrix}, \quad (5.26)$$

$$= i \begin{pmatrix} a & sE - b' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_j a \\ s \partial_j E - \partial_j b' \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

$$= i \left( a \partial_j a - (sE - b') \partial_j b' + s(sE - b') \partial_j E \right), \quad (5.28)$$

$$= \frac{i}{E} \left( aE \partial_j a - (sE^2 - b'E) \partial_j b' + (E - sb')(a \partial_j a + b' \partial_j b') \right), \quad (5.29)$$

$$= \frac{i}{E} \left( (aE + aE - sab') \partial_j a + (Eb' - sb'^2 - sE^2 + b'E) \partial_j b' \right), \quad (5.30)$$

$$= \frac{i}{E} \left( (2E - sb') a \partial_j a + (2Eb' - sa^2 - 2sb'^2) \partial_j b' \right). \quad (5.31)$$

La fase de Berry está definida a partir de la ecuación (2.80) como,

$$\Gamma(\gamma) = \oint_{\gamma} \vec{A} \cdot d\vec{l}$$

Tomemos un camino en el plano  $K_X K_Y$ , en coordenadas esféricas para los nudos toroidales  $T_{p,2}$  que está definido como,

$$f(z, w) = \left( \frac{k \sin \frac{\pi}{2}}{N} \right)^p e^{ip\phi} + \left( \frac{k \cos \frac{\pi}{2}}{N} + \frac{i}{N} \left( M - \frac{1}{2} k^2 \right) \right)^2 = \left( \frac{k^p}{N^p} e^{ip\phi} \right) - \left( \frac{(M - \frac{1}{2} k^2)}{N} \right)^2$$

las funciones asociados a nuestro hamiltoniano continuo son,

$$a(\vec{k}) = \left( \frac{k}{N} \right)^p \cos p\phi - \left( \frac{(M - \frac{1}{2} k^2)}{N} \right)^2, \quad b(\vec{k}) = \left( \frac{k}{N} \right)^p \sin p\phi,$$

realizamos el cálculo de los nodos en estas funciones, primero consideramos,

$$b(\vec{k}) = \left( \frac{k}{N} \right)^p \sin p\phi = 0 \quad \rightarrow \sin p\phi = 0 \quad \rightarrow p\phi = M\pi, \quad M \in \mathbb{Z}.$$

Dada nuestra integral de línea nos tomamos el círculo,

$$|k| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \sqrt{2M},$$

y la parametrización de nuestro camino está dado como:

$$\gamma(\phi) = \sqrt{2M}\phi, \quad \phi \in [0, 2\pi] \quad y \quad d\gamma = \sqrt{2M}d\phi,$$

sobre este camino nuestras funciones son,

$$a(\vec{k}) = \cos p\phi, \quad b(\vec{k}) = \sin p\phi,$$

además,  $E = \sqrt{a^2 + b^2} = 1$ , entonces la conexión para la banda de valencia ( $s = -$ ) está definida como,

$$(\mathbf{A}_-)_\phi = i \left( (2 + \sin p\phi) \cos p\phi \left( \frac{-p \sin p\phi}{\sqrt{2m}} \right) + (2 \sin p\phi + \cos^2 p\phi + 2 \sin^2 p\phi) \frac{p \cos p\phi}{\sqrt{2m}} \right) \quad (5.32)$$

$$(\mathbf{A}_-)_\phi = \frac{ip}{\sqrt{2m}} \left( -\sin 2p\phi - \sin^2 p\phi \cos p\phi + \sin 2p\phi + \cos p\phi + \sin^2 p\phi \cos p\phi \right) \quad (5.33)$$

$$\Gamma(\gamma) = ip \int_0^{2\pi} \cos p\phi d\phi = i(\sin 2p\pi - \sin 0) = i \sin 2p\pi = 0, \quad p \in \mathbb{Z}^+$$

### 5.2.2. Hamiltoniano con distinta Simetría

Ahora proponemos el hamiltoniano continuo para un semimetal topológico de nudo como [12],

$$H(\vec{k}) = a(\vec{k})\sigma_x + b(\vec{k})\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & a(\vec{k}) - ib(k) \\ a(\vec{k}) + ib(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.34)$$

Una elección común de los eigenvectores unitarios asociados a este hamiltoniano son:

$$|\Psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2E}} \begin{pmatrix} E \\ a + ib \end{pmatrix}, \quad |\Psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2E}} \begin{pmatrix} -E \\ a + ib \end{pmatrix} \quad (5.35)$$

ahora realizamos el cálculo de la conexión de berry,

$$\vec{A}_s = i \langle \Psi_s | \partial_{\vec{k}} | \Psi_s \rangle,$$

$$(\mathbf{A}_s)_j = i \langle \Psi_s | \partial_j | \Psi_s \rangle, \quad j = \{k_1, k_2, k_3\} \quad (5.36)$$

$$= \frac{i}{\sqrt{2E}} \begin{pmatrix} -sE & a - ib \end{pmatrix} \partial_j \frac{1}{\sqrt{2E}} \begin{pmatrix} -sE \\ a + ib \end{pmatrix}, \quad (5.37)$$

$$= \frac{i}{N} \begin{pmatrix} -sE & a - ib \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{N} (\partial_j a + i\partial_j b) - \frac{(a+ib)}{\sqrt{2E^3}} \partial_j E \end{pmatrix}, \quad N = \sqrt{2E}, \quad (5.38)$$

$$= \frac{ia + b}{2E^2} \left( \partial_j a + i\partial_j b - \frac{1}{E^2} (a + ib)(a\partial_j a + b\partial_j b) \right) \quad (5.39)$$

$$= \frac{1}{2E^2} (i(a\partial_j a + b\partial_j b) + b\partial_j a - a\partial_j b) - \frac{iE^2}{2E^4} (a\partial_j a + b\partial_j b) \quad (5.40)$$

$$= \frac{1}{2E^2} \left( 2i(a\partial_j a + b\partial_j b) + b\partial_j a - a\partial_j b \right) \quad (5.41)$$

Ahora supongamos que tomamos nuestras mismas funciones,

$$a(\vec{k}) = \sqrt{2m} \cos p\phi, \quad b(\vec{k}) = \sqrt{2m} \sin p\phi, \quad E = \sqrt{2m}$$

entonces,

$$A_s\phi = \frac{1}{2E^2r} \left( 2i(a\partial_\phi a + b\partial_\phi b) + b\partial_\phi a - a\partial_\phi b \right) \quad (5.42)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2m}^3} \left( 2i[2m \cos p\phi(-\sin p\phi) + 2m \sin p\phi \cos p\phi] + 2m(-p \sin^2 p\phi - p \cos^2 p\phi) \right) \quad (5.43)$$

$$= \frac{-p}{2\sqrt{2m}} \quad (5.44)$$

por lo que si queremos realizar el cálculo de la fase de Berry,

$$\Gamma(\gamma) = -p \int_0^{2\pi} \frac{\sqrt{2m}}{2\sqrt{2m}} d\phi = -p\pi, \quad p \in \mathbb{Z}^+$$

fase de Berry en el generador  $\beta$ , en el cual proponemos las siguientes coordenadas;

$$k_x = k'_x, \quad ky = \sqrt{2(m - \rho \cos \beta) - \rho^2 \sin^2 \beta}, \quad k_z = \rho \sin \beta \quad M - \frac{1}{2}k^2 = \rho \cos \beta,$$

de modo que nuestra función queda como,

$$f(z, \omega) = \left( kx + i\sqrt{2(m - \rho \cos \beta) - \rho^2 \sin^2 \beta - k_x^2} \right)^p + \left( \rho \sin \beta + i\rho \cos \beta \right)^q,$$

de manera análoga se propone  $kx = 0$  y

$$2(m - \rho \cos \beta) - \rho^2 \sin^2 \beta = 0 \quad \beta = 0,$$

lo que nos lleva a proponer  $m = \rho = 1$ , si ahora nos tomamos  $\beta = \pi$ , entonces,

$$k_y^2 = 2(m - \rho \cos \beta) - \rho^2 \sin^2 \beta = 2(2)$$

lo siguiente es realizar la rotación,  $\beta = \theta + \frac{\pi}{2}$ , esto nos lleva a:

$$\sin \beta = \sin\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) = \cos \theta \quad y \quad \cos \beta = \cos\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right) = -\sin \theta.$$

por último tenemos que nuestras funciones  $a(\vec{k})$  y  $b(\vec{k})$  están dadas como:

$$a = \left( 2(1 + \sin \theta) - \cos^2 \theta \right)^{\frac{p}{2}} + \cos q\theta = \left( 1 + \sin \theta \right)^p + \cos q\theta, \quad b = -\sin q\theta$$

el valor de la energía  $E^2$  es,

$$E^2 = a^2 + b^2 = (1 + \sin \theta)^{2p} + 2 \cos q\theta (1 + \sin \theta)^p + 1.$$

Sin embargo, dado estas transformaciones la integral no converge, debido a que se pudo haber cometido un error al evaluar la función en el camino o en la transformación de los operadores diferenciales.

### 5.3. Modelo de Cuatro Bandas para Semimetales Topológicos de Nudo

Los sistemas con hamiltonianos de bandas degeneradas y conexiones planas presentan una nueva invariante, el operador Wilson loop. Para realizar este estudio primero realizamos una búsqueda de hamiltonianos con dos componentes reales en analogía de nuestras funciones  $a(\vec{k})$  y  $b(\vec{k})$  de los modelos de dos bandas de semimetales topológicos de nudos, queda abierta la búsqueda de hamiltoniano con cuatro componentes reales.

#### 5.3.1. Hamiltonianos de semimetales topológicos de nudos con energías degeneradas

Nuestra primera propuesta de Hamiltoniano es tomar,

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = a_1(\vec{k})(\sigma_1 \otimes \tau_0) + b(\vec{k})(\sigma_2 \otimes \tau_2)$$

Consideremos el siguiente cálculo:

$$\mathcal{H}^2 = \left( a_1(\sigma_1 \otimes \tau_0) + b(\sigma_2 \otimes \tau_2) \right) \left( a_1(\sigma_1 \otimes \tau_0) + b(\sigma_2 \otimes \tau_2) \right) \quad (5.45)$$

$$= a_1^2(\sigma_1 \otimes \tau_0)^2 + b^2(\sigma_2 \otimes \tau_2)^2 + a_1b(\sigma_1 \otimes \tau_0)(\sigma_2 \otimes \tau_2) + a_1b(\sigma_2 \otimes \tau_2)(\sigma_1 \otimes \tau_0) \quad (5.46)$$

$$= a_1^2(\sigma_1^2 \otimes \tau_0^2) + b^2(\sigma_2^2 \otimes \tau_2^2) + a_1b \left( (\sigma_1\sigma_2 \otimes \tau_0\tau_2) + (\sigma_2\sigma_1 \otimes \tau_2\tau_0) \right) \quad \tau_0\tau_2 = \tau_2\tau_0 = \tau_2, \quad (5.47)$$

$$= a_1^2(\sigma_0 \otimes \tau_0) + b^2(\sigma_0 \otimes \tau_0) + a_1b \left( (\sigma_1\sigma_2 \otimes \tau_2) - (\sigma_1\sigma_2 \otimes \tau_2) \right), \quad \sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1, \quad (5.48)$$

$$= (a_1^2 + b^2)\mathbb{I}. \quad (5.49)$$

Por lo que tenemos los valores propios degenerados, que asociamos a las energías de nuestro hamiltoniano:

$$E = \pm \sqrt{a_1^2 + b^2}$$

El resultado del cálculo de los eigenvectores asociados a nuestro Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  son:

$$E_- \begin{cases} |\Psi_1\rangle = \left( \frac{b}{\sqrt{2E}}, -\frac{a_1}{\sqrt{2E}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \\ |\Psi_2\rangle = \left( -\frac{a_1}{\sqrt{2E}}, -\frac{b}{\sqrt{2E}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right) \end{cases} \quad E_+ \begin{cases} |\Psi_3\rangle = \left( -\frac{b}{\sqrt{2E}}, \frac{a_1}{\sqrt{2E}}, 0, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \\ |\Psi_4\rangle = \left( \frac{a_1}{\sqrt{2E}}, \frac{b}{\sqrt{2E}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right) \end{cases}$$

Consideremos dos hamiltonianos de la forma:

$$H_{12}(\vec{k}) = a_1(\vec{k})\sigma_1 + b(\vec{k})\sigma_2 \quad (5.50)$$

$$H_{13}(\vec{k}) = a_1(\vec{k})\sigma_1 + b(\vec{k})\sigma_3 \quad (5.51)$$



Ahora proponemos hamiltonianos de  $4 \times 4$ , de las siguientes formas:

$$\mathcal{H}_{12,2}(\vec{k}) = H_{XY}(\vec{k}) \otimes \tau_0 + \sigma_2 \otimes H_{XY}(\vec{k}) \quad (5.52)$$

$$\mathcal{H}_{12,3}(\vec{k}) = H_{XY}(\vec{k}) \otimes \tau_0 + \sigma_3 \otimes H_{XY}(\vec{k}) \quad (5.53)$$

$$\mathcal{H}_{13,2}(\vec{k}) = H_{XZ}(\vec{k}) \otimes \tau_0 + \sigma_2 \otimes H_{XZ}(\vec{k}) \quad (5.54)$$

$$\mathcal{H}_{13,3}(\vec{k}) = H_{XZ}(\vec{k}) \otimes \tau_0 + \sigma_3 \otimes H_{XZ}(\vec{k}) \quad (5.55)$$

realizando el siguiente cálculo:

$$\mathcal{H}_{ij}^2 = \left[ \left( a_1 \sigma_1 + b \sigma_i \right) \otimes \tau_0 + \sigma_j \otimes \left( a_1 \tau_1 + b \tau_i \right) \right]^2, \quad (5.56)$$

$$\begin{aligned} &= a_1^2 (\sigma_1 \otimes \tau_0)^2 + a_1^2 (\sigma_j \otimes \tau_1)^2 + b^2 (\sigma_i \otimes \tau_0)^2 + b^2 (\sigma_j \otimes \tau_i)^2 \\ &\quad + a_1^2 \left( (\sigma_1 \otimes \tau_0)(\sigma_j \otimes \tau_1) + (\sigma_j \otimes \tau_1)(\sigma_1 \otimes \tau_0) \right) + b^2 \left( (\sigma_i \otimes \tau_0)(\sigma_j \otimes \tau_i) + (\sigma_j \otimes \tau_i)(\sigma_i \otimes \tau_0) \right) \\ &\quad + a_1 b \left( (\sigma_1 \otimes \tau_0)(\sigma_i \otimes \tau_0) + (\sigma_i \otimes \tau_0)(\sigma_1 \otimes \tau_0) + (\sigma_j \otimes \tau_i)(\sigma_j \otimes \tau_1) + (\sigma_j \otimes \tau_1)(\sigma_j \otimes \tau_i) \right), \end{aligned} \quad (5.57)$$

$$\begin{aligned} &= a_1^2 \mathbb{I} + a_1^2 \mathbb{I} + b^2 \mathbb{I} + b^2 \mathbb{I} + a_1^2 \left( (\sigma_1 \sigma_j \otimes \tau_0 \tau_1) + (\sigma_j \sigma_1 \otimes \tau_1 \tau_0) \right) + b^2 \left( (\sigma_i \sigma_j \otimes \tau_0 \tau_i) + (\sigma_j \sigma_i \otimes \tau_i \tau_0) \right) \\ &\quad + a_1 b \left( (\sigma_1 \sigma_i \otimes \tau_0 \tau_0) + (\sigma_i \sigma_1 \otimes \tau_0 \tau_0) + (\sigma_j \sigma_j \otimes \tau_i \tau_1) + (\sigma_j \sigma_j \otimes \tau_1 \tau_i) \right), \quad i \neq j, \end{aligned} \quad (5.58)$$

$$\begin{aligned} &= 2(a_1^2 + b^2) \mathbb{I} + a_1^2 \left( (\sigma_1 \sigma_j \otimes \tau_0) - (\sigma_1 \sigma_j \otimes \tau_1) \right) + b^2 \left( (\sigma_i \sigma_j \otimes \tau_i) - (\sigma_i \sigma_j \otimes \tau_i) \right) \\ &\quad + a_1 b \left( (\sigma_1 \sigma_i \otimes \tau_0) - (\sigma_1 \sigma_i \otimes \tau_0) + (\sigma_0 \otimes \tau_i \tau_1) - (\sigma_0 \otimes \tau_i \tau_1) \right), \end{aligned} \quad (5.59)$$

$$= 2(a_1^2 + b^2) \mathbb{I}. \quad (5.60)$$

El caso para eigen-energías degeneradas se da para  $\mathcal{H}_{XY,Z}$  y  $\mathcal{H}_{XZ,Y}$ , los valores correspondientes son:

$$E = \pm \sqrt{2(a_1^2 + b^2)}$$

Ahora definimos los eigenvectores asociados a nuestro Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{XY,Z}$ :

$$E_- \begin{cases} |\Psi_1\rangle = \left( \frac{2(ib-a_1)^2}{E^2}, \frac{2(ib-a_1)}{E}, 0, 1 \right) \\ |\Psi_2\rangle = \left( \frac{2(ib-a_1)}{E}, 1, 1, 0 \right) \end{cases} \quad E_+ \begin{cases} |\Psi_3\rangle = \left( \frac{2(ib-a_1)^2}{E^2}, \frac{2(ib-a_1)}{E}, 0, 1 \right) \\ |\Psi_4\rangle = \left( -\frac{2(ib-a_1)}{E}, 1, 1, 0 \right) \end{cases}$$

Los eigenvectores asociados a nuestro hamiltoniano  $\mathcal{H}_{XZ,Y}$ :

$$E_- \begin{cases} |\Psi_1\rangle = \left( \frac{ia_1}{E-b}, -\frac{a_1+ib}{E-b}, 0, 1 \right) \\ |\Psi_2\rangle = \left( -\frac{ib-a_1}{E-b}, \frac{ia_1}{E-b}, 1, 0 \right) \end{cases} \quad E_+ \begin{cases} |\Psi_3\rangle = \left( \frac{ia_1}{b-E}, \frac{a_1+ib}{E-b}, 0, 1 \right) \\ |\Psi_4\rangle = \left( \frac{2(a_1-ib)}{E}, \frac{ia_1}{b-E}, 1, 0 \right) \end{cases}$$

### 5.3.2. Cálculo del Vector de Conexión de la Matriz de Rotación de Berry y de la Curvatura de Berry

Para sistemas que están degenerados en las bandas de valencia ( $E_-$ ), definimos la matriz de conexión de Berry para la banda de valencia:

$$\mathbf{A}_{\alpha\beta}^- \equiv \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | \beta \rangle, \quad \langle \alpha | = \{ \langle \Psi_1 |, \langle \Psi_2 | \}, \quad | \beta \rangle = \{ | \Psi_1 \rangle, | \Psi_2 \rangle \}. \quad (5.61)$$

El cálculo para la componente (1, 2) es:

$$\vec{\mathbf{A}}_{12} = i \begin{pmatrix} \frac{b}{\sqrt{2E}} & -\frac{a_1}{\sqrt{2E}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2E}} \end{pmatrix} (\partial_{k_x} \hat{x} + \partial_{k_y} \hat{y} + \partial_{k_z} \hat{z}) \begin{pmatrix} -\frac{a_1}{\sqrt{2E}}, -\frac{b}{\sqrt{2E}}, \frac{1}{\sqrt{2E}}, 0 \end{pmatrix}^T \quad (5.62)$$

$$= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \frac{b}{E} & -\frac{a_1}{E} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\partial_{k_x} \left( \frac{a_1}{E} \right) \hat{x} - \partial_{k_y} \left( \frac{a_1}{E} \right) \hat{y} - \partial_{k_z} \left( \frac{a_1}{E} \right) \hat{z} \\ -\partial_{k_x} \left( \frac{b}{E} \right) \hat{x} - \partial_{k_y} \left( \frac{b}{E} \right) \hat{y} - \partial_{k_z} \left( \frac{b}{E} \right) \hat{z} \\ \partial_{k_x} \left( \frac{1}{E} \right) \hat{x} + \partial_{k_y} \left( \frac{1}{E} \right) \hat{y} + \partial_{k_z} \left( \frac{1}{E} \right) \hat{z} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.63)$$

$$= \frac{i}{2} \left[ \begin{aligned} & \left( -\frac{b(E\partial_{k_x} a_1 - a_1\partial_{k_x} E)}{E^3} + \frac{a_1(E\partial_{k_x} b - b\partial_{k_x} E)}{E^3} \right) \hat{x} + \\ & \left( -\frac{b(E\partial_{k_y} a_1 - a_1\partial_{k_y} E)}{E^3} + \frac{a_1(E\partial_{k_y} b - b\partial_{k_y} E)}{E^3} \right) \hat{y} \\ & + \left( -\frac{b(E\partial_{k_z} a_1 - a_1\partial_{k_z} E)}{E^3} + \frac{a_1(E\partial_{k_z} b - b\partial_{k_z} E)}{E^3} \right) \hat{z} \end{aligned} \right] \quad (5.64)$$

$$= \frac{i}{2E^2} \left[ -\left( b\partial_{k_x} a_1 - a_1\partial_{k_x} b \right) \hat{x} - \left( b\partial_{k_y} a_1 - a_1\partial_{k_y} b \right) \hat{y} - \left( b\partial_{k_z} a_1 - a_1\partial_{k_z} b \right) \hat{z} \right] \quad (5.65)$$

en términos de componentes podemos escribirlo como:

$$(\mathbf{A}_{12}^-)_j = \frac{-1}{2E^2} \left( b\partial_j a - a\partial_j b \right) = \frac{1}{2E^2} \left( a\partial_j b - b\partial_j a \right)$$

realizando un cálculo similar llegamos a:

$$\vec{\mathbf{A}}_{21} = -\vec{\mathbf{A}}_{12}$$

Lo siguiente son los términos en la diagonal, realizamos el cálculo de la primera componente:

$$\vec{\mathbf{A}}_{11} = \langle \Psi_1 | \partial_{\vec{k}} | \Psi_1 \rangle = \begin{pmatrix} \frac{b}{E} & -\frac{a}{E} & 1 & 0 \end{pmatrix} (\partial_{k_x} \hat{x} + \partial_{k_y} \hat{y} + \partial_{k_z} \hat{z}) \begin{pmatrix} \frac{b}{E} \\ -\frac{a}{E} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T \quad (5.66)$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{b}{E} & -\frac{a}{E} & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_{k_x} \left(\frac{b}{E}\right) \hat{x} + \partial_{k_y} \left(\frac{b}{E}\right) \hat{y} + \partial_{k_z} \left(\frac{b}{E}\right) \hat{z} \\ -\partial_{k_x} \left(\frac{a}{E}\right) \hat{x} - \partial_{k_y} \left(\frac{a}{E}\right) \hat{y} - \partial_{k_z} \left(\frac{a}{E}\right) \hat{z} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.67)$$

$$= \left[ \left( \frac{b(E\partial_{k_x} b - b\partial_{k_x} E)}{E^3} + \frac{a(E\partial_{k_x} a - a\partial_{k_x} E)}{E^3} \right) \hat{x} + \left( \frac{b(E\partial_{k_y} b - b\partial_{k_y} E)}{E^3} + \frac{a(E\partial_{k_y} a - a\partial_{k_y} E)}{E^3} \right) \hat{y} \right] \quad (5.68)$$

$$+ \left[ \left( \frac{b(E\partial_{k_z} b - b\partial_{k_z} E)}{E^3} + \frac{a(E\partial_{k_z} a - a\partial_{k_z} E)}{E^3} \right) \hat{z} \right] \quad (5.69)$$

$$= \left[ \left( \frac{b\partial_{k_x} b}{E^2} + \frac{a\partial_{k_x} a}{E^2} - \frac{a^2 + b^2}{E^3} (\partial_{k_x} E) \right) \hat{x} + \left( \frac{b\partial_{k_y} b}{E^2} + \frac{a\partial_{k_y} a}{E^2} - \frac{a^2 + b^2}{E^3} (\partial_{k_y} E) \right) \hat{y} \right] \quad (5.70)$$

$$+ \left[ \left( \frac{b\partial_{k_z} b}{E^2} + \frac{a\partial_{k_z} a}{E^2} - \frac{a^2 + b^2}{E^3} (\partial_{k_z} E) \right) \hat{z} \right] \quad (5.71)$$

$$= \left[ \left( \frac{b\partial_{k_x} b}{E^2} + \frac{a\partial_{k_x} a}{E^2} - \frac{1}{E} \left( \frac{a\partial_{k_x} a + b\partial_{k_x} b}{E} \right) \right) \hat{x} + \left( \frac{b\partial_{k_y} b}{E^2} + \frac{a\partial_{k_y} a}{E^2} - \frac{1}{E} \left( \frac{a\partial_{k_y} a + b\partial_{k_y} b}{E} \right) \right) \hat{y} \right] \quad (5.72)$$

$$+ \left[ \left( \frac{b\partial_{k_z} b}{E^2} + \frac{a\partial_{k_z} a}{E^2} - \frac{1}{E} \left( \frac{a\partial_{k_z} a + b\partial_{k_z} b}{E} \right) \right) \hat{z} \right] \quad (5.73)$$

$$= 0 \quad (5.74)$$

De manera análoga se obtiene:

$$\vec{\mathbf{A}}_{22} = 0$$

Por lo tanto, se tiene que:

$$(\mathcal{A}^-)_j = \begin{pmatrix} 0 & -i^2(\mathbf{A}_{12}^-)_j \\ i^2(\mathbf{A}_{12}^-)_j & 0 \end{pmatrix} = i(\mathbf{A}_{12}^-)_j \sigma_2 = \frac{i}{2E^2} (a\partial_j b - b\partial_j a) \sigma_2$$

A veces es conveniente utilizar coordenadas esféricas, para ello expresamos el vector componente de la matriz de conexión como,

$$\vec{\mathbf{A}}_{12} = \frac{1}{2E^2} \left[ \left( a\partial_k b - b\partial_k a \right) \hat{r} + \left( \frac{a}{k} \partial_\theta b - \frac{b}{k} \partial_\theta a \right) \hat{\theta} + \left( \frac{a}{k \sin(\theta)} \partial_\phi b - \frac{b}{k \sin(\theta)} \partial_\phi a \right) \hat{\phi} \right]. \quad (5.75)$$

Ahora realizamos el cálculo de la curvatura,

$$\vec{\mathcal{F}} = \nabla_{\mathbf{k}} \times \vec{\mathcal{A}}^- - i\vec{\mathcal{A}}^- \times \vec{\mathcal{A}}^-, \quad (5.76)$$

realizando el cálculo:

$$\mathcal{F}_n = \epsilon_{lmn} \partial_l \mathbf{A}_m - i\epsilon_{lmn} \mathbf{A}_l \mathbf{A}_m \quad (5.77)$$

$$= \epsilon_{lmn} \partial_l \left[ \frac{1}{2E^2} \left( a\partial_m b - b\partial_m a \right) \sigma_2 \right] + i\epsilon_{lmn} \frac{1}{4E^4} \left( a\partial_l b - b\partial_l a \right) \left( a\partial_m b - b\partial_m a \right) \sigma_2 \sigma_2 \quad (5.78)$$

$$= \epsilon_{lmn} \left[ \frac{E^2 \partial_l (a\partial_m b - b\partial_m a) - (a\partial_m b - b\partial_m a) \partial_l E^2}{E^4} \right] \frac{\sigma_2}{2} + \frac{i}{4E^4} \epsilon_{lmn} \left( a\partial_l b - b\partial_l a \right) \left( a\partial_m b - b\partial_m a \right) \mathbb{I} \quad (5.79)$$

$$= (\nabla \times \vec{\mathbf{A}}_{12}) \sigma_2. \quad (5.80)$$

El segundo termino de la ecuación es cero porque es el producto de un tensor antisimétrico por un tensor simétrico, continuando con el cálculo:

$$\mathcal{F}_n = \epsilon_{lmn} \left[ \frac{E^2 (\partial_l a \partial_m b + a \partial_l \partial_m b - \partial_l b \partial_m a - b \partial_l \partial_m a) - (a \partial_m b - b \partial_m a) \partial_l E^2}{E^4} \right] \frac{\sigma_2}{2} \quad (5.81)$$

$$= \epsilon_{lmn} \left[ \frac{(a^2 + b^2) (\partial_l a \partial_m b + a \partial_l \partial_m b - \partial_l b \partial_j a - b \partial_l \partial_j a) - (a_1 \partial_j b - b \partial_j a) \partial_l (a^2 + b^2)}{E^4} \right] \frac{\sigma_2}{2} \quad (5.82)$$

$$= -\epsilon_{lmn} \left[ \frac{(2a \partial_l a + 2b \partial_l b) (a \partial_m b - b \partial_m a) - (a^2 + b^2) (\partial_l a \partial_m b + a \partial_l \partial_m b - \partial_l b \partial_m a - b \partial_l \partial_m a)}{E^4} \right] \frac{\sigma_2}{2} \quad (5.83)$$

$$= -\epsilon_{lmn} \left[ \frac{2a^2 \partial_l a \partial_m b - 2ab \partial_i a_1 \partial_j a_1 + 2a_1 b \partial_i b \partial_j b - 2b^2 \partial_i b \partial_j a_1 - (a_1^2 + b^2) (\partial_i a_1 \partial_j b - \partial_i b \partial_j a_1)}{E^4} \right] \quad (5.84)$$

$$- \frac{(a_1^2 + b^2) (a_1 \partial_i \partial_j b - b \partial_i \partial_j a_1)}{E^4} \left] \frac{\sigma_2}{2} \quad (5.85)$$

$$= -\epsilon_{lmn} \left[ \frac{(2a_1^2 - a_1^2 - b^2) \partial_i a_1 \partial_j b + 2a_1 b (\partial_i b \partial_j b - \partial_i a_1 \partial_j a_1) - (2b^2 - b^2 - a_1^2) \partial_i b \partial_j a_1}{E^4} \right] \quad (5.86)$$

$$- \frac{(a_1^2 + b^2) (a_1 \partial_i \partial_j b - b \partial_i \partial_j a_1)}{E^4} \left] \frac{\sigma_2}{2} \quad (5.87)$$

$$= -\epsilon_{lmn} \left[ \frac{(a_1^2 - b^2) (\partial_i a_1 \partial_j b + \partial_i b \partial_j a_1) + 2a_1 b (\partial_i b \partial_j b - \partial_i a_1 \partial_j a_1)}{E^4} \right] \quad (5.88)$$

$$- \frac{(a_1^2 + b^2) (a_1 \partial_i \partial_j b - b \partial_i \partial_j a_1)}{E^4} \left] \frac{\sigma_2}{2} \quad (5.89)$$

Nuestro último resultado nos da el producto de un tensor antisimétrico por un tensor simétrico, lo cual nos da como resultado un cero, por lo tanto,

$$\vec{\mathcal{F}} = 0$$

entonces, decimos que nuestro hamiltoniano tiene asociada una conexión plana.

### 5.3.3. Cálculo Analítico del Wilson loop Alrededor de Lazos Circulares

A continuación realizamos el cálculo del operador Wilson loop para nuestro modelo de semimetal topológico de nudos de cuatro bandas con conexión plana.

$$\mathcal{W}_\gamma^A = \text{Tr} \left\{ P \exp \left( \oint_\gamma \vec{A}(\vec{k}) \cdot d\vec{l} \right) \right\}$$

donde  $P$  es el operador de ordenamiento de camino

### 5.3.4. Generador $\alpha$

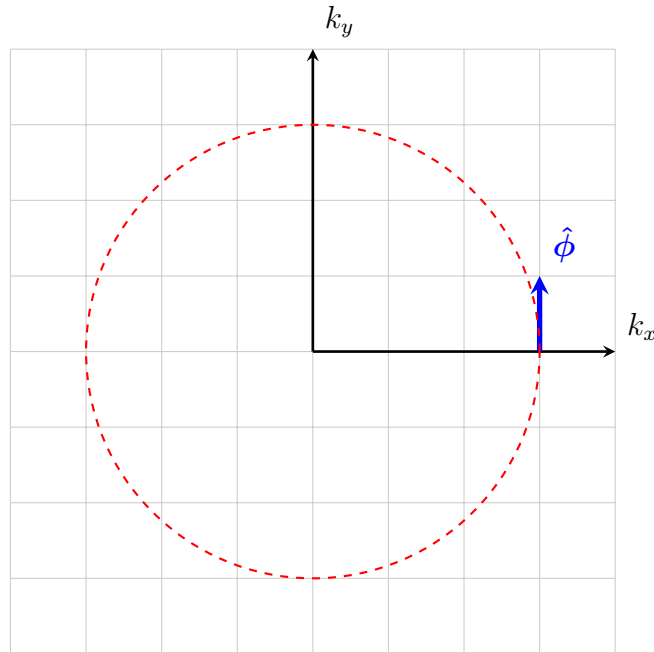


Figura 5.4: Lazo circular alrededor del origen en el plano  $K_X K_Y$ , generador  $\alpha$  de la homología de toro.

Para realizar este cálculo consideramos la simetría radial, por lo que nos conviene expresar a las funciones de los nudos toroidales en coordenadas esféricas, esto es que consi-

deramos:

$$f(z, w) = \frac{1}{N^p} \left( k \sin \theta \cos \phi + ik \sin \theta \sin \phi \right)^p + \frac{1}{N^q} \left( k \cos \theta + i(M - \frac{1}{2}k^2) \right)^q \quad (5.90)$$

$$= (k \sin \theta)^p e^{ip\phi} + \frac{1}{N^q} \left( k \cos \theta + i(M - \frac{1}{2}k^2) \right)^q, \quad (5.91)$$

la conexión está dado por la ecuación entonces, tenemos que,

$$\oint_{\gamma} \vec{\mathcal{A}}(\vec{k}) \cdot d\vec{l} = \int_0^{2\pi} (\mathcal{A}(\vec{k}))_{\phi} r d\phi.$$

para simplificar nuestro cálculo vamos a considerar que estamos sobre el plano  $K_X K_Y$ , lo que implica  $\theta = \frac{\pi}{2}$ , además tomamos el caso sencillo de  $q = 2$ . Finalmente, obtenemos,

$$f(z, w) = \left( \frac{k \sin \frac{\pi}{2}}{N} \right)^p e^{ip\phi} + \left( \frac{k \cos \frac{\pi}{2}}{N} + \frac{i}{N} (M - \frac{1}{2}k^2) \right)^2 = \left( \frac{k^p}{N^p} e^{ip\phi} \right) - \left( \frac{(M - \frac{1}{2}k^2)}{N} \right)^2$$

entonces, nuestras funciones asociados a los semimetales topológicos de nudo de la forma  $(p, 2)$  son:

$$a(\vec{k}) = \left( \frac{k}{N} \right)^p \cos p\phi - \left( \frac{(M - \frac{1}{2}k^2)}{N} \right)^2, \quad b(\vec{k}) = \left( \frac{k}{N} \right)^p \sin p\phi$$

realizamos el cálculo de los nodos en estas funciones, primero consideramos,

$$b(\vec{k}) = \left( \frac{k}{N} \right)^p \sin p\phi = 0 \quad \rightarrow \sin p\phi = 0 \quad \rightarrow p\phi = m\pi, m \in \mathbb{Z}.$$

Sustituyendo este resultado en la segunda condición,

$$a(\vec{k}) = \left( \frac{k}{N} \right)^p \cos p\phi - \left( \frac{(M - \frac{1}{2}k^2)}{N} \right)^2 \quad (5.92)$$

$$= \left( \frac{k}{N} \right)^p \cos m\pi - \left( \frac{(M - \frac{1}{2}k^2)}{N} \right)^2 \quad (5.93)$$

$$= \pm \left( \frac{k}{N} \right)^p - \left( \frac{(M - \frac{1}{2}k^2)}{N} \right)^2 \quad (5.94)$$

$$= 0 \quad \rightarrow \left( \frac{(M - \frac{1}{2}k^2)}{N} \right)^2 = \pm \left( \frac{k}{N} \right)^p \geq 0 \quad \rightarrow p\phi = 2m\pi, m \in \mathbb{Z}. \quad (5.95)$$

por lo que nuestra ecuación general de los nodos está dado por,

$$\left( \frac{(M - \frac{1}{2}k^2)}{N} \right)^2 - \left( \frac{k}{N} \right)^p = \left( \frac{(\frac{1}{2}k^2 - m)}{N} \right)^2 - \left( \frac{k}{N} \right)^p = 0,$$

la cual podemos expresar como:

$$N \left( \frac{k}{N} \right)^{\frac{p}{2}} + \frac{1}{2}k^2 - m = 0$$

$$N \left( \frac{k}{N} \right)^{\frac{p}{2}} - \frac{1}{2}k^2 + m = 0$$

y de acuerdo a la ecuación ,  $N = \sqrt{k^2 + M^2 - mk^2 + \frac{1}{4}k^4}$ . Para realizar los cálculos del Wilson loop los lazos no deben tocar estos puntos, a partir de la ecuación (5.75)

$$(\mathcal{A}(\vec{k}))_\phi = \frac{1}{2E^2} \left( \frac{a(\vec{k})}{k \sin \theta} \partial_\phi b(\vec{k}) - \frac{b(\vec{k})}{k \sin \theta} \partial_\phi a(\vec{k}) \right) i\sigma_2, \quad (5.96)$$

$$= \frac{1}{2k \sin \theta [a^2(\vec{k}) + b^2(\vec{k})]} \left[ \left( \left( \frac{k}{N} \right)^p \cos p\phi - \frac{M^2 - mk^2 + 0.25k^4}{N^2} \right) \left( \left( \frac{k}{N} \right)^p p \cos p\phi \right) \right. \quad (5.97)$$

$$\left. - \left( \left( \frac{k}{N} \right)^p \sin p\phi \right) \left( -p \left( \frac{k}{N} \right)^p \sin p\phi \right) \right] i\sigma_2, \quad (5.98)$$

$$= \frac{1}{2k \sin \theta [a^2(\vec{k}) + b^2(\vec{k})]} \left[ p \left( \frac{k}{N} \right)^{2p} - p \cos p\phi \left( \frac{k}{N} \right)^p \left( \frac{M - \frac{1}{2}k^2}{N} \right)^2 \right] i\sigma_2, \quad (5.99)$$

Por otro lado el valor de la energía es:

$$E^2(\vec{k}) = a^2(\vec{k}) + b^2(\vec{k}), \quad (5.100)$$

$$= \left[ \left( \frac{k}{N} \right)^p \cos p\phi - \left( \frac{M - \frac{1}{2}k^2}{N} \right)^2 \right]^2 + \left( \frac{k}{N} \right)^{2p} \sin^2 p\phi, \quad (5.101)$$

$$= \left( \frac{k}{N} \right)^{2p} + 2 \cos p\phi \left( \frac{k}{N} \right)^p \left( \frac{m - \frac{1}{2}k^2}{N} \right)^2 + \left( \frac{m - \frac{1}{2}k^2}{N} \right)^4, \quad (5.102)$$

ahora proponemos el siguiente lazo,

$$w = \frac{k \cos \theta}{N} + i \frac{(M - \frac{1}{2}k^2)}{N} = 0$$

lo cual nos lleva a los siguientes resultados:

$$k_z = 0 \quad y \quad M - \frac{1}{2}k^2 = 0, \quad r = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \sqrt{2m}$$

sustituimos estos resultados,

$$N = \sqrt{k^2 + (M - \frac{1}{2}k^2)^2} = \sqrt{2m}$$

$$E^2 = a^2 + b^2 = \left( \frac{k}{N} \right)^{2p} = 1$$

$$(\mathcal{A}(\vec{k}))_\phi = \frac{1}{2(\sqrt{2m})} \left( p \right) i\sigma_2$$

El cálculo del Wilson loop está dado como:

$$\mathcal{W}^A_\gamma = Tr \left\{ P \exp \left( \int_0^{2\pi} (\mathcal{A}(\vec{k}))_\phi r d\phi \right) \right\}$$

$$P \exp \left( \int_0^{2\pi} (\mathcal{A}(\vec{k}))_\phi r d\phi \right) = \mathbb{I} + \int_0^{2\pi} (\mathcal{A}(\vec{k}))_\phi r d\phi + \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\phi (\mathcal{A}(\vec{k}))_\phi (\mathcal{A}(\vec{k}))_{\phi'} r^2 d\phi' + \dots \quad (5.103)$$

$$= \mathbb{I} + \int_0^{2\pi} \frac{pi\sigma_2}{2\sqrt{2m}} \sqrt{2m} d\phi + \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\phi \left( \frac{pi\sigma_2}{2\sqrt{2m}} \right) \left( \frac{pi\sigma_2}{2\sqrt{2m}} \right) 2md\phi' + \dots \quad (5.104)$$

$$= \mathbb{I} + p\pi i\sigma_2 - \int_0^{2\pi} \left( \frac{p}{2} \right)^2 \phi d\phi \mathbb{I} + \dots \quad (5.105)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos p\pi & \sin p\pi \\ -\sin p\pi & \cos p\pi \end{pmatrix}, \quad (5.106)$$

entonces, el cálculo del Wilson loop nos da,

$$\mathcal{W}^A_\gamma = 2 \cos(p\pi) \quad (5.107)$$

En el desarrollo de este cálculos se observa que no se obtiene una fase no abeliana, por lo que no es necesario al realizar el ordenamiento de camino observamos que no es necesario evaluar las integrales. Es necesario a posterior realizar la búsqueda de semimetales topológicos de nudos con cuatro componentes reales con conexión plana.

### 5.3.5. Generadores del camino $\beta$ .

De manera análoga al cálculo del modelo de dos bandas, no se haya un cálculo analítico para la fase de Berry en el generador  $\beta$ . Por lo que es necesario realizar un cálculo aproximado para las integrales de camino.

## 5.4. Cálculo numérico de las fases geométricas alrededor de lazos rectangulares.

Como se observo de los resultados anteriores, evaluar analíticamente las fases geométricas en los generadores, resulta en un trabajo de obtener coordenadas normales, realizar cambios en los operadores diferenciales y los diferenciales de área, volumen y línea para las respectivas integrales. Por lo que podemos trabajar con aproximaciones de las integrales, al definir caminos que simplifiquen las integrales de camino, esto corresponde a construir lazos rectangulares como está en la figura (5.5).



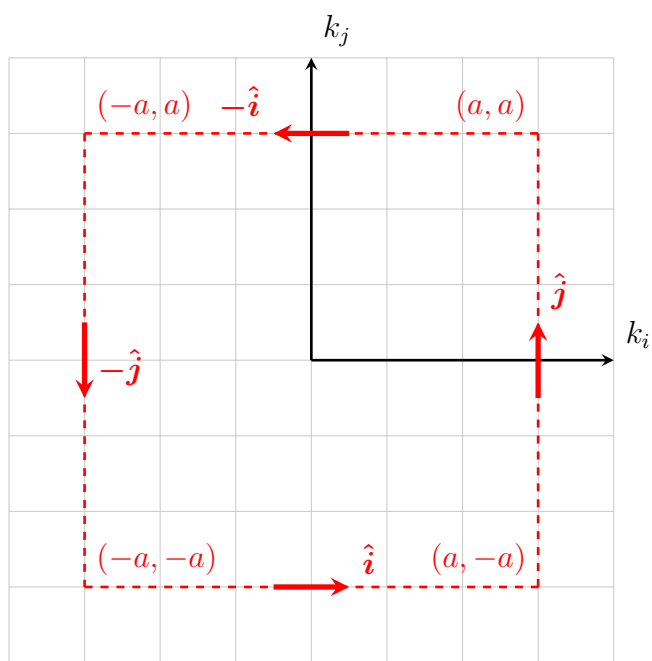


Figura 5.5: Lazos para la realización numérica del cálculo de las fases geométricas.

## 6 Conclusiones

En el trabajo realizamos un procedimiento sistemático para identificar las implicaciones que tiene la topología en la teoría de bandas; sin embargo, no son claras las implicaciones en las propiedades electrónicas. En nuestro trabajo pudimos realizar esta caracterización al construir dos modelos de redes cúbicas, y utilizando el modelo de menor interacción a primeros vecinos con simetría  $\mathcal{PT}$  y simetría de electrón hueco  $\Xi$ . En esta red identificamos como está asociado la forma de un nudo y enlace toroidal al índice (*winding number*) y parámetro de mapeo  $m$ ; en nuestra elección de los parámetros  $m$  propuestos preservamos la forma de los nudos en el modelo de red y el modelo continuo para la energía de Fermi, para caracterizar la topología de los nudos con sus propiedades electrónicas. Donde definimos semimetales topológicos con una energía de Fermi que se define con un nudo o enlace para el valor de índice 1 y  $m \approx 3$ ; y cuando el valor de  $m = 3$  el índice no está definido, esto se traduce a que los nudos o enlaces se destruyen debido a la existencia de un punto de intersección que impide identificar cada uno de los lazos (circuitos) que los componen; en el valor de índice cero tanto los nudos como los enlaces pasan a ser sólo enlaces disjuntos por lo que el material corresponde a semimetales topológico de línea nodal; existe un valor crítico de  $m = m_c$  para el cual pasan a ser semimetal de nodos topológicos debido a la deformación de los lazos en puntos. Finalmente a valores mayores  $m > m_c$  es un aislante normal debido a que tenemos brechas de energía. A excepción del modelo de nudo trébol en  $m = 2.5$  que es un enlace, siendo contrario a lo que esperábamos, por eso tomamos la caracterización del nudo trébol de  $m \in [2.8, 3.2]$ .

Otras transiciones que sufría los nudos era dado por el término de masa  $m_z$ , que en los modelos de nudos y enlaces encontramos que se deformaban a nudos triviales, dando así semimetales topológicos de línea nodales.

Consideramos un modelo de red cúbica para identificarlo a un semimetal topológico de nudo.

Cuando se rompe las condiciones de periodicidad en las direcciones de los vectores de la red recíproca (que se traduce tener un espacio de momentos finitos), aparecen estados de borde con velocidad de grupo cero en ciertos valores del *winding number* o un término masa  $m_z$ , estos estados se ubican en superficies acotadas por la proyección de los nodos en la zona de Brillouin degenerada, estos estados se denominan bandas planas (*flat bands*). Cuando el *winding number* tiene valor 1 para estos espacios de momentos finitos, manifiesta la existencia de bandas planas degeneradas. Al realizar la transición del índice y el término de masa se rompe con la degeneración de las bandas planas.

En los sistemas de dispositivo de dos terminales en la dirección  $z$ , alrededor de la energía cero, hay estados de bandas planas, sin embargo estos estados no son estados de borde

y no tienen simetrías de subred definidas, en todos los dispositivos se tiene que no hay una conductancia definida a energía cero, a pesar de que dado el *winding number*, la densidad de estados es mayor; el otro régimen son aislantes que dependiendo del tamaño de las terminales se tenía una brecha de energía, a excepción del nudo trébol que es un aislante en el parámetro  $m = 3.2$ .

Finalmente, dado la intensa búsqueda en hamiltonianos de cuatro bandas con energías degeneradas y el cambio de base de los eigenvectores, no encontramos modelo de semimetal topológico de nudo o enlace toroidal que sean materiales no abelianos y se vislumbrara la cohomología de los enlaces toroidales. Sin embargo, el construir la topología en estos modelos podría motivar en seguir buscando un modelo útil para estos semimetales topológicos no abelianos.

Aún cuando el modelo de red a estudiado no corresponda a una organización atómica específica, el modelo propuesto podría ser inspirador a ser realizable en redes sintéticas basadas en cristales fotónicos, acústicos o circuitos electrónicos.

# Bibliografía

- [1] C. Berger, Z. Song, T. Li, X. Li, A. Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. Dai, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, and W. A. de Heer, “Ultrathin epitaxial graphite: 2d electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics,” *The Journal of Physical Chemistry B* **108**, 19912 (2004), <https://doi.org/10.1021/jp040650f> .
- [2] A. Olatomiwa, T. Adam, C. Edet, A. Adewale, A. Chik, M. Mohammed, S. C. Gopinath, and U. Hashim, “Recent advances in density functional theory approach for optoelectronics properties of graphene,” *Heliyon* **9**, e14279 (2023).
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, “Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene,” *Nature* **438** (2005), [10.1038/nature04233](https://doi.org/10.1038/nature04233).
- [4] A. A. Burkov, M. D. Hook, and L. Balents, “Topological nodal semimetals,” *Phys. Rev. B* **84**, 235126 (2011).
- [5] N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, “Weyl and dirac semimetals in three-dimensional solids,” *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015001 (2018).
- [6] C. Fang, H. Weng, X. Dai, and Z. Fang, “Topological nodal line semimetals\*,” *Chinese Physics B* **25**, 117106 (2016).
- [7] B. Bradlyn, J. Cano, Z. Wang, M. G. Vergniory, C. Felser, R. J. Cava, and B. A. Bernevig, “Beyond dirac and weyl fermions: Unconventional quasiparticles in conventional crystals,” *Science* **353**, aaf5037 (2016), <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.aaf5037> .
- [8] W. Menasco and M. Thistlethwaite, *Handbook of Knot Theory* (Elsevier Science, 2005).
- [9] A. B. Sossinsky, *Knots, Links and Their Invariants: An Elementary Course in Contemporary Knot Theory* (Providence, Rhode Island: American Mathematical Society, 2023).
- [10] Z. Yan, R. Bi, H. Shen, L. Lu, S.-C. Zhang, and Z. Wang, “Nodal-link semimetals,” *Phys. Rev. B* **96**, 041103 (2017).
- [11] R. Bi, Z. Yan, L. Lu, and Z. Wang, “Nodal-knot semimetals,” *Phys. Rev. B* **96**, 201305 (2017).

- [12] M. Ezawa, “Topological semimetals carrying arbitrary hopf numbers: Fermi surface topologies of a hopf link, solomon’s knot, trefoil knot, and other linked nodal varieties,” *Phys. Rev. B* **96**, 041202 (2017).
- [13] S. Ramos Sánchez, *Relatividad para Futuros Físicos* (Prensas de Ciencias, 2018).
- [14] M. Thomson, *Modern particle physics* (Cambridge University Press, New York, 2013).
- [15] T. Lancaster and S. J. Blundell, *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur* (Oxford University Press, 2014).
- [16] L. V. Ahlfors, *Complex Analysis*, 3rd ed. (McGraw-Hill International Editions, 1979).
- [17] M. Kreuzer, “Quantum theory,” (2009).
- [18] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory* (Westview Press, 1995) reading, USA: Addison-Wesley (1995) 842 p.
- [19] Wikipedia, “Pauli matrices,” (2023), [Online; accessed 21/11/2023].
- [20] M.-C. Chang, “Lecture note on topological insulators,” (2023).
- [21] R. Resta, *Geometry and Topology in Electronic Structure Theory* (University of Trieste, 2012).
- [22] D. Vanderbilt, *Berry Phases in Electronic Structure Theory: Electric Polarization, Orbital Magnetization and Topological Insulators*, Titolo collana (Cambridge University Press, 2018).
- [23] M. V. Berry, “Aspects of degeneracy,” in *Chaotic Behavior in Quantum Systems: Theory and Applications*, edited by G. Casati (Springer US, Boston, MA, 1985) pp. 123–140.
- [24] L. Schiff, *Quantum Mechanics*, International series in pure and applied physics (McGraw-Hill, 1955).
- [25] F. Wilczek and A. Zee, “Appearance of gauge structure in simple dynamical systems,” *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2111 (1984).
- [26] R. D. King-Smith and D. Vanderbilt, “Theory of polarization of crystalline solids,” *Phys. Rev. B* **47**, 1651 (1993).
- [27] M. J. D. Hamilton, “Chapter 5 connections and curvature,” in *Mathematical Gauge Theory: With Applications to the Standard Model of Particle Physics* (Springer International Publishing, Cham, 2017) pp. 257–318.
- [28] R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* (Cambridge University Press, 2004).

- [29] J. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, *A Short Course on Topological Insulators: Band Structure and Edge States in One and Two Dimensions*, Lecture Notes in Physics (Springer International Publishing, 2016).
- [30] F. Schindler, “Dirac equation perspective on higher-order topological insulators,” *Journal of Applied Physics* **128**, 221102 (2020).
- [31] J. T. Edwards and D. J. Thouless, “Numerical studies of localization in disordered systems,” *Journal of Physics C: Solid State Physics* **5**, 807 (1972).
- [32] Wikipedia, “Torus knot,” (2023), [Online; accessed 21/11/2023].
- [33] D.-L. Deng, S.-T. Wang, C. Shen, and L.-M. Duan, “Hopf insulators and their topologically protected surface states,” *Phys. Rev. B* **88**, 201105 (2013).
- [34] jgon, “Winding numbers from algebraic topology,” (2018), [Online; accessed 21/11/2023].
- [35] Wikipedia, “Torus,” (2023), [Online; accessed 21/11/2023].
- [36] S.-Q. Shen, “Minimal lattice model for topological insulators,” in *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matter* (Springer Singapore, Singapore, 2017) pp. 33–50.
- [37] V. A. Kostelecký, R. Lehnert, N. McGinnis, M. Schreck, and B. Seradjeh, “Lorentz violation in dirac and weyl semimetals,” *Phys. Rev. Res.* **4**, 023106 (2022).
- [38] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, and X. Waintal, “Kwant: a software package for quantum transport,” *New Journal of Physics* **16**, 063065 (2014).
- [39] “Mini-workshop: Introduction to computational quantum transport with kwant,” (2023), [Online; accessed 21/11/2023].
- [40] D. A. Ryndyk, “Landauer-büttiker method,” in *Theory of Quantum Transport at Nanoscale: An Introduction* (Springer International Publishing, Cham, 2016) pp. 17–54.
- [41] “Singular homology.” (2023, August 4), [Online; accessed 04/12/2023].
- [42] J. Wang, “The gysin sequence and the  $sl(n)$  homology of  $t(2,m)$ ,” (2022).
- [43] S. Nead, “Edited to fix three-dimensional limit,” (2011), [Online; accessed 03/12/2023].