

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO FÍSICA

Estados Topológicos en el Marco del Modelo de Enlace Fuerte

Pablo Carlo Ignacio Reiser Ramírez

Tesis presentada al Departamento de Física de la Universidad de Técnica
Federico Santa María para optar al grado académico de Licenciado en
Ciencias con Mención en Física

Diciembre 2021

Valparaíso, Chile

Profesor Guía: Dr. Vladimir Juričić

Comite de Proyecto: Dr. Vladimir Juričić

Dr. Patricio Vargas

Dr. Francisco Peña

Dr. Pedro Orellana

”Después de todo, ¿qué es un científico entonces?

Es un hombre curioso que mira a través del ojo de una cerradura,
la cerradura de la naturaleza, tratando de saber qué es lo que sucede.”

Jacques Yves Cousteau

Agradecimientos

Primero dar gracias a mi madre y a mi padre por todo el amor, cariño y apoyo que he recibido durante mi pasar por la universidad.

Agradezco inmensamente a mi profesor guía Dr. Vladimir Juričić por todo el apoyo y confianza que ha puesto en mi el tiempo que llevamos trabajando. Siempre se ha mostrado presente e involucrado en mi aprendizaje durante este período.

Agradezco también a mis compañeros quienes siempre han estado dando ánimos en los momentos que eran necesarios.

Índice general

1. Introducción	3
1.1. Modelo de Enlace Fuerte	4
1.1.1. Segunda Cuantización	5
1.2. Fase de Berry	6
1.2.1. Formalismo	7
2. Efecto Cuántico de Hall	9
2.1. Efecto de Hall Clásico	9
2.2. Efecto Cuántico de Hall Entero	11
2.3. Número de Chern	14
2.4. Correspondencia Bulto-Borde	16
3. Modelo de Enlace Fuerte para Grafeno	19
3.1. Propiedades electrónicas del grafeno	20
3.2. Terminación Zig-Zag	23
3.3. Terminación Silla	26
4. Aislante de Chern	29
4.1. Ruptura de la Simetría del Tiempo	29
4.1.1. Operador de Inversión Temporal para Partículas sin Espín	30
4.1.2. Operador de Inversión Temporal para Partículas con Espín	31
4.1.3. Ruptura de la Simetría del Tiempo para Fermiones de Dirac	31
4.1.4. Simetría del Tiempo y Número de Chern	32
4.2. Modelo BHZ	32
4.2.1. Fases Triviales: $M/B < 0$ y $M/B > 8$	33
4.2.2. Fases Topológicas: $4 > M/B > 0$ y $8 > M/B > 4$	35
4.2.3. Ruptura de la Simetría Traslacional en Eje- $\mathbf{y}$	35
4.3. Modelo de Haldane	37
4.3.1. Terminación Silla	38
4.3.2. Terminación Zig-Zag	39
4.3.3. Masa Trivial en el Modelo de Haldane	41
5. Invariante $\mathbf{Z}_2$	44
5.1. Aislante Topológico $\mathbf{Z}_2$	44

6. Conclusiones y Trabajo Futuro	47
Referencias	48
Apéndices	51
A. Códigos Wolfram Mathematica	51
A1. Terminación Zig-Zag	51
A2. Terminación Silla	52
A3. Modelo BHZ	52
A4. Modelo Haldane Terminación Silla	53
A5. Modelo de Haldane Terminación Zig-Zag	54
B. Cálculo BHZ	55
B1. Cálculo BHZ	55

Capítulo 1

Introducción

La física de la materia condensada se ocupa de estudiar y caracterizar las propiedades macroscópicas emergentes que ocurren debido a las leyes que gobiernan los electrones y los átomos. Podemos organizar así la materia en distintas fases. Clásicamente tenemos estados líquidos, cristalinos, gel y otros en que la materia se presenta en un número gigantesco de átomos. Con la llegada del mundo cuántico se abren las puertas a un gran número de nuevas fases. El principio que nos permite caracterizar estos estados es la ruptura de simetrías. La ruptura de simetrías como la temporal, traslacional o rotacional dotan a un parámetro de orden, con consecuencias observables, de un valor finito en el estado de estudio y lo diferencia de otros.

El estudio de estados topológicos en la física teórica de materia condensada es un área relativamente nueva. Este campo es un gran progreso en la ya bien estudiada teoría de bandas en sólidos. Esta última tiene sus orígenes en la década de 1920. El descubrimiento del efecto cuántico de Hall alrededor de la años de 1980 introduce los ordenes topológicos que permiten caracterizar y explorar una gran cantidad de fenómenos, lo que se traduciría a una gran revolución en el área de la materia condensada. Así, el aislante topológico es un gran logro y aún un gran misterio en la física de la materia condensada.

En los siguientes capítulos de este trabajo exploraremos los principios, fundamentos y características de distintas fases topológicas en materiales 2D en el marco del modelo de enlace fuerte. Veremos la estructura electrónica del grafeno y su comportamiento al definir bordes en el material. En los dos últimos capítulos demostraremos como es posible tener estados topológicamente no triviales rompiendo o no la simetría de inversión temporal.

1.1. Modelo de Enlace Fuerte

El modelo de enlace lleva muchos años existiendo como una forma de describir la estructura electrónica de bandas en moléculas y sólidos. En estas discusiones preliminares plantearemos primero el modelo de enlace fuerte para una sola partícula y con un solo orbital por en cada átomo, en los siguientes capítulos se expanden los usos de este modelo a otros sistemas físicos. En consecuencia, el Hamiltoniano de un electrón corresponde con

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x), \quad (1.1)$$

donde $U(x)$ es un potencial periódico y para un solo átomo, y $\frac{p^2}{2m}$ es un término cinético. Ahora, asumiendo que los orbitales son ortonormales, es decir $\langle n|m \rangle = \delta_{nm}$, y tomando una función de prueba general de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle, \quad (1.2)$$

así podemos plantear la siguiente ecuación de Schrödinger efectiva

$$\sum_m H_{nm} \phi_m = E \phi_n. \quad (1.3)$$

De la ecuación anterior expresamos el elemento matricial del Hamiltoniano de la siguiente forma

$$H_{nm} = \langle n| H |m\rangle = \epsilon_{\text{átomo}} \delta_{nm} + \sum_{j \neq n} \langle n| U_j |m\rangle, \quad (1.4)$$

donde $\epsilon_{\text{átomo}}$ es la energía del electrón en el núcleo m en ausencia de cualquier otro núcleo. Por otra parte, el último término de la ecuación nos dice que, mediante la interacción con núcleos que no son número m , un electrón puede "saltar" desde el átomo m hasta el átomo n . Para esta introducción estamos interesados únicamente en los saltos al átomo vecino más cercano, es decir $n = m \pm 1$, donde

$$\sum_{j \neq m} \langle n| U_j |m\rangle = -t \quad ; \quad n = m \pm 1, \quad (1.5)$$

donde t es el término de salto y representa la energía necesaria para que un

electrón transite a un orbital vecino. Una vez definido este término de salto podemos pasar a estudiar el modelo de enlace fuerte en el marco de la segunda cuantización, formalismo en el que se expresa el desarrollo de todos los siguientes modelos que se trabajan en los siguientes capítulos.

1.1.1. Segunda Cuantización

En el formalismo de la segunda cuantización se considera el valor de expectación de la energía como un operador, de esta forma, tenemos

$$\langle H \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle \xrightarrow{\text{S.C.}} H = \sum_{m,n} c_m^\dagger H_{mn} c_n, \quad (1.6)$$

donde $c^\dagger$ y c son operadores de creación y destrucción respectivamente. El operador de energía en segunda cuantización H actúa sobre un espacio de Fock, a diferencia del operador de energía en primera cuantización que actúa sobre un espacio de Hilbert. Es este último formalismo el cual utilizaremos durante todo este trabajo. Interpretamos entonces el uso de los operadores de creación y destrucción como la forma en que podemos realizar los saltos de los electrones entre los orbitales. El operador de destrucción destruye un electrón en la posición n y el operador de creación crea un electrón en la posición m .

De esta forma, los fermiones satisfacen las siguientes relaciones de anticonmutación

$$\begin{aligned} \text{Fermiones:} \quad & \{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \\ & \{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Por supuesto existen formas más generales de estos operadores que incluyen espín pero los modelos estudiados en este trabajo no consideran espín así que será omitido. Por otro lado, los bosones satisfacen las siguientes relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} \text{Bosones:} \quad & [c_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij}, \\ & [c_i, c_j] = [c_i^\dagger, c_j^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Ahora, también podemos escribir los estados de la red cristalina en términos partículas con diferentes momentos. Usamos la representación en el espacio de momento $|\mathbf{k}\rangle$.

En esta representación de momento, podemos definir operadores de creación y destrucción que crean o destruyen partículas con momento $\mathbf{k}$. Estos operadores se definen a partir de la transformada de Fourier de los operadores en el espacio de posición

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_i^\dagger, \\ c_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_i. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Notar que las siguientes relaciones de ortogonalidad son muy útiles

$$\sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} = \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_i} = N\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (1.10)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = N\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}. \quad (1.11)$$

Luego, podemos plantear el Hamiltoniano para un sistema de fermiones no interactuantes (por supuesto existen formas más generales para este Hamiltoniano, estas incluyen otras interacciones y, de esta forma, más operadores de creación y destrucción)

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}), \quad (1.12)$$

donde h.c es el hermitiano conjugado del término anterior y t es el término de salto que ya se definió anteriormente. Esta es la forma más básica que puede tomar el Hamiltoniano del modelo de enlace fuerte en el espacio de posición. En los modelos que se estudian en los siguientes capítulos se utilizan las propiedades de los operadores vistos aquí y se amplían las formas del Hamiltoniano del modelo de enlace fuerte.

1.2. Fase de Berry

En 1984, con el fin de dar una explicación transporte cuántico adiabático de partículas en campos que varían lentamente, M.V. Berry desarrolla lo que conocemos como la fase de Berry. Este concepto es el más importante en teoría de bandas topológicas. En los siguientes capítulos de este trabajo veremos como

la fase de Berry juega un rol fundamental en fases topológicas como el aislante de Chern y el invariante Z_2 .

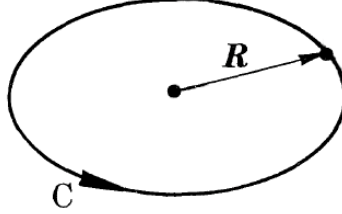


Figura 1.2.1: Camino $\mathcal{C}$ por donde los parámetros de nuestro sistema varían lentamente. Para nuestros propósitos el camino puede ser abierto o cerrado

1.2.1. Formalismo

Dado un sistema con un hamiltoniano que depende del tiempo $H(\mathbf{R})$ cuya dependencia temporal se da a partir de distintos parámetros dependientes del tiempo denotados por $\mathbf{R} = (R_1(t), R_2(t), R_3(t), \dots)$. En el límite adiabático, que corresponde con la dinámica generada por Hamiltonianos que varían lentamente, el teorema adiabático [1] nos permite tomar una curva $\mathcal{C}$ por donde los parámetros $\mathbf{R}(t)$ varían lentamente a medida que el sistema evoluciona, lo que vemos representado en la Figura 1.2.1. Utilizaremos una base ortonormal de autoestados instantáneos $|n(\mathbf{R})\rangle$ de $H(\mathbf{R})$, así tenemos la siguiente ecuación de autovalores

$$H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle. \quad (1.13)$$

Dado que queremos analizar la fase de la función de onda de nuestro sistema preparado en un estado inicial $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ a medida cambia lentamente $\mathbf{R}(t)$ por el camino $\mathcal{C}$. El teorema adiabático nos indica el estado inicial $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ se mantiene como un auto-estado instantáneo del Hamiltoniano $H(\mathbf{R}(t))$. De esta forma, durante la evolución adiabática del sistema, tenemos la siguiente fase $\theta(t)$ para nuestro estado $|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle$. Ahora, la evolución temporal del sistema viene dada por

$$H(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle. \quad (1.14)$$

Así, obtenemos la siguiente ecuación diferencial

$$E_n(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle = \hbar \left(\frac{d}{dt} \theta(t) \right) |n(\mathbf{R}(t))\rangle + i\hbar \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle. \quad (1.15)$$

Tomando el producto escalar con $\langle \mathbf{R}(t) |$, asumiendo que el estado está normalizado y resolviendo la ecuación, obtenemos que la fase $\theta(t)$ viene dada por

$$\theta(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' - i \int_0^t \langle n(\mathbf{R}(t')) | \frac{d}{dt'} |n(\mathbf{R}(t'))\rangle dt'. \quad (1.16)$$

Donde el primer término corresponde con una fase dinámica mientras que el segundo es lo que, de ahora en adelante llamaremos, fase de Berry. Ahora, podemos expresar nuestro estado $|\psi(t)\rangle$ de la siguiente forma

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' \right\} \exp \{ i\gamma_n \} |n(\mathbf{R}(t))\rangle, \quad (1.17)$$

considerando que $\frac{\partial}{\partial t'} |n(\mathbf{R}(t'))\rangle = (\nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R}(t'))\rangle) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt'}$, la fase de Berry es

$$\gamma_n = i \int_0^t \langle n(\mathbf{R}(t')) | \frac{d}{dt'} |n(\mathbf{R}(t'))\rangle dt' = i \int_C \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle d\mathbf{R}. \quad (1.18)$$

Aquí definimos la conexión o vector potencial de Berry

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = -i \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} |n(\mathbf{R})\rangle. \quad (1.19)$$

Por último, en los siguientes capítulos utilizaremos una cantidad que nos permitirá expresar nuestros números invariantes topológicos. Esta es la curvatura de Berry que viene dada por

$$\mathbf{F}_{xy} = \frac{\partial \mathbf{A}_y}{\partial x} - \frac{\partial \mathbf{A}_x}{\partial y}. \quad (1.20)$$

Capítulo 2

Efecto Cuántico de Hall

El nacimiento de la topología en el contexto de la materia condensada es consecuencia del estudio de los efectos cuánticos de Hall. El efecto cuántico de Hall y su relación con la constante de estructura fina fue descubierta en 1980 por Klaus von Klitzing [2], lo que le debió luego el Premio Nobel en Física en 1985. Este efecto es una versión cuantizada del efecto de Hall, este es observado sistemas de electrones de dos dimensiones sometidos a bajas temperaturas y campos magnéticos fuertes. Este fenómeno se evidencia en la cuantización de la conductancia de Hall la cual presenta mesetas finamente cuantizadas. Ahora, las mesetas ocurren en valores enteros o fraccionarios de la unidad de conductancia $\frac{e^2}{h}$ lo que da origen a el efecto cuántico de Hall entero o fraccionario.

$$\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}, \quad (2.1)$$

donde σ_{xy} es la conductancia, e es la carga elemental y h la constante Planck. Por otro lado ν puede tomar los valores $\nu = \{1, 2, 3, \dots\}$ o $\nu = \{\frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{7}, \dots\}$. En este trabajo solo estudiaremos el caso del efecto cuántico de Hall entero, el cual podemos observar en la Figura 2.0.1.

2.1. Efecto de Hall Clásico

El primer paso se da en 1879 cuando Edwin H. Hall observó el efecto que hoy lleva su nombre. El midió el voltaje producto de el desvío de partículas cargas en un sólido sometido un campo magnético y un campo eléctrico externo [4]. El experimento realizado por Hall consistió en un hoja de oro a la que se

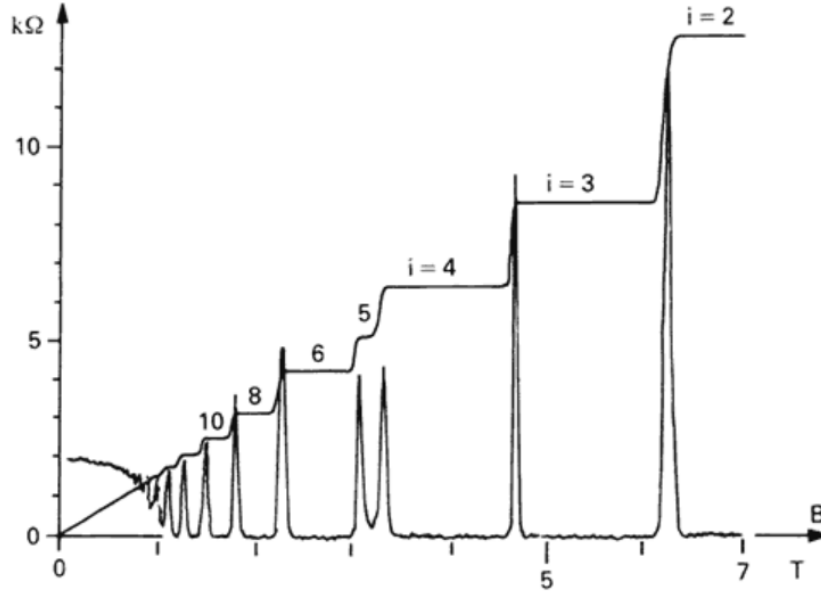


Figura 2.0.1: La resistencia de Hall varía paso a paso con los cambios en el campo magnético B . La altura del paso viene dada por la constante física h/e^2 (valor de aproximadamente $25 [k\Omega]$) dividida por un número entero i . La figura muestra los pasos para $i = 2, 3, 4, 5, 6, 8$ y 10 . El efecto ha dado lugar a un nuevo estándar internacional de resistencia. Desde 1990 esto ha sido representado por la unidad 1 klitzing, definida como la resistencia de Hall en el cuarto escalón ($h/4e^2$). La curva de pico inferior representa la resistencia óhmica, que desaparece en cada paso.[3]

le aplicó un campo magnético $\mathbf{B}$ perpendicular a la superficie. A medida que las partículas avanzan por el material, estas se ven desviadas por la fuerza de Lorentz y se acumulan cerca del borde del material. Como resultado, la acumulación de cargas produce un campo eléctrico $\mathbf{E}$. La Figura 2.1.1 es un esquema del experimento

La diferencia de voltaje entre los dos bordes es $V_H = EL$, donde L es el ancho del material. Ahora, la corriente eléctrica que pasa por el material es $I = q\rho_e vL$ (ρ_e es la densidad de cargas y v es la velocidad de deriva). Luego, la razón entre el voltaje y la corriente eléctrica es conocido como la resistencia de Hall:

$$R_H = \frac{V_H}{I} = \frac{B}{q\rho_e}. \quad (2.2)$$

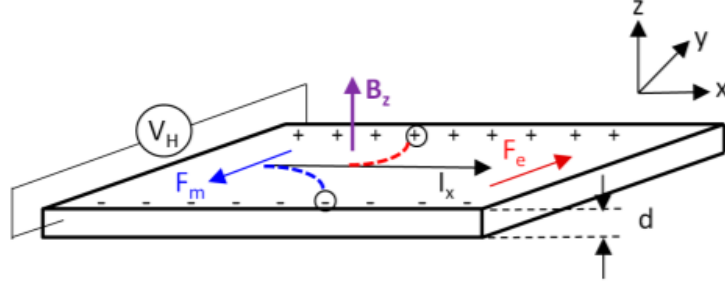


Figura 2.1.1: Esquema del experimento realizado por Edwin H. Hall en 1879. Se observa la desviación de cargas debido a la presencia del campo magnético perpendicular a la superficie.[5]

2.2. Efecto Cuántico de Hall Entero

El primer acercamiento a este fenómeno puede ser entendido sin considerar la interacción entre electrones, realizaremos un acercamiento semiclásico. Consideraremos que el estado cuántico de una partícula en un campo magnético sigue siendo un estado cuántico cuando hayan muchas partículas. Así, el Hamiltoniano para una partícula restringida al plano- (x, y) en un campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = B\hat{z}$ viene dado por

$$H = \frac{1}{2m_e}(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\hat{x}, \hat{y}))^2, \quad (2.3)$$

donde $\mathbf{p} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$, e y m_e son la carga y la masa del electrón respectivamente. Ahora, procedemos escogiendo lo que se conoce como gauge de Landau $\mathbf{A} = xB\hat{y}$, de esta forma el Hamiltoniano puede ser escrito como

$$H = \frac{1}{2m_e} (p_x^2 + (p_y + eBx)^2). \quad (2.4)$$

Ahora, la selección del gauge de Landau $\mathbf{A}$ rompe la simetría traslacional en la dirección x y la rotacional pero no rompe la simetría traslacional en la dirección y , de esta forma tenemos $[p_y, H] = 0$, por lo que p_y es un buen número cuántico y de esta forma podemos considerar el siguiente ansatz

$$\psi(x, y) = e^{ik_y y} f(x), \quad (2.5)$$

de tal forma que el Hamiltonio actúa en $\psi(x, y)$ y tenemos

$$H\psi(x, y) = \frac{1}{2m_e} (p_x^2 + (p_y + eBx)^2) \psi(x, y). \quad (2.6)$$

Definiendo $\omega_B = eB/m_e$ como la frecuencia de ciclotrón de un electrón en un campo magnético uniforme y lo que se conoce como *largo magnético* $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, podemos escribir nuestro Hamiltoniano de una forma que corresponde a un oscilador armónico cuántico centrado en $x = -k_y l_B^2$

$$H\psi(x, y) \left(\frac{p_x^2}{2m_e} + \frac{m_e \omega_B^2}{2} (x + k_y l_B^2)^2 \right) \psi(x, y). \quad (2.7)$$

Si definimos los operadores

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar eB}} (p_x - ieBx), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar eB}} (p_x + ieBx), \quad (2.8)$$

que por supuesto siguen la siguiente relación de conmutación $[a, a^\dagger] = 1$ y los niveles de energía vienen dados por $E_n = \hbar\omega_B(n + \frac{1}{2})$, donde $n \in \mathbb{N}$ y es el autovalor del operador $\mathcal{N} = a^\dagger a$.

Los autovalores de energía del sistema se organizan en *niveles de Landau*, denotados por n y los cuales son altamente degenerados. Esta degeneración se debe a los distintos valores continuos que puede tomar k_y . Ahora, en realidad, la geometría de los sistemas a estudiar tienen dimensión finita L_x, L_y , y debido a que la constante de red es distinta de 0, se concluye que la degeneración es grande pero finita. Si modelamos los bordes de un sistema de Hall como un pozo infinito de potencial, el momento k_y se cuantiza de la forma $k_y \in \frac{2\pi}{L_y} \mathbb{N}$. Incluso, dado que los autoestados en un dado nivel de Landau son los autoestados de un oscilador armónico cuántico centrado en $x = -k_y l_B^2$, tenemos la restricción $|x| < L_x/2$ y, en consecuencia, $|k_y| < L_x/2l_B^2$. Así, la degeneración en un nivel de Landau puede ser escrita como

$$N_{LL} = \frac{L_y}{2\pi} \int_{-L_x/2l_B^2}^{L_x/2l_B^2} dk = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2}. \quad (2.9)$$

Ahora, para recuperar la expresión (2.1), planteamos un potencial de la forma que se muestra en la Figura 2.2.1, y lo expresamos como

$$eV_H = V(x_+) - V(x_-), \quad (2.10)$$

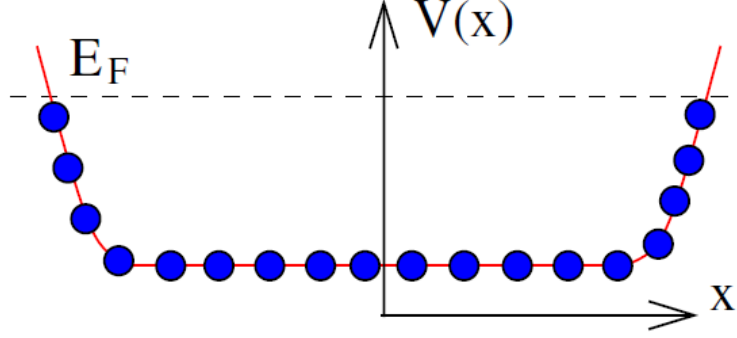


Figura 2.2.1: Potencial con forma de U, los puntos representan estados localizados en una posición x . [6]

donde $x_{\pm}$ son las posiciones de los bordes y V_H es el voltaje de Hall. Podemos asumir que el rol de este potencial de confinamiento es incrementar la energía de los estados localizados cerca del borde, estos estados son también llamados *modos de borde*. Procedemos aproximando el potencial en la vecindad del borde, así tenemos

$$V(x) \approx \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=x_{\pm}} (x - x_{\pm}), \quad (2.11)$$

luego, clásicamente podemos plantear la velocidad de un electrón cerca de borde como

$$\mathbf{v} = -\frac{1}{eB} \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=x_{\pm}} \hat{y}. \quad (2.12)$$

Lo importante aquí es que esto cumple con la fuerza de Lorentz, y así, también debería mantenerse cuánticamente mediante el teorema de Ehrenfest. Así, el estado de borde resulta en una corriente 1-dimensional que fluye a través del borde. Dado que la corriente fluye en una sola dirección decimos que los estados de borde son *quirales*.

Finalmente, si un número entero $\nu \in \mathbb{N}$ de niveles de Landau es llenado con electrones no interactuantes, la corriente resulta ser

$$\mathbf{I} \approx -\nu e \int \frac{dk_y}{2\pi} \mathbf{v}_y(k_y) = \frac{\nu}{2\pi B} \int \frac{dx}{l_B^2} \frac{\partial V}{\partial x} \hat{y} = \frac{e^2 \nu V_H}{h} \hat{y}, \quad (2.13)$$

de donde se recupera claramente la ecuación (2.1).

2.3. Número de Chern

En esta sección demuestro como la conductividad de Hall σ_{xy} es un ejemplo de un invariante topológico conocido como invariante TKNN [7]. Aquí sigo los procedimientos discutidos en [8–10].

Consideramos una partícula en una red rectangular, con las constantes de red a_x, a_y , de esta forma los vectores de la red son

$$\mathbf{R}_{mn} = ma_x\hat{x} + na_y\hat{y}, \quad m, n \in \mathbb{Z}. \quad (2.14)$$

Ahora, los vectores primitivos de la red recíproca son claramente $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a_x}\hat{x}$, $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a_y}\hat{y}$, y de esta forma la primera zona de Brillouin es la región $\mathbf{k} \in [-\frac{\pi}{a_x}, \frac{\pi}{a_x}] \times [-\frac{\pi}{a_y}, \frac{\pi}{a_y}]$. Dado que consideramos que el Hamiltoniano es invariante ante traslaciones en la red implica que tenemos autoestados de energía de la forma de Bloch

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}, \\ u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + a_x\hat{x}) &= u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x} + a_y\hat{y}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Pero ¿qué nos asegura que existe simetría traslacional una vez introducido el campo magnético en el sistema y así poder utilizar estados de Bloch? Bueno, existen los llamados operadores de traslación, en nuestro caso tenemos el operador de traslaciones magnéticas

$$T_{\mathbf{R}}^M = T_{\mathbf{R}} \exp \left\{ \frac{ie}{2\hbar} (\mathbf{B} \times \mathbf{R}) \cdot \mathbf{r} \right\},$$

donde $\mathbf{r}$ depende de la selección de gauge y $T_{\mathbf{R}}$ es el operador de traslación sin campo magnético. Basta saber que este operador $T_{\mathbf{R}}^M$ conmuta con el Hamiltoniano $[T_{\mathbf{R}}^M, H] = 0$, de tal forma que el Hamiltoniano es invariante bajo traslaciones en campo magnético.

Una vez dicho lo anterior, podemos definir un Hamiltoniano efectivo que depende del momento $H_{\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} H e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$, de tal forma que $H_{\mathbf{k}} |u_{\mathbf{k}}\rangle = E_{\mathbf{k}} |u_{\mathbf{k}}\rangle$. Luego, definimos el operador de corriente $\mathbf{J}$, el cual es la carga por el operador de "velocidad de grupo" autoestados de Bloch

$$\mathbf{J} = e \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}. \quad (2.15)$$

Ahora, definimos la conductividad usando la formula de Kubo [6]. Aquí tenemos la conductividad en el autoestado de energía $|m\rangle$ de un sistema cuántico, donde $|n\rangle$ son los autoestados del Hamiltoniano con autovalores E_n .

$$\sigma_{xy} = i\hbar \sum_{n \neq m} \frac{\langle m | J_y | n \rangle \langle n | J_x | m \rangle - \langle m | J_x | n \rangle \langle n | J_y | m \rangle}{(E_n - E_m)^2}. \quad (2.16)$$

Luego, modificamos esta formula utilizando la corriente definida en la ecuación (2.15), así, la formulación apropiada es

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2}{\hbar} \sum_{E_\alpha < E_F < E_\beta} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{d^2\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \mathcal{S}(u_{\mathbf{k}}^\alpha, u_{\mathbf{k}'}^\beta), \quad (2.17)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(u_{\mathbf{k}}^\alpha, u_{\mathbf{k}'}^\beta) &= \frac{\langle u_{\mathbf{k}}^\alpha | \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial k^y} | u_{\mathbf{k}'}^\beta \rangle \langle u_{\mathbf{k}'}^\beta | \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial k^x} | u_{\mathbf{k}}^\alpha \rangle}{(E_\beta(\mathbf{k}') - E_\alpha(\mathbf{k}))^2} \\ &\quad - \frac{\langle u_{\mathbf{k}}^\alpha | \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial k^x} | u_{\mathbf{k}'}^\beta \rangle \langle u_{\mathbf{k}'}^\beta | \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial k^y} | u_{\mathbf{k}}^\alpha \rangle}{(E_\beta(\mathbf{k}') - E_\alpha(\mathbf{k}))^2}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Aquí, las integrales se realizan sobre la zona de Brillouin mientras que las sumas son sobre el par de estados $u_{\mathbf{k}}^\alpha, u_{\mathbf{k}'}^\beta$ debajo y sobre la energía de Fermi respectivamente. Ahora, utilizando la relación de completitud

$$\sum_{\beta} \int \frac{d^2\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} |u_{\mathbf{k}'}^\beta\rangle \langle u_{\mathbf{k}'}^\beta| = 1 - \sum_{\alpha} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} |u_{\mathbf{k}}^\alpha\rangle \langle u_{\mathbf{k}}^\alpha|, \quad (2.19)$$

tenemos

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2}{\hbar} \sum_{E_\alpha < E_F} \int \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left[\left\langle \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial k^y} \middle| \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial k^x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial k^x} \middle| \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial k^y} \right\rangle \right]. \quad (2.20)$$

Ahora, podemos relacionar la formula de Kubo con un invariante topológico del que ya hemos hablado, este es la conexión de Berry (1.19) que para este caso toma la forma

$$\mathbf{A}_j(\alpha, \mathbf{k}) = -i \langle u_{\mathbf{k}}^\alpha | \frac{\partial}{\partial k^j} | u_{\mathbf{k}}^\alpha \rangle, \quad (2.21)$$

así tenemos la conexión de Berry sobre la zona de Brillouin para la banda

α . En consecuencia, el tensor de curvatura de Berry tiene la siguiente forma

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{ij}(\alpha) &= \frac{\partial \mathbf{A}_j(\alpha, \mathbf{k})}{\partial k^i} - \frac{\partial \mathbf{A}_i(\alpha, \mathbf{k})}{\partial k^j} \\ &= -i \left\langle \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial k^i} \middle| \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial k^j} \right\rangle + i \left\langle \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial k^j} \middle| \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^\alpha}{\partial k^i} \right\rangle,\end{aligned}\tag{2.22}$$

esto nos permite escribir la ecuación (2.20) como

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \sum_{\alpha} \int \frac{dk^x dk^y}{(2\pi)^2} \mathbf{F}_{xy}(\alpha).\tag{2.23}$$

Desde el teorema de Gauss-Bonnet, la integral de la curvatura de Berry $\mathbf{F}_{xy}(\alpha)$ sobre la zona de Brillouin es $2\pi C_{\alpha}$, donde C_{α} es un número entero conocido como *número de Chern*. Así, tenemos la la conductancia de Hall cuantizada

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi h} \sum_{\alpha} C_{\alpha} \in \frac{e^2}{h} \mathbb{Z}.\tag{2.24}$$

La relación anterior puede considerarse entonces como la prueba del papel fundamental de topología. Esta conecta directamente la cantidad física σ_{xy} a un invariante topológico, el número de Chern.

2.4. Correspondencia Bulto-Borde

En el estado cuántico de Hall, el bulto del material 2-dimensional es aislante, es decir, posee una brecha en las bandas y, por otra parte, hemos obtenido conductancia de Hall distinta de cero, lo que nos indica transporte eléctrico aún así cuando el sistema posee una brecha ¿Cómo es esto posible? Pues es debido a la presencia de estados localizados en el borde del material. Aún cuando el material es aislante en el bulto, en el momento que plantean bordes en el sistema y el bulto es topológicamente no trivial, existirán estados sin brecha localizados. Hasta ahora, hemos conseguido estados topológicos no triviales introduciendo un campo magnético en nuestro sistema, introducir este campo magnético rompe la simetría del tiempo (concepto que desarrollaremos en el capítulo 4).

Un ejemplo que facilita el entendimiento de este concepto es el problema de Jackiw-Rebbi. *Modos cero de la ecuación de Dirac con una pared de dominio en la masa.* La interfaz de un aislante topológico 2-dimensional y un aislante trivial puede ser modelada como una pared de dominio, en donde el signo del término de masa de Dirac en el Hamiltoniano de superficie cambia. El objetivo es mostrar que el Hamiltoniano 1-dimensional efectivo de la forma

$$H = \sigma_x p_x + m(x) \sigma_z, \quad (2.25)$$

donde $m(x) = m_0 \text{sign}(x)$, $m_0 > 0$, σ son las matrices de Pauli usuales y el eje x es ortogonal a la interfaz, tiene un estado de energía cero localizado de la forma

$$\Psi(x) = \exp\left\{-\int_0^\infty dx m(x)\right\} \Psi_0, \quad (2.26)$$

con Ψ_0 un espinor constante. Ahora, lo que nos interesa es que se cumpla

$$H\Psi(x) = 0. \quad (2.27)$$

Procedemos de la siguiente forma

$$\begin{aligned} 0 &= [-i\sigma_x m(x) \partial_x + m(x) \sigma_z] \exp\left\{-\int_0^\infty dx m(x)\right\} \Psi_0 \\ &= [i\sigma_x m(x) + \sigma_z m(x)] \Psi_0 \\ &= [i\sigma_x \sigma_x + \sigma_x \sigma_z] \Psi_0. \end{aligned}$$

Así, tenemos la siguiente condición para Ψ_0

$$-\sigma_y \Psi_0 + \Psi_0 = 0 \implies \sigma_y \Psi_0 = \Psi_0 \quad (2.28)$$

Lo primero es dar una interpretación a la pared de dominio. En nuestro caso consideraremos que la pared de dominio representa el paso desde el bulto de nuestro material ($m(x) > 0$) hasta el vacío exterior ($m(x) < 0$), de esta forma, del resultado anterior podemos concluir dos cosas. Primero, la condición que debe cumplir Ψ_0 nos indica simetría quiral ($\{\sigma_y, H\} = 0$) y segundo, es que efectivamente tenemos estados de energía cero en la interfaz entre los dos sistemas.

Este ejemplo demuestra una propiedad general y muy importante de las

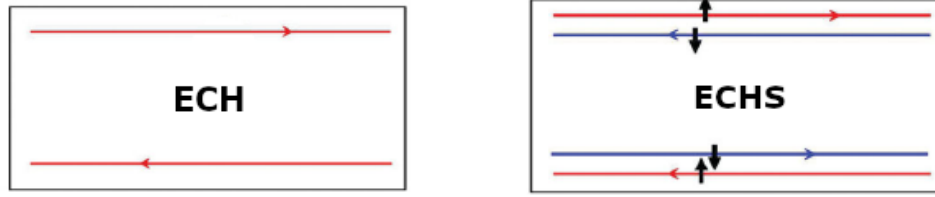


Figura 2.4.1: Comparación entre el efecto cuántico de Hall con y sin espín. Izquierda: Estados de borde en el efecto cuántico de Hall sin espín. El borde superior solo permite movimiento a la derecha y el borde inferior permite solo movimiento a la izquierda. Estos estados están protegidos topológicamente. Derecha: Sistema con espín, el borde superior permite movimiento a la derecha con espín hacia arriba y el movimiento a la izquierda con espín hacia abajo mientras que para el borde inferior es al revés.

fases topológicas. Un estado topológicamente no trivial en bulto implica la existencia de modos sin brecha localizados en el borde del sistema, como se anunció anteriormente. Esto se conoce como la *correspondencia bulto-borde* en el contexto de la física de la materia condensada topológica.

Volviendo al efecto cuántico de Hall. En este trabajo no consideramos el espín en nuestro sistema. De todas formas, es necesario mencionar que estos sistemas, obviamente, existen. En el caso de que se considere el efecto cuántico de Hall con espín, se puede pensar este como dos copias sin espín del efecto. En la Figura 2.4.1, se ilustra como se propagan los estados en el borde en ambos efectos.

Capítulo 3

Modelo de Enlace Fuerte para Grafeno

El carbono es la base de la vida y toda la química orgánica. Debido a la flexibilidad en sus enlaces, sistemas basados en carbono muestran un gran cantidad de estructuras y, de esta forma, una gran variedad de propiedades físicas. Un de estos sistemas de carbono es el grafeno, una red 2-dimensional de átomos de carbono que, desde su descubrimiento en el 2004 y la formulación del método de "scotch tape" para la síntesis de grafeno (método que fue galardonado con el Premio Nobel en Física en 2010) [11], ha despertado la curiosidad de gran parte de la comunidad. El estudio de este material no deja de revelar nuevas propiedades y nueva física que desarrollar.

El grafeno está hecho de átomos de carbono dispuestos en una estructura de panel de abejas hecha de hexágonos. Experimentalmente, la red hexagonal del grafeno, muestra ser una material de sorprendentes propiedades, de fundamental importancia e interés. Desde un punto de vista teórico, el grafeno no deja de sorprender, este tiene 2 sitios por celda unitaria (sitios A y B) y, en consecuencia, el modelo mínimo para el grafeno es un modelo de dos bandas. En este capítulo estudiaremos las propiedades electrónicas de este material a partir del modelo de enlace fuerte con salto al vecino más cercano. Veremos como la terminación de los bordes afecta en la estructura de bandas y un análisis de esta última.

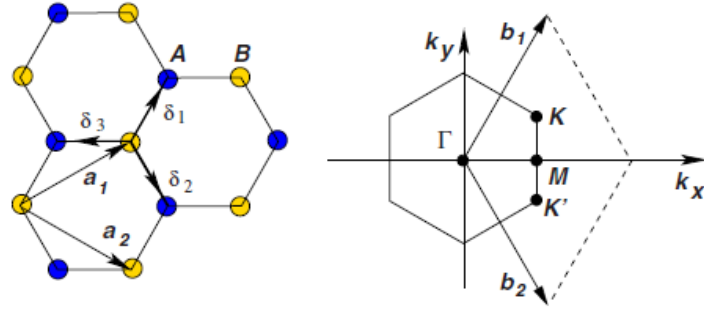


Figura 3.1.1: Red de panal de abejas y su zona de Brillouin. Izquierda: Estructura de red de grafeno, hecha de dos redes triangulares superpuestas ($\mathbf{a}_1$ y $\mathbf{a}_2$ son los vectores de red primitivos, y $\boldsymbol{\delta}_i$, $i = 1, 2, 3$ son los vectores del vecino más cercano). Derecha: zona de Brillouin correspondiente. Los conos de Dirac están posicionados en los puntos $\mathbf{K}$ y $\mathbf{K}'$ [12].

3.1. Propiedades electrónicas del grafeno

La celda unidad del grafeno, como indica la Figura 3.1.1, consiste en dos sitios A y B , podemos definir los vectores de red como

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}) \quad ; \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}). \quad (3.1)$$

Por otra parte, los vectores de la red recíproca se definen según la siguiente propiedad $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi\delta_{ij}$, de esta forma, estos corresponden con

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \quad ; \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (3.2)$$

Ahora, muy importantes para el desarrollo es definir los vectores de los vecinos más cercanos, estos son

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}) \quad ; \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad ; \quad \boldsymbol{\delta}_3 = -a(1, 0) \quad (3.3)$$

Desde la imagen, en la zona de Brillouin, podemos definir la ubicación de los puntos de Dirac:

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}(\sqrt{3}, 1) \quad ; \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}(\sqrt{3}, -1) \quad (3.4)$$

Para este modelo consideraremos solo saltos al vecino más cercano, de esta forma, el Hamiltoniano de enlace fuerte para el grafeno viene dado por

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \left(c_{Ai}^\dagger c_{Bj} + \text{h.c.} \right), \quad (3.5)$$

donde t es el término de salto, $c_{Ai}^\dagger$ (c_{Ai}) es un operador de creación (aniquilación) de un electrón en A con posición $\mathbf{r}_i$ mientras que $c_{Bj}^\dagger$ (c_{Bj}) son análogos pero en B . Teniendo en cuenta que $\boldsymbol{\delta}_i$ son los vectores del vecino más cercano, podemos escribir el Hamiltoniano como:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \left(c_{Ai}^\dagger c_{Bj} + \text{h.c.} \right) = -t \sum_i \sum_{\boldsymbol{\delta}} \left(c_{Ai}^\dagger c_{Bi+\boldsymbol{\delta}} + \text{h.c.} \right). \quad (3.6)$$

Esto nos permite escribir el operador de creación como $c_{Bi+\boldsymbol{\delta}}^\dagger$, este crea un fermión en B con posición $\mathbf{r}_i + \boldsymbol{\delta}$. Ahora, podemos escribir los operadores en el espacio recíproco como

$$c_{Ai}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} c_{A\mathbf{k}}^\dagger, \quad (3.7)$$

claramente esto es análogo para el resto de operadores de creación y aniquilación. Así, trabajando los términos, podemos expresar el Hamiltoniano con los operadores en el espacio recíproco

$$\begin{aligned} H &= -\frac{t}{N} \sum_i \sum_{\boldsymbol{\delta}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_i} e^{i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\delta}} c_{A\mathbf{k}}^\dagger c_{B\mathbf{k}'} + \text{h.c.} \right), \\ &= -\frac{t}{N} \sum_{\boldsymbol{\delta}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(N \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\delta}} c_{A\mathbf{k}}^\dagger c_{B\mathbf{k}'} + \text{h.c.} \right), \\ &= -t \sum_{\boldsymbol{\delta}, \mathbf{k}} \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} c_{A\mathbf{k}}^\dagger c_{B\mathbf{k}} + \text{h.c.} \right), \\ &= -t \sum_{\boldsymbol{\delta}, \mathbf{k}} \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} c_{A\mathbf{k}}^\dagger c_{B\mathbf{k}} + e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}} c_{B\mathbf{k}}^\dagger c_{A\mathbf{k}} \right). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Este Hamiltoniano puede ser escrito como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\psi}^\dagger \mathbf{h}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\psi}, \quad (3.9)$$

donde

$$\boldsymbol{\psi}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{A\mathbf{k}}^\dagger & c_{B\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} c_{A\mathbf{k}} \\ c_{B\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

y la matriz $\mathbf{h}(\mathbf{k})$ es un Hamiltoniano de Bloch que viene dada por

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) = -t \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\mathbf{k}}^* \\ \Delta_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Teniendo en cuenta que $\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}}$, lo que resta por hacer es calcular los valores propios de nuestra Hamiltoniano de Bloch, estos vienen dados por la expresión

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}}}. \quad (3.12)$$

Ahora, es necesario desarrollar $\Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}}$,

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}}^* &= \sum_{\boldsymbol{\delta}} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3}, \\ &= e^{ik_x \frac{a}{2}} e^{ik_y \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{ik_x \frac{a}{2}} e^{-ik_y \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{-ik_x a}, \\ &= e^{-ik_x a} \left[e^{ik_x \frac{3a}{2}} e^{ik_y \frac{a\sqrt{3}}{2}} + e^{ik_x \frac{3a}{2}} e^{-ik_y \frac{a\sqrt{3}}{2}} + 1 \right], \end{aligned} \quad (3.13)$$

luego

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}} = 3 + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a \right) \cos \left(\frac{3}{2} k_x a \right) + 2 \cos \left(\sqrt{3} k_y a \right). \quad (3.14)$$

De esta forma los valores propios de la energía vienen dados por

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}, \quad (3.15)$$

con $f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3} k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2} k_x a\right)$. De esta forma, la ecuación (3.15) describe las dos bandas de energía sin brecha, estas se tocan en los llamados *puntos de Dirac* ubicados en $\mathbf{K}$ y $\mathbf{K}'$ (ver Figura 3.1.2). Estos puntos en la zona de Brillouin son aquellos donde $E_{\pm}(\mathbf{k}) = 0$. Aquí podemos describir la conducción eléctrica mediante el movimiento de cargas, las cuales son fermiones sin masa regidos mediante la ecuación de Dirac.

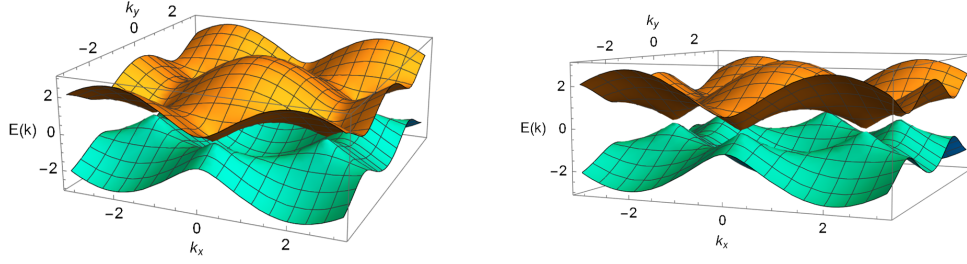


Figura 3.1.2: Bandas de energía para el grafeno considerando interacciones del vecino más cercano. Las bandas se tocan en los puntos de Dirac, donde la energía es 0.

Como mencionamos en la sección 2.4, en el momento se plantean bordes, existirán estados sin brecha localizados. En las siguientes sección rompemos la simetría traslacional definiendo bordes en la red de grafeno. Veremos el comportamiento de las bandas de energía y los estados de energía cero.

3.2. Terminación Zig-Zag

El primer caso que veremos será introducir bordes en forma de zig-zag (ver Figura 3.2.1). Ahora, calcularemos el Hamiltoniano de forma matricial, para esto utilizaremos un método que nos será útil para el resto de sistemas que se trabajarán

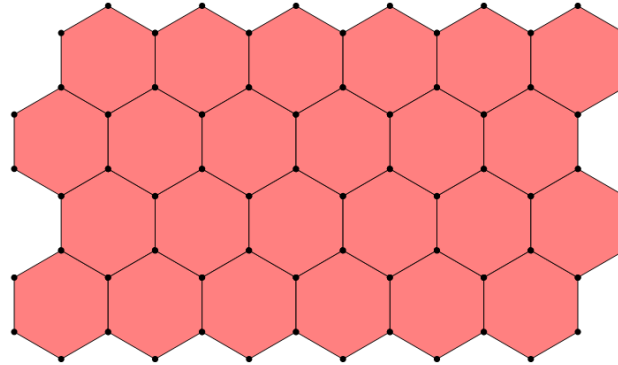


Figura 3.2.1: Red de grafeno con terminación zig-zag. Consideramos la la red es infinita en la dirección x y finita en la dirección y .

Ahora, dado que aún existe simetría traslacional en el eje x , es claro que k_x es un buen número cuántico para utilizar, por lo que transformaremos el Hamiltoniano (3.5). Nos interesa poder escribir el Hamiltoniano usando la componente x del momento y la componente y de posición. Por lo que

escribiremos nuestro Hamiltoniano de la siguiente forma

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\langle ij \rangle} \left(c_{A,i}^\dagger h_{ij} c_{B,j} + \text{h.c.} \right), \quad (3.16)$$

Donde $h_{ij} = -te^{i(\mathbf{i}-\mathbf{j}) \cdot \mathbf{k}}$ (notar que de aquí al final de este trabajo consideraremos las constantes de red iguales a 1), pero dado que solo nos interesa escribir esto en la componente x del momento, entonces solo pasamos al espacio real la componente y . Ahora, visualizaremos la red de la grafeno de la forma como se muestra en la Figura 3.2.2

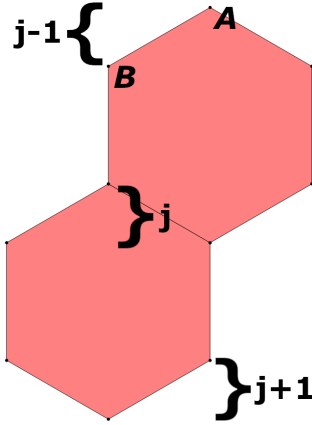


Figura 3.2.2: Esquema para red de grafeno con terminación zig-zag. Denotamos con j filas en la red de grafeno, esto nos permite identificar los saltos en el eje y .

De esta forma, para pasar desde el un punto A en la fila j a un punto B en la fila j , la componente matricial es de la forma (notar que se incluye el término $e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x}$, esto es debido a que en este salto, tenemos dos opciones para pasar a un punto B en la fila j)

$$-te^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x} - te^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x} = -2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) \quad (3.17)$$

En cambio para pasar desde un punto B en la fila j a un punto A en la fila $j+1$, tenemos un término $-t$ ya que no hay componente x y la exponencial es entonces 1. Por otro lado, cada vez que un salto no sea posible, la componente matricial es 0. Luego, el procedimiento es el mismo para cada punto de la red de grafeno con terminación zig-zag.

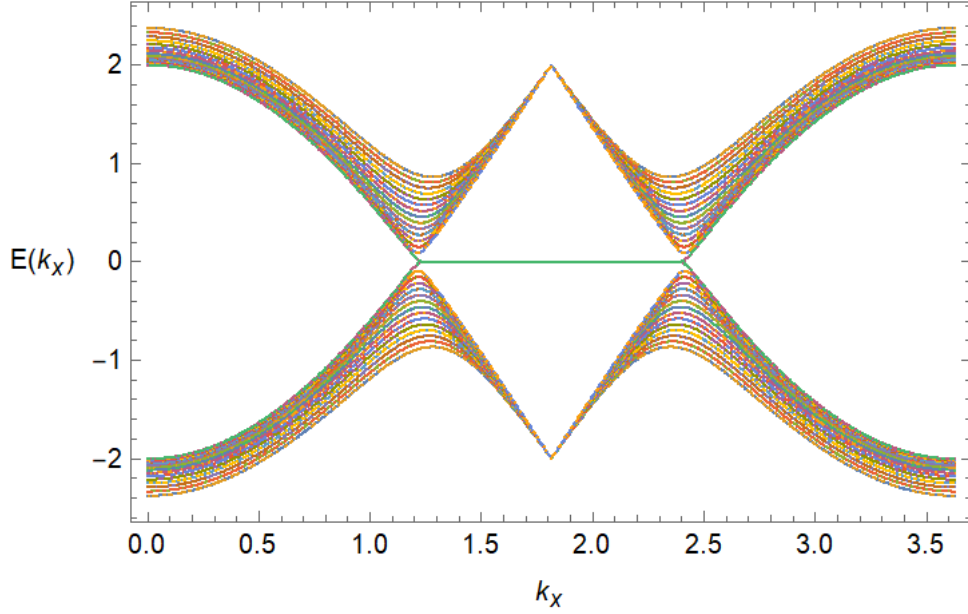


Figura 3.2.3: Estructura de bandas de red de grafeno con terminación zig-zag. Las líneas verdes representan los estados de energía cero en los bordes. Aquí fijamos $t = 2$ y el número de columnas en 100.

De esta forma, escribimos el Hamiltoniano en una base c_j y la forma más pequeña posible que toma este Hamiltoniano es

	$c_{A,j}$	$c_{B,j}$	$c_{A,j+1}$	$c_{B,j+1}$
$c_{A,j}^\dagger$	0	$-2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	0	0
$c_{B,j}^\dagger$	$-2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	0	$-t$	0
$c_{A,j+1}^\dagger$	0	$-t$	0	$-2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$
$c_{B,j+1}^\dagger$	0	0	$-2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	0

Desarrollando un código en *Wolfram Mathematica* se expande esta matriz a más celdas de grafeno (ver Apéndice A1). Así, los valores propios de nuestra matriz Hamiltoniano nos entregan la estructura de bandas del grafeno con terminación zig-zag

Este sistema posee dos estados de energía 0, como se observa en la Figura 3.2.3, están ubicados en $k_x = 2\pi/3$ y $k_x = 4\pi/3$. Estos dos estados corresponden a los bordes superior e inferior de la red, lo que observamos obteniendo los vectores propios de este sistema y, de esta forma, la densidad de probabilidad de encontrar estos estados de energía 0 distribuidos por la red (ver Figura 3.2.4).

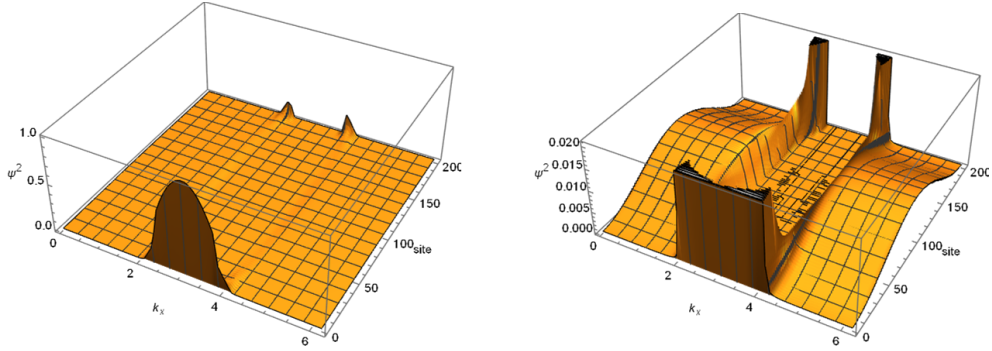


Figura 3.2.4: Densidad de probabilidad para los estados de energía 0 en la terminación zig-zag. Aquí fijamos $t = 2$ y el número de columnas en 100.

3.3. Terminación Silla

En este caso, el procedimiento es el mismo al anterior, pero dada que la terminación es distinta (ver Figura 3.3.1) existen otras formas de realizar los saltos en la red y, debido a la geometría de estos, cambia la matriz Hamiltoniano

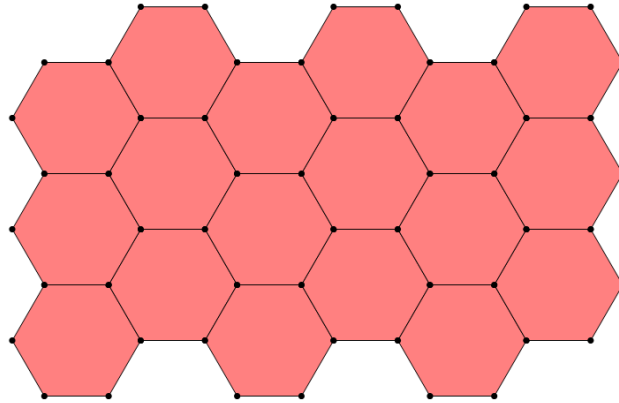


Figura 3.3.1: Red de grafeno con terminación silla. Consideramos que la red es infinita en la dirección x y finita en la dirección y .

El método es el mismo expuesto para la terminación zig-zag. Volvemos a plantear simetría traslacional en el eje x y el Hamiltoniano corresponde con el de la ecuación (3.16). En este caso planteamos una sección de la red de la forma que se muestra en la Figura 3.3.2

Así, para pasar desde un sitio A en la fila j a un sitio B en la fila j , la componente matricial es de la forma

$$-te^{ik_x}. \quad (3.18)$$

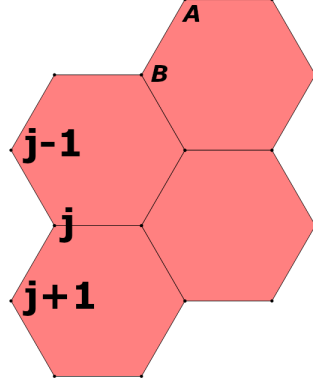


Figura 3.3.2: Esquema para red de grafeno con terminación silla. Denotamos con j filas en la red de grafeno, esto nos permite identificar los saltos en el eje y .

Por otra parte, para pasar de un sitio A en la fila j a un sitio B en la fila $j + 1$, la componente matricial corresponde con

$$-te^{\frac{-ik_x}{2}}. \quad (3.19)$$

Luego, todos los demás tipos de saltos corresponden a conjugaciones complejas de estos dos casos mencionados. Así la forma más pequeña en que puede ser escrito Hamiltoniano en una base c_j es

	$c_{A,j}$	$c_{B,j}$	$c_{A,j+1}$	$c_{B,j+1}$
$c_{A,j}^\dagger$	0	$-te^{-ik_x}$	0	$-te^{\frac{ik_x}{2}}$
$c_{B,j}^\dagger$	$-te^{ik_x}$	0	$-te^{\frac{-ik_x}{2}}$	0
$c_{A,j+1}^\dagger$	0	$-te^{\frac{ik_x}{2}}$	0	$-te^{-ik_x}$
$c_{B,j+1}^\dagger$	$-te^{\frac{-ik_x}{2}}$	0	$-te^{ik_x}$	0

Nuevamente podemos ampliar esta matriz Hamiltoniano a más celdas de grafeno (ver Apendice A2). Calculando los valores propios de la matriz anterior correspondiente al ancho deseado de la red (número de columnas) podemos obtener la estructura de bandas para la red de grafeno con terminación silla, tal como se muestra en la Figura 3.3.3.

Podemos observar como efectivamente existen estados de energía 0 en $k_x = 0$ y $k_x = 2\pi/3$. La diferencia importante es que estos estados no están localizados en el borde de nuestra red. Calculando los vectores propios, al igual que en el terminación anterior, se puede obtener la amplitud de probabilidad de estos estados, esta indica que no están distribuidos en el borde (ver Figura 3.3.4).

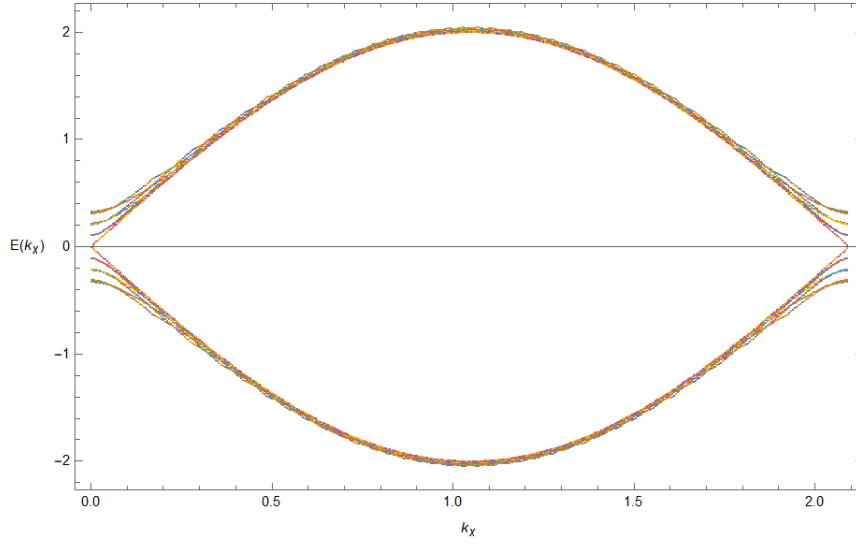


Figura 3.3.3: Estructura de bandas de red de grafeno con terminación silla. tenemos estados de energía 0 en $k_x = 0$ y $k_x = 2\pi/3$. Aquí fijamos $t = 2$ y el número de columnas en 100.

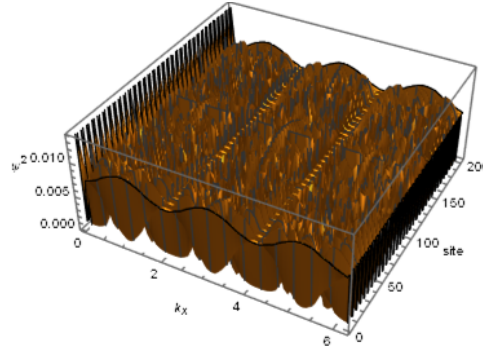


Figura 3.3.4: Densidad de probabilidad para los estados de energía 0 en la terminación silla. Aquí fijamos $t = 2$ y el número de columnas en 100.

Estos estados de energía 0 corresponden a proyecciones de los puntos de Dirac del sistema y existen debido a que la geometría de los bordes no permite estados en estos.

Capítulo 4

Aislante de Chern

Como ya hablamos en el capítulo 2, el primer ejemplo de un aislante topológico es el efecto cuántico de Hall. Luego, la introducción del invariante TKNN muestra que el efecto cuántico de Hall está estrechamente relacionado a un invariante topológico, de tal forma que la conductancia de Hall es proporcional al número de Chern, de aquí nace el nombre aislante de Chern. En este capítulo trabajaremos dos modelos de aislantes de Chern, el modelo Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ) [13] y el modelo Haldane [14] (en ambos modelos no consideraremos espín).

4.1. Ruptura de la Simetría del Tiempo

La inversión del tiempo es una simetría discreta de la forma

$$T : t \rightarrow -t. \tag{4.1}$$

En la capítulo anterior vimos como los puntos de Dirac describen fermiones sin masa de tal forma que mantienen sin brecha el espectro de energía. En esta sección veremos como el introducir masa en estos fermiones abre una brecha en su espectro. Introducir esta masa implica romper la simetría del tiempo. Por supuesto, existen distintas formas de romper esta simetría, en el capítulo 2 esto se lograba introduciendo un campo magnético en el sistema. Ahora, independiente de la forma, la ruptura de la simetría del tiempo implica que el número de Chern es no nulo, lo cual será demostrado más adelante.

4.1.1. Operador de Inversión Temporal para Partículas sin Espín

El operador de inversión temporal cambia la flecha del tiempo, en particular, la inversión temporal conmuta con cualquier simetría espacial. Por otra parte, no es así con el momento, puesto que este depende de la velocidad. Definimos el operador de inversión temporal como una matriz unitaria junto al operador de conjugación compleja

$$T = UK. \quad (4.2)$$

donde U es una matriz unitaria y K es el operador de conjugación compleja, de esta forma tenemos

$$T^2 = UKUK = UU^* = T(U^T)^{-1} = \phi. \quad (4.3)$$

Aquí ϕ es una matriz diagonal de fases, en el que no haya espín, $\phi = 1$. Ahora, nos interesa estudiar que ocurre en redes cristalinas, si hacemos actuar el operador de inversión temporal en nuestros operadores de creación o destrucción tenemos

$$Tc_jT^{-1} = c_j \quad (4.4)$$

Pero en el espacio de momento no es de la misma forma, ya que tenemos $Tc_{\mathbf{k}}T^{-1} = c_{-\mathbf{k}}$. Teniendo en cuenta esto podemos ver que ocurre con los Hamiltonianos de Bloch que son invariantes en inversión del tiempo

$$THT^{-1} = \sum_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}}^\dagger Th(\mathbf{k})T^{-1}c_{-\mathbf{k}} = H = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger h(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}}. \quad (4.5)$$

Lo anterior es válido si se cumple

$$Th(\mathbf{k})T^{-1} = h(-\mathbf{k}). \quad (4.6)$$

4.1.2. Operador de Inversión Temporal para Partículas con Espín

En este caso, dado que las partículas poseen espín $\mathbf{S}$, que esencialmente es momento, tenemos entonces que el espín es impar bajo inversión del tiempo

$$TST^{-1} = -\mathbf{S}. \quad (4.7)$$

Esto nos quiere decir que la dirección del espín se voltea. Representamos esta acción como una rotación de π en torno al eje y . Necesariamente, este operador de inversión temporal toma la forma [15]

$$T = e^{-i\pi S_y} K, \quad (4.8)$$

donde K realiza el complejo conjugado. Para partículas de espín $\frac{1}{2}$ la ecuación anterior se convierte en

$$T = -i\sigma_y K. \quad (4.9)$$

Aquí podemos notar que $T^2 = -1$ explícitamente

$$T^2 = -i\sigma_y i\sigma_y^* K K = -\sigma_y \sigma_y = -1. \quad (4.10)$$

Ahora, dado que $T^2 = -1$ para partículas con espín semientero, entonces $T^{-1} = -T$, así, notamos que para espín $\frac{1}{2}$ se cumple

$$TST^{-1} = -i\sigma_y \mathbf{S}^* K i\sigma_y K = \sigma_y \mathbf{S}^* \sigma_y = -\mathbf{S}. \quad (4.11)$$

4.1.3. Ruptura de la Simetría del Tiempo para Fermiones de Dirac

En dos dimensiones, el modelo para un fermión de Dirac en el continuo es una variante del Hamiltoniano de dos niveles [16]

$$h(\mathbf{k}) = \sum_i^3 d_i(\mathbf{k}) \sigma_i, \quad (4.12)$$

donde σ_i son las matrices de Pauli, $d_1 = k_x$, $d_2 = k_y$ y, si $d_3 = 0$ el Hamiltoniano no posee brecha, mientras que si $d_3 = M$ es constante, el fermión

de Dirac posee brecha. Ahora, si aplicamos el operador de inversión temporal en nuestro Hamiltoniano notamos

$$Th(\mathbf{k})T^{-1} = -\sum_i d_i(\mathbf{k})\sigma_i = -k_x\sigma_x - k_y\sigma_y - M\sigma_z. \quad (4.13)$$

Si queremos conservar la simetría del tiempo es necesario que se cumpla $Th(\mathbf{k})T^{-1} = h(-\mathbf{k})$ [17]. Esto es solo posible si $M = 0$, es decir, cuando el sistema no tiene brecha.

4.1.4. Simetría del Tiempo y Número de Chern

Es importante notar que sistemas sin espín que conservan la simetría del tiempo no pueden tener conductancia de Hall distinta de 0. Para demostrar esto consideramos una banda $|u(\mathbf{k})\rangle$ bajo el nivel de Fermi

$$F_{ij}(-\mathbf{k}) = -i \langle \partial_i u(-\mathbf{k}) | \partial_j u(-\mathbf{k}) \rangle + i \langle \partial_j u(-\mathbf{k}) | \partial_i u(-\mathbf{k}) \rangle. \quad (4.14)$$

Pero es fácil ver que $u(-\mathbf{k}) = Tu(\mathbf{k}) = u(\mathbf{k})^*$. Así tenemos

$$\begin{aligned} F_{ij}(-\mathbf{k}) &= \sum_m [-i\partial_i u_m(-\mathbf{k})^* \partial_j u_m(-\mathbf{k}) + i\partial_j u_m(-\mathbf{k})^* \partial_i u_m(-\mathbf{k})], \\ &= \sum_m [-i\partial_i u_m(\mathbf{k}) \partial_j u_m(\mathbf{k})^* + i\partial_j u_m(\mathbf{k}) \partial_i u_m(\mathbf{k})^*] = -F_{ij}(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (4.15)$$

De esta forma, $F_{ij}(\mathbf{k})$ se comporta de manera impar, esto significa que al integral sobre la zona de Brillouin el número de Chern es 0. Así concluimos que para sistemas sin espín e invariantes bajo inversión temporal, no hay conductancia de Hall. Lo mismo es también cierto cuando consideramos espín [18].

4.2. Modelo BHZ

Este modelo consiste en una generalización en la red cuadrada (ver Figura 4.2.1) del Hamiltoniano de Dirac continuo. Como ya hemos visto, el Hamiltoniano para un aislante sin espín debe tener dos bandas, en este

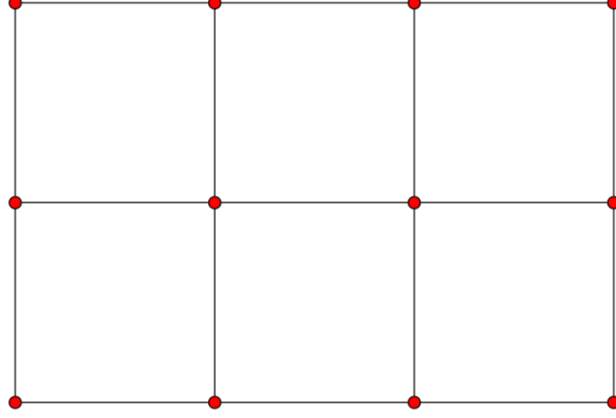


Figura 4.2.1: Red cuadrada. En cada sitio consideramos que hay dos orbitales, s y p .

modelo entonces no consideraremos espín pero plantearemos 2 orbitales por sitio, orbitales p y orbitales s . Luego, la forma general de este Hamiltoniano se mantiene

$$h(\mathbf{k}) = \sum_i d_i(\mathbf{k}) \sigma_i, \quad (4.16)$$

pero ahora $d_i(\mathbf{k}) = (t \sin(k_x), t \sin(k_y), M - 2B(2 - \cos(k_x) - \cos(k_y)))$ y, en consecuencia, el Hamiltoniano se lee como

$$h(\mathbf{k}) = t \sin(k_x) \sigma_x + t \sin(k_y) \sigma_y + [M - 2B(2 - \cos(k_x) - \cos(k_y))] \sigma_z. \quad (4.17)$$

El Hamiltoniano (4.17) tiene brecha en su totalidad excepto para ciertos valores de M (ver Figura 4.2.2): en $M = 0$ no tiene brecha en $(k_x, k_y) = (0, 0)$; en $M = -2$ no tiene brecha en $(k_x, k_y) = (\pi, 0), (0, \pi)$ y en $M = -4$ no posee brecha en $(k_x, k_y) = (\pi, \pi)$. Ahora, por continuidad adiabática, siempre y cuando el Hamiltoniano posea brecha y esta no se cierre, se mantendrá en la misma fase topológica. Variando el parámetro M , este modelo tiene distintas transiciones de fase y, así, diferentes propiedades topológicas.

4.2.1. Fases Triviales: $M/B < 0$ y $M/B > 8$

Caracterizaremos estas fases mediante $\delta_i = \text{sign}[d_3(\mathbf{\Gamma}_i)]$ [19], aquí $\mathbf{\Gamma}_i$ corresponde con los puntos donde se cierra la brecha. En caso de que no haya cambio el número de Chern es 0 y no tenemos conductancia de Hall.

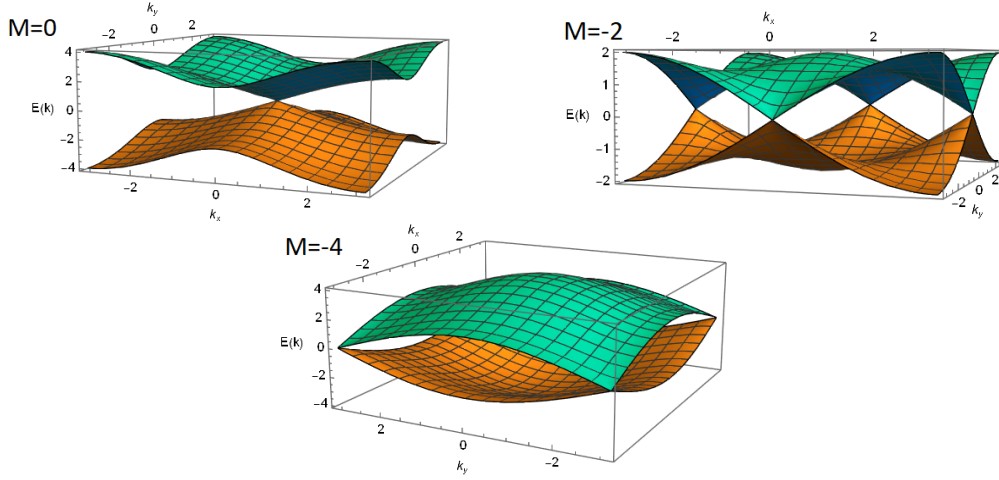


Figura 4.2.2: Estados de energía de 0 en modelo el BHZ para distintos valores de M fijando $B = -1/2$.

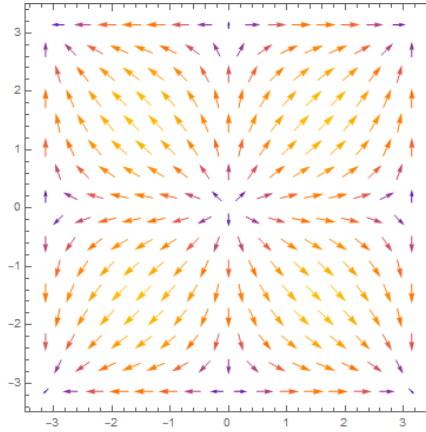


Figura 4.2.3: Gráfico vectorial en el aislante de Chern para los componentes $d_1(k_x) = \sin(k_x)$ y $d_2(k_y) = \sin(k_y)$.

Cuando hay cambio de signo tenemos fases topológicamente no triviales, la naturaleza topológica de estas fases está caracterizada por una fase de Berry de Skyrmion en la zona de Brioullin. Para este caso el número de Chern coincide con el número de Skyrmion [20].

Notamos como ambos regímenes el componente $d_3(\mathbf{k})$ no cambia de signo en la zona de Brioullin, de hecho, en la Figura 4.2.3 observamos el comportamiento de los componentes $d_1(\mathbf{k})$ y $d_2(\mathbf{k})$. Estos estados son entonces topológicamente triviales y corresponden con estados ferromagnéticos de vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$.

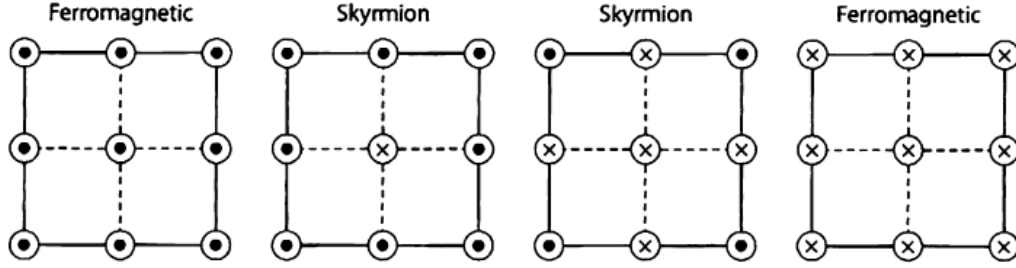


Figura 4.2.4: Distintas fases en el aislante de Chern, de izquierda a derecha tenemos: $M > 0$; $-2 < M < 0$; $-4 > M > -2$; $M < -4$. Aquí fijamos el parametro $B = -1/2$. Dependiendo de si $d_3(\mathbf{k})$ cambia de signo o no en la zona de Brillouin, podemos o no tener configuración de Skyrmion. Los puntos en la imagen corresponde con la dirección positiva del eje z y las cruces con la dirección negativa. [15]

4.2.2. Fases Topológicas: $4 > M/B > 0$ y $8 > M/B > 4$

En ambas de estas fases tenemos cambios de signo, por lo que tenemos fases topológicas no triviales que corresponden con Skyrmion. La componente $d_3(\mathbf{k})$ varía de tal forma que pasamos de la fase con $M = 0$ a $M = -2$ y de $M = -2$ a $M = -4$ con $B = -1/2$. Ambos fases poseen conductancia de Hall no nula. En la Figura 4.2.4 observamos las distintas configuraciones para el aislante de Chern.

4.2.3. Ruptura de la Simetría Traslacional en Eje-y

Dado que k_y ya no es un buen número cuántico para trabajar nuestro sistema, debemos dejar únicamente expresado nuestro sistema en k_x . Para esto hay que llevar al espacio real los términos que tengan k_y en $h(\mathbf{k})$

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_i \psi^\dagger d_i(\mathbf{k}) \sigma_i \psi, \quad (4.18)$$

donde

$$\psi^\dagger = \begin{pmatrix} s_{\mathbf{k}}^\dagger & p_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \quad ; \quad \psi = \begin{pmatrix} s_{\mathbf{k}} \\ p_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

De aquí en adelante, no anotaré la suma en $\mathbf{k}$, se entiende que aún se está sumando. $t\sigma_x \sin(k_x)$ al espacio real

$$\begin{aligned}
t \sin(k_y) \psi^\dagger \sigma_y \psi &= -it \sin(k_y) \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} \right\}, \\
&= \frac{t}{2} (e^{-ik_y} - e^{ik_y}) \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} \right\}, \\
&= \frac{t}{2} e^{-ik_y} \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} \right\} - \frac{t}{2} e^{ik_y} \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} \right\}. \quad (4.20)
\end{aligned}$$

El siguiente paso es pasar los operadores al espacio real, el desarrollo de esto está en el Apéndice B, donde escribo en el espacio real todo el Hamiltoniano del modelo BHZ. De ese cálculo, se tiene que los operadores se pueden escribir de la siguiente forma

$$\frac{t}{2} \left\{ s_{j+1, k_x}^\dagger p_{j, k_x} - p_{j+1, k_x}^\dagger s_{j, k_x} \right\} + \frac{t}{2} \left\{ p_{j-1, k_x}^\dagger s_{j, k_x} - s_{j-1, k_x}^\dagger p_{j, k_x} \right\}. \quad (4.21)$$

Ahora, de la misma forma, pasamos el término $2B \cos(k_y)$ al espacio real

$$\begin{aligned}
2B \cos(k_y) \psi^\dagger \sigma_z \psi &= 2B \cos(k_y) \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} \right\}, \\
&= B (e^{ik_y} + e^{-ik_y}) \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} \right\}, \\
&= B e^{ik_y} \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} \right\} + B e^{-ik_y} \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} \right\}. \quad (4.22)
\end{aligned}$$

Nuevamente usamos lo calculado en el Apéndice B

$$B \left\{ s_{j-1, k_x}^\dagger s_{j, k_x} - p_{j-1, k_x}^\dagger p_{j, k_x} \right\} + B \left\{ s_{j+1, k_x}^\dagger s_{j, k_x} - p_{j+1, k_x}^\dagger p_{j, k_x} \right\}. \quad (4.23)$$

Ahora, vemos que ocurre con el término $t \sin(k_x) \sigma_x$

$$t \sin(k_x) \psi^\dagger \sigma_x \psi = t \sin(k_x) \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} + p_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} \right\} \quad (4.24)$$

Y por último, el término $\Delta \sigma_z$, donde $\Delta = [(M - 4B) + 2B \cos k_x]$

$$\Delta \psi^\dagger \sigma_z \psi = \Delta \left\{ s_{\mathbf{k}}^\dagger s_{\mathbf{k}} - p_{\mathbf{k}}^\dagger p_{\mathbf{k}} \right\}, \quad (4.25)$$

donde al escribirlo de forma matricial, claramente el último término es diagonal. Ahora, la forma más pequeña que puede tomar el Hamiltoniano de

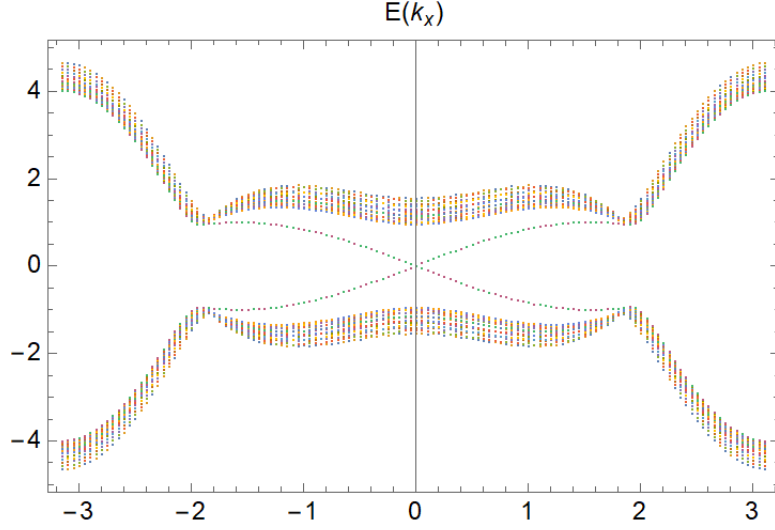


Figura 4.2.5: Estructura de bandas para red cuadrada en el modelo BHZ. Se observa como los dos estados que se cruzan tiene energía 0, estos son los estados localizados en el borde. Aquí fijamos los parámetros $t = 1$, $B = 3$, $M = 8$ y el número de columnas en 100.

forma matricial corresponde con

	s_j	p_j	s_{j+1}	s_{j+1}
$s_j^\dagger$	Δ	$t \sin(k_x)$	B	$-t/2$
$p_j^\dagger$	$t \sin(k_x)$	Δ	$t/2$	-B
$s_{j+1}^\dagger$	B	$t/2$	Δ	$t \sin(k_x)$
$p_{j+1}^\dagger$	$-t/2$	-B	$t \sin(k_x)$	Δ

Tomamos la matriz anterior correspondiente a un ancho deseado de la cinta (número de columnas) y los valores propios de este Hamiltoniano nos entregan la siguiente estructura de bandas que se observa en la Figura 4.2.5.

Como era esperado, tenemos estados de energía 0, estos están localizados en los bordes del material. Ahora, en el caso que rompiéramos la simetría traslacional en el eje- x el desarrollo es totalmente análogo.

4.3. Modelo de Haldane

Este modelo, presentado por Duncan Haldane en 1988 y que fue una de las principales contribuciones que le valieron el premio Nobel en 2016, presenta conductancia de Hall distinta de 0 en la ausencia de un campo magnético externo. Nos aproximaremos a este modelo mediante el método utilizado en el

modelo BHZ pero incluyendo saltos al siguiente vecino más cercano, estos saltos conllevan un término de salto que llamaremos it_2 . De esta forma, es posible romper la simetría del tiempo sin ningún flujo magnético neto que atravesase la celda unidad de un sistema periódico 2D. Esto, por lo tanto, muestra que una condición necesaria para la realización de un estado Hall cuántico es la ruptura de la simetría del tiempo.

4.3.1. Terminación Silla

Trabajaremos el modelo utilizando el mismo método y considerando una terminación silla al igual que en la sección 3.3. Dado que los saltos al vecino más cercano siguen existiendo, los términos correspondientes a estos saltos en la matriz Hamiltoniano se mantienen. Ahora debemos agregar los saltos que se observan en la Figura 4.3.1

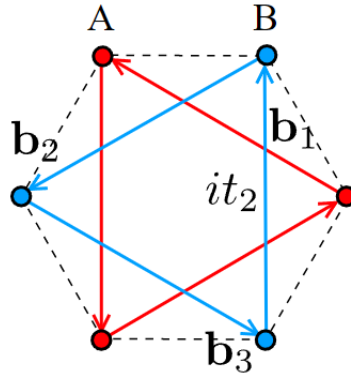


Figura 4.3.1: Hexágono de grafeno con saltos de Haldane. Con la dirección de la flecha se denota la dirección en que el salto es $+it_2$ (en la dirección opuesta se tiene $-it_2$). [21]

Plantaremos el mismo esquema que en la Figura 3.3.2. De esta forma, si queremos realizar los saltos indicados en azul en la Figura 4.3.1. Tenemos 3 saltos, Si queremos pasar desde un sitio B en $j + 1$ al sitio B en $j - 1$ entonces tenemos un componente matricial de it_2 . Luego, tenemos los saltos correspondientes desde un sitio B en $j - 1$ a un sitio B en j , este tiene una contribución de $it_2 e^{\frac{3ik}{2}}$ (para el salto restante es análogo y la contribución es $it_2 e^{-\frac{3ik}{2}}$). Los saltos entre los sitios A son totalmente análogos pero tienen términos $-it_2$. De esta forma, en una base c_j , la forma más pequeña que puede tomar este Hamiltoniano corresponde con

	$c_{A,j}$	$c_{B,j}$	$c_{A,j+1}$	$c_{B,j+1}$	$c_{A,j+2}$	$c_{B,j+2}$
$c_{A,j}^\dagger$	0	$-te^{-ik_x}$	$2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right)$	$-te^{\frac{ik_x}{2}}$	$-it_2$	0
$c_{B,j}^\dagger$	$-te^{ik_x}$	0	$-te^{-\frac{ik_x}{2}}$	$-2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right)$	0	it_2
$c_{A,j+1}^\dagger$	$-2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right)$	$-te^{\frac{ik_x}{2}}$	0	$-te^{-ik_x}$	$2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right)$	$-te^{\frac{ik_x}{2}}$
$c_{B,j+1}^\dagger$	$-te^{-\frac{ik_x}{2}}$	$2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right)$	$-te^{ik_x}$	0	$-te^{-\frac{ik_x}{2}}$	$-2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right)$
$c_{A,j+2}^\dagger$	it_2	0	$-2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right)$	$-te^{\frac{ik_x}{2}}$	0	$-te^{-ik_x}$
$c_{B,j+2}^\dagger$	0	$-it_2$	$-te^{-\frac{ik_x}{2}}$	$2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right)$	$-te^{ik_x}$	0

Desarrollando un código en *Wolfram Mathematica* se expande esta matriz a más celdas de grafeno (ver Apéndice A4). Así, en la Figura 4.3.2, se muestra nuestra estructura de bandas

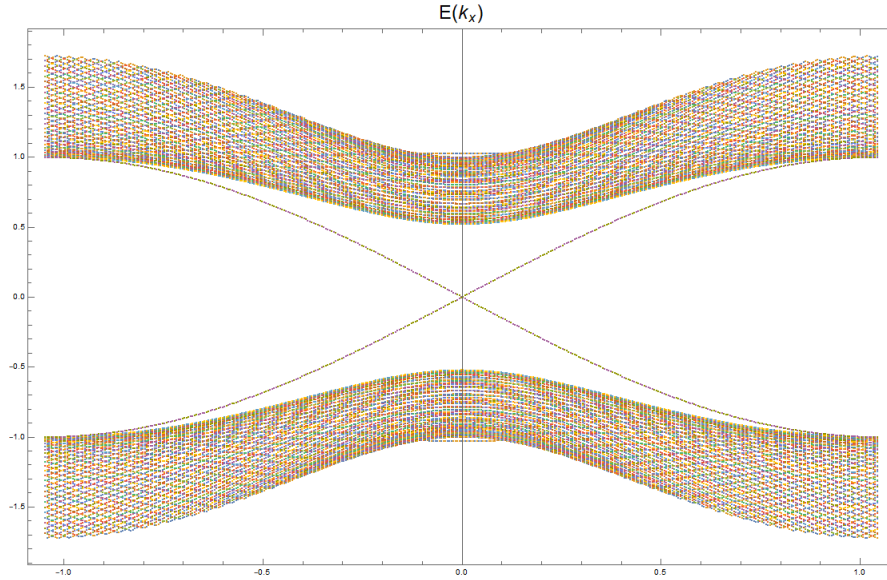


Figura 4.3.2: Estructura de bandas de red de grafeno con terminación silla en el modelo de Haldane. Aquí fijamos $t = 1$, $t_2 = 0,1$ y el número de columnas en 100.

Podemos observar que efectivamente existen estados de energía 0. Esto fue posible mediante la ruptura de la simetría del tiempo, lo importante de esta ruptura es que se logra con flujo magnético neto 0, ya que tenemos flujos magnéticos opuestos generados por los saltos entre los sitios A y B que se introducen en el modelo de Haldane.

4.3.2. Terminación Zig-Zag

Procedemos ahora aplicando el modelo de Haldane con una terminación en forma de zig-zag. Plantearemos el sistema de la misma forma que fue planteado

en la Figura 3.2.2. Dado que ahora poseemos saltos al siguiente vecino más cercano, nos interesan incluir los saltos que se observan en la Figura 4.3.3

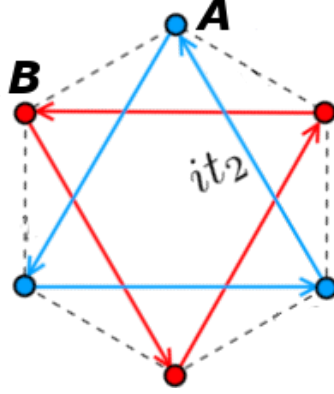


Figura 4.3.3: Saltos en la terminación zig-zag para el modelo de Haldane.

Ahora, tenemos que estudiar 2 tipos de saltos nuevos. Si queremos pasar desde un sitio A a un sitio A en la fila j , entonces tenemos una contribución de la forma

$$h_{11} = it_2 e^{ik_x \sqrt{3}} + \text{c.c} = it_2 e^{ik_x \sqrt{3}} - it_2 e^{-ik_x \sqrt{3}} = -2t_2 \sin(k_x \sqrt{3}) \quad (4.26)$$

El otro tipo de salto es de un sitio A en la fila $j + 1$ a un sitio A en la fila j . Aquí, tenemos una contribución

$$h_{13} = it_2 e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x} - it_2 e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}k_x} = 2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) \quad (4.27)$$

Claramente, los demás saltos son totalmente análogos. Así, la forma más pequeña que toma nuestra matriz Hamiltoniano es

	$c_{A,j}$	$c_{B,j}$	$c_{A,j+1}$	$c_{B,j+1}$
$c_{A,j}^\dagger$	$-t_2 \sin(k_x \sqrt{3})$	$-2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	$2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	0
$c_{B,j}^\dagger$	$-2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	$t_2 \sin(k_x \sqrt{3})$	$-t$	$-2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$
$c_{A,j+1}^\dagger$	$2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	$-t$	$-t_2 \sin(k_x \sqrt{3})$	$-2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$
$c_{B,j+1}^\dagger$	0	$-2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	$-2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right)$	$t_2 \sin(k_x \sqrt{3})$

Finalmente utilizando un código en *Wolfram Mathematica* se expande esta matriz a más celdas de grafeno (ver Apéndice A5). De esta forma, en la Figura 4.3.4, se muestra nuestra estructura de bandas

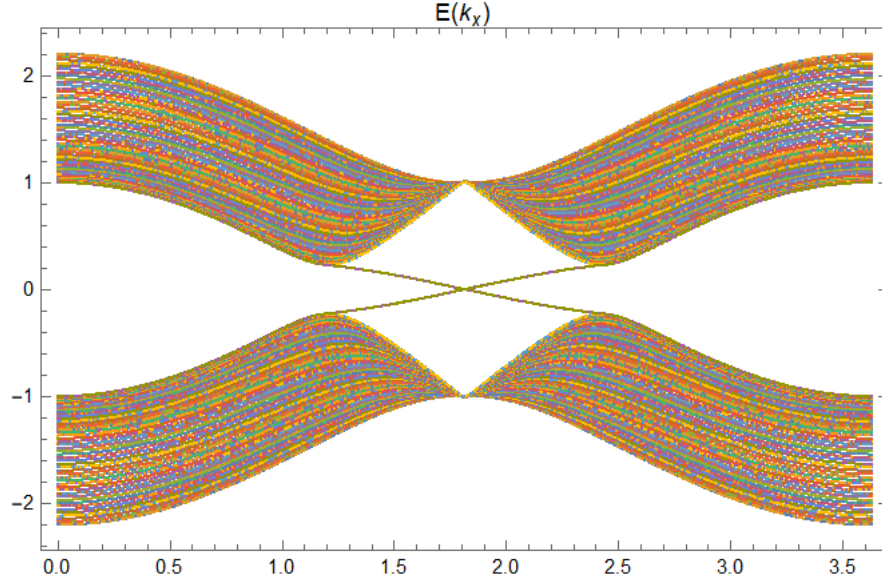


Figura 4.3.4: Estructura de bandas de red de grafeno con terminación zig-zag en el modelo de Haldane. Aquí fijamos $t = 1$, $t_2 = 0,053$ y el número de columnas en 100.

Notamos como también tenemos estado de energía 0, es decir, tenemos conductancia de Hall no nula. Estos estados están localizados en el borde del material.

4.3.3. Masa Trivial en el Modelo de Haldane

En el momento que incluimos una masa trivial m a nuestro Hamiltoniano que ya tiene una *masa topológica* t_2 , podemos observar que existe un cierto punto de transición entre un estado topológicamente no trivial y uno trivial. Como primer ejemplo, incluimos la masa trivial en nuestro Hamiltoniano del modelo de Haldane con terminación silla.

$$\begin{pmatrix} m & -te^{-ik_x} & 2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) & -te^{\frac{ik_x}{2}} & -it_2 & 0 \\ -te^{ik_x} & -m & -te^{-\frac{ik_x}{2}} & -2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) & 0 & it_2 \\ -2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) & -te^{-\frac{ik_x}{2}} & m & -te^{-ik} & 2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) & -te^{\frac{ik_x}{2}} \\ -te^{-\frac{ik_x}{2}} & 2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) & -te^{ik_x} & -m & -te^{-\frac{ik_x}{2}} & -2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) \\ it_2 & 0 & -2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) & -te^{\frac{ik_x}{2}} & m & -te^{-ik} \\ 0 & -it_2 & -te^{-\frac{ik_x}{2}} & 2it_2 \cos\left(\frac{3k_x}{2}\right) & -te^{ik_x} & -m \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

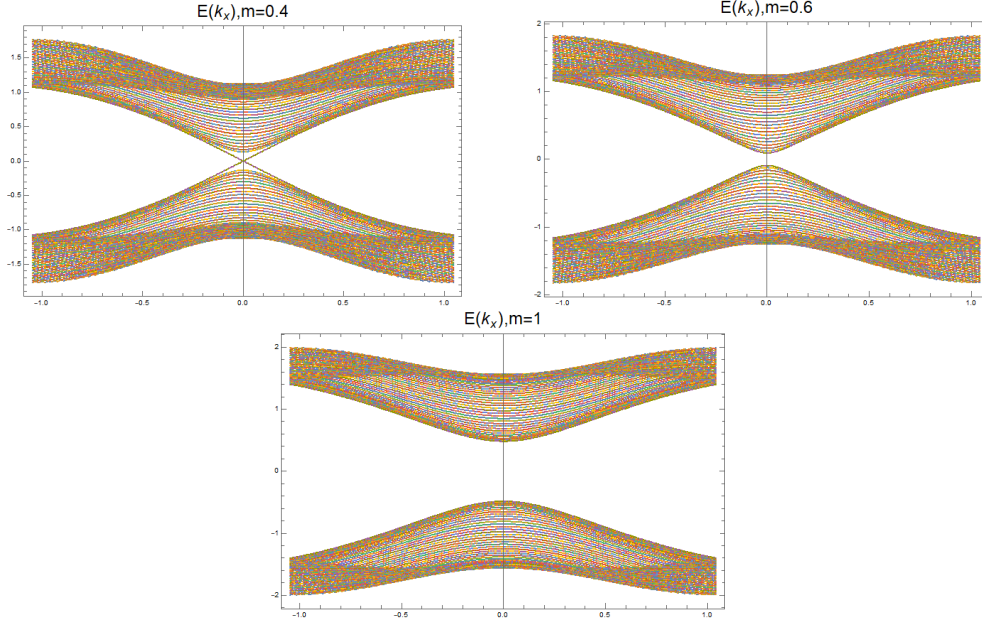


Figura 4.3.5: Estructura de bandas para el modelo de Haldane con distintos valores para la masa trivial con terminación silla. Aquí fijamos $t = 1$, $t_2 = 0,1$ y el número de columnas en 100.

La Figura 4.3.5 nos muestra la estructura de bandas para distintos valores de m . Luego, como segundo ejemplo, introducimos una masa trivial en el Hamiltoniano del modelo de Haldane con terminación zig-zag, de esta forma, tenemos el siguiente Hamiltoniano en forma matricial

$$\begin{pmatrix} -t_2 \sin(\sqrt{3}k_x) - m & -2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) & 2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) & 0 \\ -2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) & t_2 \sin(\sqrt{3}k_x) + m & -t & -2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) \\ 2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) & -t & -t_2 \sin(\sqrt{3}k_x) - m & -2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) \\ 0 & -2t_2 \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) & -2t \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) & t_2 \sin(\sqrt{3}k_x) + m \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Si incluimos la Figura 4.3.2 y la Figura 4.3.4, notamos como a medida que aumentamos la masa trivial se abre una brecha en la estructura de bandas en ambas terminaciones. Debe existir entonces una masa de transición la cual nos separa el estado trivial del no trivial.

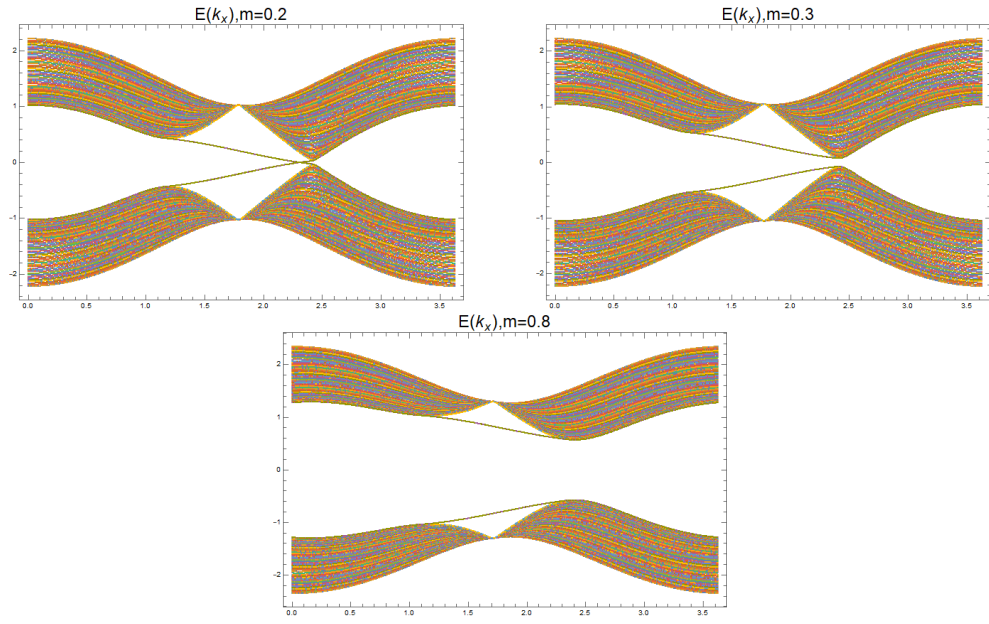


Figura 4.3.6: Estructura de bandas para el modelo de Haldane con distintos valores para la masa trivial con terminación zig-zag. Aquí fijamos $t = 1$, $t_2 = 0,053$ y el número de columnas en 100.

Capítulo 5

Invariante Z_2

Hasta ahora hemos visto como la ruptura de la simetría del tiempo nos permite obtener aislantes no triviales con conductancia de Hall distinta de 0. Hubo un tiempo donde se pensaba que no podía existir estados topológicamente no triviales manteniendo las simetrías intactas, pasados 15 años del la publicación del modelo de Haldane, se demostró que existen sistemas igual de interesantes sin necesariamente romper las simetrías. Kane y Mele [22, 23] notaron como introduciendo espín al modelo de Haldane para el aislante de Chern se obtiene un aislante que mantiene la simetría de inversión temporal pero tiene estados sin brecha en el borde. Ahora, veremos impronta física de estados que se propagan en dirección opuestas a lo largo del borde de un material (ver Figura 2.4.1). Estos estados están protegidos de abrir una brecha debido a la simetría de inversión temporal siempre y cuando exista un número impar de estados, en consecuencia un número par de estos de borde no están protegidos de abrir una brecha. Estos modos en los estados de borden son los que caracterizaremos mediante un orden Z_2 .

5.1. Aislante Topológico Z_2

Como ya sabemos, la conductancia de Hall es distinta de 0 solo cuando se rompe la simetría del tiempo. Lo notable es que, la interacción espín-orbita permite diferentes clases topológicas de estructuras de bandas para aislantes cuando al simetría del tiempo no se rompe [23]. Entonces, nos interesa estudiar que ocurre con la simetría de inversión temporal T para partículas de espín $\frac{1}{2}$.

En la sección 4.1.2 vimos que para partículas de espín $\frac{1}{2}$ el cuadrado del

operador de inversión temporal es $T^2 = -1$, esto da paso a un importante teorema, el llamado teorema de Kramers, llamado así en honor al físico holandés Hendrik Kramers. Procedemos entonces planteando $|\psi\rangle$, un auto-estado de una partícula de energía E . Si nuestro Hamiltoniano es invariante bajo inversión temporal $[T, H] = 0$, entonces $T|\psi\rangle$ también es auto-estado con energía E . Probando que $|\psi\rangle$ y $|T\psi\rangle$ son ortogonales, entonces el espectro está doblemente degenerado

$$\begin{aligned}\langle\psi|T\psi\rangle &= \sum_{m,n} \psi_m U_{mn} K \psi_n = \sum_{m,n} \psi_m U_{mn} \psi_n^* \\ &= \sum_{m,n} \psi_n^* (-1) U_{nm} K \psi_m = -\langle\psi|T\psi\rangle.\end{aligned}\quad (5.1)$$

Esto nos indica que $\langle\psi|T\psi\rangle = 0$. Entonces, el teorema de Kramers establece que todos los auto-estados de un Hamiltoniano invariante bajo inversión temporal están, al menos, doblemente degenerados.

Ahora, para Hamiltonianos de Bloch invariantes bajo inversión temporal se debe cumplir

$$Th(\mathbf{k})T^{-1} = h(-\mathbf{k}) \quad (5.2)$$

Claramente, ya que no se ha roto la simetría de inversión temporal, el invariante TKNN es $C = 0$ pero ahora tenemos otro invariante con dos posibles valores, $\nu = 0$ o $\nu = 1$ [23]. Este invariante nos indica si el sistema es topológicamente no trivial ($\nu = 1$) o topológicamente trivial ($\nu = 0$), es decir, hay dos clases topológicas.

En la Figura 5.1.1 se muestra la mitad de la zona de Brioullin $0 < k_x < \pi/a$ para este aislante 2D invariante bajo inversión temporal, se muestra solo la mitad puesto que la simetría de T requiere que la otra mitad sea su reflejo. Si tenemos estados de energía 0 en el borde, el teorema de Kramers nos indica que estos están doblemente degenerados. Hay dos formas en que los estados en $k_x = 0$ y π/a se pueden conectar. En la Figura 5.1.1(a), tenemos un número par de estados, en este caso, los estados de borde pueden ser eliminados entre ellos. Por otra parte, en la Figura 5.1.1, hay una cantidad impar de estados, aquí la totalidad de estados de borde no pueden ser eliminados. Ahora, dado que cada banda que intersecta E_F en k_x tiene un par de Kramers en $-k_x$, la correspondencia bulto-borde relaciona el número de pares de Kramers de

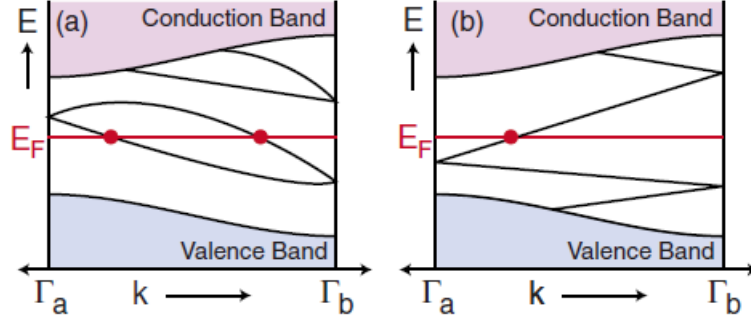


Figura 5.1.1: Dispersión electrónica entre dos puntos degenerados de Kramers en el borde $\Gamma_a = 0$ y $\Gamma_b = \pi/a$. En (a), el número de estados de superficie que cruzan la energía de Fermi E_F es par, mientras que en (b) es impar. Un número impar de cruces lleva a estados topológicos protegidos en el borde. [18]

estados de borde con el cambio en el invariante Z_2 a lo largo de la interfaz

$$N_K = \Delta\nu \bmod 2. \quad (5.3)$$

Existen diferentes formas de obtener una expresión matemática para el invariante ν .

Si también existen otras simetrías en el cristal, como por ejemplo, el cristal conserva la dirección perpendicular del espín S_z , entonces el espín arriba y el espín abajo tienen números de Chern independientes $C_\uparrow$, $C_\downarrow$. La simetría T requiere la suma del número de Chern sea 0 pero la diferencia $n_\sigma = (C_\uparrow - C_\downarrow)/2$ define conductividad de Hall con espín cuantizada [24], así invariante Z_2 se puede escribir como

$$\nu = n_\sigma \bmod 2. \quad (5.4)$$

Por último, en dos dimensiones, el llamado aislante de Hall con espín fue correctamente teorizado en el año 2006 por Bernevig, Hughes y Zhang [13] en el sistema de pozo cuántico HgTe/CdTe para luego, un año después, ser observado en estructuras de pozo cuántico de HgCdTe [25].

Capítulo 6

Conclusiones y Trabajo Futuro

A partir de este trabajo, mostramos como la ruptura de simetrías en sistemas cristalinos 2D inducen estados topológicamente no triviales en el marco del modelo de enlace fuerte. Desde el invariante TKNN [7], demostramos como el efecto cuántico de Hall corresponde a un invariante topológico, el número de Chern.

Hemos visto como existen distintas formas de romper simetrías las cuales inducen estados topológicos no triviales. Mostramos como en el modelo de Haldane [14] introducir saltos al siguiente vecino más cercano rompe la simetría del tiempo, lo que induce estados de borde de energía 0. También rompimos la simetría del tiempo en el modelo BHZ [13] introduciendo un término $d_3(\mathbf{k})$ en nuestro Hamiltoniano y observamos que, según ciertos parámetros, existen estados topológicamente no triviales que corresponden con estados de Skyrmion del vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$.

No obstante, estudiamos como aún pueden existir estados topológicamente no triviales sin la necesidad de la ruptura de la simetría del tiempo. El invariante Z_2 [22, 23] exhibe estados no triviales mediante la consideración del espín y las consecuencias que esto y el teorema de Kramers conllevan.

Como próximo trabajo esperamos estudiar la existencia y comportamiento de aislantes topológicos en sistemas amorfos, los cuales consisten en un conjunto de sitios distribuidos aleatoriamente en el espacio [26–28]. También buscaremos encontrar una conexión entre fases topológicas y cuasicristales, estos últimos son estructuras ordenadas pero no periódicas [29–32].

Bibliografía

- [1] J E Avron, R Seiler, and L G Yaffe. Communications in Mathematical Adiabatic Theorems and Applications to the Quantum Hall Effect. *Commun. Math. Phys*, 110:33–49, 1987.
- [2] K. V. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Physical Review Letters*, 45(6):494–497, 1980. ISSN 00319007. doi: 10.1103/PhysRevLett.45.494.
- [3] Press release. NobelPrize.org. Nobel Prize Outreach AB 2021. Wed. 17 Nov 2021. <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1998/press-release/>.
- [4] E. H. Hall. On a New Action of the Magnet on Electric Currents. *American Journal of Mathematics*, 2(3):287, 1879. ISSN 00029327. doi: 10.2307/2369245.
- [5] Avi Karsenty. A comprehensive review of integrated hall effects in macro-, micro-, nanoscales, and quantum devices. *Sensors (Switzerland)*, 20(15): 1–33, 2020. ISSN 14248220. doi: 10.3390/s20154163.
- [6] David Tong. The Quantum Hall Effect. <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qhe.html>, 2016.
- [7] D J Thouless, M Kohmoto, M P Nightingale, and M den Nijs. Quantized Hall conductance in a two dimensional periodic potential. 124(1-3):199–210, 1982. ISSN 03784371. doi: 10.1016/0378-4371(84)90239-5.
- [8] Qian Niu, D. J. Thouless, and Yong-Shi Wu. Quantized Hall Conductance as a Topological Invariant. *Phys. Rev. B*, 31:3372–3377, 1985. doi: 10.1103/PhysRevB.31.3372.
- [9] Eduardo Fradkin. *Field Theories of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 2015.
- [10] Jainendra K. Jain. *Composite Fermions*. Cambridge University Press, 2007.
- [11] K S Novoselov, A K Geim, S V Morozov, D Jiang, Y Zhang, S V Dubonos, I V Grigorieva, and A A Firsov. Electric Field Effect in Atomically Thin

- Carbon Films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004. doi: 10.1126/science.1102896.
- [12] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M.R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):109–162, 2009. ISSN 00346861. doi: 10.1103/RevModPhys.81.109.
 - [13] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou Cheng Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells. *Science*, 314(5806):1757–1761, 2006. ISSN 00368075. doi: 10.1126/science.1133734.
 - [14] F. D.M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Physical Review Letters*, 61(18):2015–2018, 1988. ISSN 00319007. doi: 10.1103/PhysRevLett.61.2015.
 - [15] B. Andrei Bernevig and Taylor L. Hughes. *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton University Press, 2013.
 - [16] Shun-Qing Shen. *Topological insulators: Dirac Equation in Condensed Matters*. Springer, 2017.
 - [17] Ching Kai Chiu, Jeffrey C.Y. Teo, Andreas P. Schnyder, and Shinsei Ryu. Classification of topological quantum matter with symmetries. *Reviews of Modern Physics*, 88(3):1–63, 2016. ISSN 15390756. doi: 10.1103/RevModPhys.88.035005.
 - [18] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium: Topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, 82(4):3045–3067, 2010. ISSN 00346861. doi: 10.1103/RevModPhys.82.3045.
 - [19] Robert Jan Slager, Andrej Mesaros, Vladimir Juričić, and Jan Zaanen. The space group classification of topological band-insulators. *Nature Physics*, 9(2):98–102, 2013. ISSN 17452481. doi: 10.1038/nphys2513.
 - [20] Vladimir Juričić, Andrej Mesaros, Robert Jan Slager, and Jan Zaanen. Universal probes of two-dimensional topological insulators: Dislocation and π flux. *Physical Review Letters*, 108(10), 2012. ISSN 00319007. doi: 10.1103/PhysRevLett.108.106403.
 - [21] Topology course team. Haldane model, Berry curvature, and Chern number. https://topocondmat.org/w4_haldane/haldane_model.html#second-try, 2021.
 - [22] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum Spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22):1–4, 2005. ISSN 00319007. doi: 10.1103/PhysRevLett.95.226801.

- [23] C. L. Kane and E. J. Mele. Z₂ topological order and the quantum spin hall effect. *Physical Review Letters*, 95(14):1–4, 2005. ISSN 00319007. doi: 10.1103/PhysRevLett.95.146802.
- [24] D. N. Sheng, Z. Y. Weng, L. Sheng, and F. D.M. Haldane. Quantum spin-hall effect and topologically invariant chern numbers. *Physical Review Letters*, 97(3):1–4, 2006. ISSN 00319007. doi: 10.1103/PhysRevLett.97.036808.
- [25] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao Liang Qi, and Shou Cheng Zhang. Quantum spin hall insulator state in HgTe quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770, 2007. ISSN 00368075. doi: 10.1126/science.1148047.
- [26] Adhip Agarwala and Vijay B. Shenoy. Topological Insulators in Amorphous Systems. *Physical Review Letters*, 118(23):1–6, 2017. ISSN 10797114. doi: 10.1103/PhysRevLett.118.236402.
- [27] Adhip Agarwala, Vladimir Juričić, and Bitan Roy. Higher-order topological insulators in amorphous solids. *Physical Review Research*, 2(1):1–6, 2020. ISSN 26431564. doi: 10.1103/PhysRevResearch.2.012067.
- [28] Noah P. Mitchell, Lisa M. Nash, Daniel Hexner, Ari M. Turner, and William T.M. Irvine. Amorphous topological insulators constructed from random point sets. *Nature Physics*, 14(4):380–385, 2018. ISSN 17452481. doi: 10.1038/s41567-017-0024-5. URL <http://dx.doi.org/10.1038/s41567-017-0024-5>.
- [29] Yaacov E. Kraus and Oded Zilberberg. Topological equivalence between the fibonacci quasicrystal and the harper model. *Physical Review Letters*, 109(11):1–5, 2012. ISSN 00319007. doi: 10.1103/PhysRevLett.109.116404.
- [30] Yaacov E. Kraus, Yoav Lahini, Zohar Ringel, Mor Verbin, and Oded Zilberberg. Topological states and adiabatic pumping in quasicrystals. *Physical Review Letters*, 109(10):1–5, 2012. ISSN 00319007. doi: 10.1103/PhysRevLett.109.106402.
- [31] Rui Chen, Chui Zhen Chen, Jin Hua Gao, Bin Zhou, and Dong Hui Xu. Higher-Order Topological Insulators in Quasicrystals. *Physical Review Letters*, 124(3):36803, 2020. ISSN 10797114. doi: 10.1103/PhysRevLett.124.036803. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.124.036803>.
- [32] Huaqing Huang and Feng Liu. Quantum Spin Hall Effect and Spin Bott Index in a Quasicrystal Lattice. *Physical Review Letters*, 121(12):126401, 2018. ISSN 10797114. doi: 10.1103/PhysRevLett.121.126401. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.126401>.

Apéndice A

Códigos Wolfram Mathematica

A1. Terminación Zig-Zag

Lo primero es definir la matriz triangular superior. Luego, se obtiene la matriz completa sumando el complejo conjugado

```
In[1]:= top[n_,t_,k_]:=DiagonalMatrix[Flatten[
  {Table[{-tExp[I  $\frac{\sqrt{3}}{2}$ k]-tExp[-I  $\frac{\sqrt{3}}{2}$ k],-t},{i,1,n}],
  -tExp[I  $\frac{\sqrt{3}}{2}$ k]-tExp[-I  $\frac{\sqrt{3}}{2}$ k]}],1];
Ht_,n[k_]:=ConjugateTranspose[top[n, t, k]] + top[n, t, k];
Assuming[t ∈ Reals, k ∈ Reals[,Ht_,3[k] // FullSimplify];
```

Definimos un lista con los valores propios y luego somos capaces de crear la Figura 3.2.3

```
In[2]:= data_{a_,b_,c_}[t_,n_]:=Transpose[Table[({k, #} &) /@ Eigenvalues
  [Ht_,n[k]], {k, a, b, c}]];

In[3]:= ListPlot[Take[data_{0,2π,0.0005}[2, 100], -30], PlotStyle ->
  PointSize[Tiny], Frame -> True, PerformanceGoal -> "Quality",
  FrameLabel ->{"k_x", "E(k_x)"}, RotateLabel -> False, LabelStyle ->
  Black]
```

A2. Terminación Silla

Lo primero es definir la matriz triangular superior. Luego, se obtiene la matriz completa sumando el complejo conjugado

```
In[4]:= prva[n_,t_,k_]:=DiagonalMatrix[Flatten[
  {Table[{-tExp[-Ik],-tExp[-Ik/2]},{i,1,n}],
  -tExp[-Ik]}],1];
druga[n_,t_,k_]:=DiagonalMatrix[Flatten[
  {Table[{-tExp[Ik/2],0},{i,1,n}],
  -tExp[Ik]}],3];
treca[n_,t_,k_]:=prva[n,t,k]+druga[n,t,k];
hamACt,n[k_]:=ConjugateTranspose[treca[n,t,k]] + treca[n,t,k];
Assuming[t ∈ Reals, k ∈ Reals[,Ht,3[k] // FullSimplify];
```

Definimos un lista con los valores propios y luego somos capaces de crear la Figura 3.3.3

```
In[5]:= dataAC{a,b,c}[t_,n_]:=Transpose[Table[(k, #) &)/@ Eigenvalues
  [hamACt,n[k]], {k, a, b, c}]];

In[6]:= ListPlot[Take[dataAC{0,2π/3,0.0005}[2, 100], -14], PlotStyle ->
  PointSize[Tiny], Frame -> True, PerformanceGoal -> "Quality",
  FrameLabel ->{"kx", "E(kx)"}, RotateLabel -> False, LabelStyle ->
  Black]
```

A3. Modelo BHZ

Escribimos matriz triangular superior y con esto la matriz completa (ecuación (??))

```
In[7]:= topBHZ[n_,t_,kx_,B_]:=DiagonalMatrix[
  Flatten[{Table[
  {t Sin[kx],t/2},{i,1,n}],tSin[kx]}],1] +
  DiagonalMatrix[Flatten[{Table[{B, -B}, {i, 1, n}]}], 2] +
  DiagonalMatrix[Flatten[{Table[{-t/2, 0},{i,1,n-1}],-t/2 }],3];
```

```

In[8]:= Ht,n [kx,B,m]:=ConjugateTranspose[topBHZ[n,t,kx,B]]
+topBHZ[n,t,kx,B]+DiagonalMatrix[
Flatten[{Table[{m-4B+2BCos[kx],-(m-4B+2BCos[kx])},{i,1,n+1}]}],0];
Assuming[{t ∈ Reals, kx ∈ Reals, B ∈ Reals},
HBHZt,2 [kx,B,m]//FullSimplify]

```

Creamos una lista con los valores propios de nuestra matriz para crear la Figura 4.2.5

```

In[9]:= dataBHZa,b,c [t,n,B,m]:=Transpose[Table[{kx,#}&)/@
Eigenvalues[HBHZt,n [kx,B,m]],{kx,a,b,c}]];

In[10]:= ListPlot[Take[dataBHZ-π,π,0.05 [1,100,3,8],-30],
PlotStyle->PointSize[Tiny],Axes->{False,True},
Frame->True,PerformanceGoal->"Quality",AxesLabel->{"kx","E(kx)"}]

```

A4. Modelo Haldane Terminación Silla

Definimos la matriz Hamiltoniano mediante

```

In[11]:= prva[n_, t_, k_]:=DiagonalMatrix[Flatten[{Table[{-tExp[-Ik],
-tExp[-I k/2]},{i,1,n}], -t Exp[-I k]}], 1];

In[12]:= druga[n_, t_, k_]:=DiagonalMatrix[Flatten[{Table[{-tExp[I k/2],0},
{i,1,n-1}], -tExp[I k/2]}],3];

In[13]:= treca[n_, t_, k_]:=prva[n,t,k]+druga[n,t,k];

In[14]:= hamAC{t,n} [k_]:=ConjugateTranspose[treca[n,t,k]]+treca[n,t,k];
Assuming[t∈Reals,k∈Reals[,hamAC{t,2} [k]//FullSimplify]

```

Creamos una lista con los valores propios de nuestra matriz para crear la Figura 4.3.2

```

In[15]:= dataAC{a,b,c} [t,n_]:=Transpose[Table[{k,#}&)/@Eigenvalues[hamACt,n [k]], k, a, b, c]];

In[16]:= ListPlot[Take[dataAC{0,2π/3,0.05} [2,100],-14],PlotStyle->PointSize[Tiny],
Frame->True,PerformanceGoal->"Quality",FrameLabel->{"kx","E(kx)"},
RotateLabel->False,LabelStyle->Black]

```

A5. Modelo de Haldane Terminación Zig-Zag

Planteamos la matriz Hamiltoniano mediante

```

In[17]:= Haldanezigzag[n_,t_,k_,t2_]:=DiagonalMatrix[
  Flatten[{Table[{-t Exp[I k Sqrt[3]/2]-t Exp[-Ik Sqrt[3]/2],-t},
    {i,1,n}],-tExp[IkSqrt[3]/2]-tExp[-IkSqrt[3]/2]}],1]
  +(1/2)DiagonalMatrix[Flatten[{Table[{-m - t2 Sin[k Sqrt[3]],
    m+t2 Sin[k Sqrt[3]]}, {i, 1, n + 1}]}], 0]+
  DiagonalMatrix[Flatten[{Table[{2 t2 Sin[k Sqrt[3]/2],
    -2t2 Sin[k Sqrt[3]/2}, {i, 1, n}]}], 2];

In[18]:= HZZt,n[k_,t2_]:=ConjugateTranspose[Haldanezigzag[n,t,k,t2]]
  +Haldanezigzag[n,t,k,t2];Assuming[{t∈Real,k∈Reals,t2inReals}
  ,HZZt,3[k,t2]//FullSimplify

```

Creamos una lista con los valores propios de nuestra matriz para crear la Figura 4.3.4

```

In[19]:= dataHZZ{a,b,c}[t_,n_,t2_]:=Transpose[Table[({k, #}&)/
  @Eigenvalues[HZZt,n[k,t2]],{k,a,b,c}]];

In[20]:= ListPlot[Take[dataHZZ{0,2π/Sqrt[3],0.005}[1, 100,.053],-100],
  PlotStyle->PointSize[Tiny],Axes->False,True->,Frame->True,
  RotateLabel->False,PerformanceGoal->"Quality",
  PlotLabel->Style["E(kx)",12],LabelStyle->Black]

```

Apéndice B

Cálculo BHZ

B1. Cálculo BHZ

Nos interesa expresar cada término de este Hamiltoniano en el espacio real

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left[(c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sigma_x c_{\mathbf{k}} \sin k_x) + (c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sigma_y c_{\mathbf{k}} \sin k_y) + \left((M - 2B(2 - \cos k_x - \cos k_y)) c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sigma_z c_{\mathbf{k}} \right) \right], \quad (\text{B.1})$$

El primer término viene dado por

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sigma_x c_{\mathbf{k}} \sin k_x &= \frac{1}{2i} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{jl} [e^{ik_x} - e^{-ik_x}] e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_l} c_l^{\dagger} \sigma_x c_j, \\ &= \frac{1}{2i} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{jl} [e^{ik_x} - e^{-ik_x}] e^{-ik_x j_x} e^{-ik_y j_y} e^{ik_x l_x} e^{ik_y l_y} c_l^{\dagger} \sigma_x c_j, \\ &= \frac{1}{2i} \sum_{k_x} \sum_{jl} [e^{ik_x} - e^{-ik_x}] e^{-ik_x(j_x - l_x)} \delta_{j_y, l_y} c_l^{\dagger} \sigma_x c_j, \\ &= \frac{1}{2i} \sum_{k_x} \sum_{jl} \left[e^{-ik_x(j_x - 1 - l_x)} \delta_{j_y, l_y} c_l^{\dagger} \sigma_x c_j - e^{-ik_x(j_x + 1 - l_x)} \delta_{j_y, l_y} c_l^{\dagger} \sigma_x c_j \right], \\ &= \frac{1}{2i} \sum_{jl} \left[\delta_{j_x - 1, l_x} \delta_{j_y, l_y} c_l^{\dagger} \sigma_x c_j - \delta_{j_x + 1, l_x} \delta_{j_y, l_y} c_l^{\dagger} \sigma_x c_j \right], \\ &= \frac{1}{2i} \sum_j \left(c_{j_x - 1, j_y}^{\dagger} \sigma_x c_j - c_{j_x + 1, j_y}^{\dagger} \sigma_x c_j \right). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

El desarrollo para el segundo término es totalmente análogo

$$\sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sigma_y c_{\mathbf{k}} \sin k_y = \frac{1}{2i} \sum_j \left(c_{j_x, j_y-1}^{\dagger} \sigma_y c_j - c_{j_x, j_y+1}^{\dagger} \sigma_y c_j \right). \quad (\text{B.3})$$

Siguiendo la misma idea y considerando $\Delta = M - 2B(2 - \cos k_x - \cos k_y)$, el último término es

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \Delta c_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sigma_z c_{\mathbf{k}} &= M \sum_j c_j^{\dagger} \sigma_z c_j - 4B \sum_j c_j^{\dagger} \sigma_z c_j \\ &\quad + B \sum_j \left(c_{j_x, j_y+1}^{\dagger} \sigma_z c_j + c_{j_x, j_y-1}^{\dagger} \sigma_z c_j \right) \\ &\quad + B \sum_j \left(c_{j_x+1, j_y}^{\dagger} \sigma_z c_j + c_{j_x-1, j_y}^{\dagger} \sigma_z c_j \right). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$