



Universidad Técnica Federico Santa María
Departamento de Física

Caracterización de Estados Ligados en el Continuo en Sistemas de Enlace Fuerte Unidimensionales con Geometría Cerrada

Clemente José Manuel Becerra Foradori

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

Enero 2026

Santiago, Chile

Profesores Guía:

Dr. Pedro Orellana

Dr. David Zambrano

Dr. Juan Pablo Ramos



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): Memoria o trabajo de título Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Caracterización de Estados Ligados en el Continuo en Sistemas de Enlace Fuerte Unidimensionales con Geometría Cerrada

Nombre del candidato(a): Clemente José Manuel Becerra Foradori

Carrera / Grado: Licenciatura en Física

Campus: San Joaquín **Departamento:** Departamento de Física

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Pedro Orellana Dinamarca, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

6 meses 12 meses 2 años 3 años 5 años 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 05-05-2026 Firma: _____

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 05-05-2026 Firma: _____

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

Agradecimientos

A mi familia, a pesar de que no existen palabras para poder expresar con precisión la inmensa gratitud que les tengo a mis padres Luis y Paulina, y a mis hermanos Joaquín, Consuelo y Amparo. Solo sé que cada uno de ellos es una razón por la cual he podido llegar hasta este punto de mi vida, y cada uno es una inspiración para seguir adelante.

A mis profesores guía, los cuales me brindaron las herramientas, la motivación y exigencia necesarias para realizar este trabajo.

A mis amigos, por esas tardes (im)productivas de estudio en la universidad, por su compañía, y por la competitividad que mostraban para lograr sacar la mejor versión como estudiante y persona.

Finalmente, quiero agradecer particularmente a Miguel y Víctor, quienes, sin saberlo, han sido el soporte en momentos difíciles personales y familiares.

Resumen

En este trabajo se estudia la aparición y las propiedades de estados ligados en el continuo (BICs) en sistemas unidimensionales descritos mediante modelos de enlace fuerte. En particular, se analiza una cadena tipo Su–Schrieffer–Heeger (SSH) acoplada a un punto cuántico, considerando tanto el régimen hermítico como la inclusión efectiva de no hermiticidad a través de acoplamientos a contactos externos. El estudio se centra en la identificación del origen físico de los BICs, su relación con las simetrías del sistema y su manifestación en propiedades espectrales y de transporte.

Utilizando formalismos complementarios basados en la ecuación de autovalores de Hamiltonianos matriciales, funciones de onda y funciones de Green, se derivan condiciones analíticas para la formación de BICs asociados a autoestados de la cadena aislada. Se muestra que estos estados pueden entenderse como resultado de interferencia destructiva en los canales de acoplamiento, y que su existencia está fuertemente ligada a la simetría de inversión espacial y la simetría quiral del sistema. Además, se analiza la respuesta de estos estados frente a perturbaciones de la simetría del sistema, evidenciando una notable robustez de ciertos BICs incluso ante transformaciones geométricas y acoplamientos asimétricos. Usando el concepto de sub-simetrías, se concluye que el estado robusto corresponde a un BIC de origen topológico, protegido por la simetría quiral de la cadena SSH.

Los resultados obtenidos permiten distinguir entre diferentes mecanismos de formación de BICs y aportan una interpretación clara de su estabilidad desde una perspectiva de simetría y estructura efectiva del Hamiltoniano. Este estudio contribuye a una comprensión más profunda de los BICs en modelos discretos simples, estableciendo un marco conceptual útil para su análisis en sistemas cuánticos más complejos.

Índice General

1. Introducción y Conceptos Previos	3
1.1. Introducción	3
1.2. Estados ligados en el continuo	5
1.3. Modelo de Enlace Fuerte Unidimensional	8
1.4. Cadena Su-Schrieffer-Heeger	10
1.4.1. Simetrías Modelo SSH	11
1.4.2. Topología Modelo SSH	12
1.4.3. Estados de Borde	14
1.4.4. Sub-simetrías SSH	15
1.5. Funciones de Green	16
1.5.1. Funciones de Green discretas en Mecánica Cuántica	17
1.5.2. Ecuación de Dyson	18
1.5.3. Densidad de estados	19
1.6. Transmisión	20
1.6.1. Función espectral	23
1.6.2. Ecuación de Lippmann-Schwinger	24
1.6.3. Densidad de corriente	25
2. Modelos y Desarrollo	29
2.1. Cadena Trivial	31
2.1.1. Caso minimal: Dos sitios	31
2.1.2. Caso general: N sitios	34
2.2. Cadena SSH	38
2.2.1. Dos dímeros	38
2.2.2. N dímeros	46

2.2.3. BIC Topológico	49
3. Conclusiones	55
A. Cálculos cadena trivial	57
A.1. Caso minimal: Dos sitios	57
A.2. Caso general: N sitios	58
B. Cálculos Cadena SSH	59
B.1. Función de Green cadena SSH de dos dímeros	59
B.2. Conexión SSH-QD	61
B.3. Conexión Contactos-QD	62
B.4. Función de Green de los contactos	63
Referencias	66

Índice de figuras

1.1.	Potencial efectivo y función de onda correspondiente a energía $E = 0$ para el caso del potencial de Wigner–von Neumann. A pesar de encontrarse en un rango energético perteneciente al continuo, la función de onda permanece localizada espacialmente, dando lugar a un BIC. Imagen extraída de Ref. [6]	7
1.2.	Representación esquemática de estados ligados, resonantes y estados ligados en el continuo, destacando la localización espacial de estos últimos dentro del espectro continuo. Imagen extraída de Ref. [6]	8
1.3.	Cadena de enlace fuerte unidimensional. Por cada átomo existe un orbital, y los electrones solo pueden saltar entre átomos vecinos. Imagen extraída de Ref. [8]	9
1.4.	Representación visual del modelo SSH. Imagen adaptada de Ref. [11]	10
1.5.	Estructura de bandas del modelo SSH para distintos regímenes de acoplamiento, dados por r	13
1.6.	Estructura estándar de transporte electrónico, dentro del modelo de enlace fuerte. Ésta consiste de una zona de dispersión (zona de color negro), conectada a tres contactos semi-infinitos (zona de color rojo/rosado). Dentro de la zona de dispersión, se estudian las propiedades de transporte, como la transmisión y la DOS. Imagen extraída de Ref. [20]	21
2.1.	Sistema en forma de anillo, compuesto de una cadena SSH acoplada a ambos borde a un punto cuántico. Los contactos izquierdo y derecho se modelan como cadena semi-infinitas unidimensionales, acopladas al QD desde los extremos.	30
2.2.	Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 2 átomos de una cadena trivial. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).	35

2.3. Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 10 átomos de una cadena trivial. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).	37
2.4. Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 2 dímeros de una cadena SSH. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).	46
2.5. Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 5 dímeros de una cadena SSH. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).	48
2.6. Comparación entre distintos casos asimétricos, $\delta V = 0,16\Gamma$, (paneles (a) y (c)) y $\delta V = 0,24\Gamma$ (paneles (b) y (d)) para un sistema de 9 dímeros de una cadena SSH. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).	49
2.7. Transmisión y DOS para sistema de 9 dímeros de cadena SSH, comparando distintos valores del acoplamiento $V_{1(N)}$. En los paneles (a)–(c) se fija $v = 0,3125\Gamma$, mientras que en el panel (d) se considera $v = 1,3125\Gamma$. En todos los casos el acoplamiento intercelda se mantiene constante en $w = \Gamma$	50
2.8. Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 12 dímeros de una cadena SSH, al transicionar desde fase trivial ($r < 1$) a fase topológica ($r > 1$). Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).	51
2.9. Densidad de estados por sitio para un sistema de cadena SSH de doce dímeros, en el caso asimétrico $\delta V \neq 0$. El panel de la izquierda muestra la cadena en la fase trivial, mientras que en el panel de la derecha la cadena se encuentra en fase topológica.	52

Capítulo 1

Introducción y Conceptos Previos

1.1. Introducción

El estudio de ondas presenta uno de los temas más trascendentales en distintas ramas de la física, como la fotónica, la acústica y la electrónica, debido a su vasta cantidad de ejemplos observados en la naturaleza y la tecnología. Dentro de estas disciplinas, aparecen una extensa cantidad de casos donde la onda se confina de forma parcial o total en cierta región del espacio, lo que se conoce como un estado ligado. Dentro de la concepción clásica, la frecuencia de la onda es un criterio para saber si corresponde o no a un estado de este tipo, ya que si ésta yace dentro de un espectro continuo de energía, solo puede ser una resonancia, la cual se irradia hacia el infinito, impidiendo su posibilidad de confinarse.

Los estados ligados en el continuo (BICs por sus siglas en inglés) son una excepción al criterio anterior, ya que son ondas que permanecen localizadas a pesar de coexistir en un espectro continuo de energía . Estos estados constituyen un fenómeno ondulatorio general, el cual ha sido identificado en ondas acústicas, electromagnéticas, y ondas mecánicas con medios como el agua y sólidos. El origen de los BICs está dado por la interferencia destructiva, donde las pérdidas por radiación de dos o más ondas se anulan.[1]

Estos estados han generado gran interés dentro de la comunidad científica, no solo por su naturaleza contraintuitiva, sino también por su variedad de posibles aplicaciones, como el confinamiento robusto de energía, el control de la radiación [2], y la construcción de sensores y dispositivos de detección ultrasensibles en plataformas fotónicas [3]. Es por

esto, que su estudio a través de modelos de juguete ha sido un enfoque relevante en la búsqueda y comprensión respecto a la formación de BICs en diversos sistemas físicos. Dentro de este marco, surgen las cadenas de átomos unidimensionales en el modelo de enlace fuerte, debido a la forma intuitiva y simple en que permiten capturar los efectos de interferencia y confinamiento asociados a la estructura del sistema. En particular, el modelo Su-Schrieffer-Hegger (SSH) se presenta como un ejemplo típico, al incorporar de manera mínima una modulación en los acoples que da lugar a distintas fases topológicas con propiedades físicas bien diferenciadas.

Este trabajo tiene como objetivo caracterizar de forma analítica y numérica la formación de BICs y cuasi-BICs en dos tipos de sistemas de enlace fuerte cuasi unidimensionales, consistentes en dos contactos modelados como cadenas semi-infinitas unidimensionales, los cuales están acoplados en un caso a una estructura compuesta de una cadena de átomos trivial finita, y en otro a una cadena SSH finita. En ambos modelos, la cadena está acoplada en ambos bordes a una impureza, formando una geometría de anillo cerrado. Dicha impureza se considera como un punto cuántico (QD por sus siglas en inglés), el cual consiste en una nanoestructura semiconductor que tiene la capacidad de confinar electrones en tres dimensiones, por lo que se le conoce también como átomo artificial [4]. Esta configuración permite estudiar los efectos de interferencia generados por los múltiples caminos de tunelamiento hacia los contactos. A través de los métodos de ecuaciones de autovalores de Hamiltonianos matriciales y funciones de Green, se calculan las propiedades de transporte relevantes, dadas por la transmisión en el punto cuántico, y la densidad de estados global del sistema. Los resultados muestran la formación de BICs protegidos por simetrías intrínsecas, específicamente la simetría de inversión espacial y la simetría quirral ante acoples simétricos de la cadena con el QD. Mientras que en la cadena SSH, surge un BIC robusto frente a perturbaciones, el cual sugiere un origen topológico dado por la naturaleza del modelo.

El trabajo cuenta con la siguiente estructura: En el Capítulo 1, se presentan los fundamentos teóricos necesarios, introduciendo en mayor profundidad el concepto de BIC, el modelo de enlace fuerte, la naturaleza y propiedades de la cadena SSH. Además, se detalla el formalismo de Landauer-Büttiker, pasando entre medio por las Funciones de Green y

la ecuación de Dyson, para obtener las expresiones de las propiedades de transporte cuántico. En el Capítulo 2, se desarrollan los modelos específicos para la cadena trivial y la cadena SSH. Se comienza con un análisis analítico para sistemas minimales y se extiende numéricamente para cadenas de N dímeros, estudiando la formación de BICs, su dependencia con las simetrías del acople y la emergencia del estado topológico en el régimen no trivial de la cadena SSH. Finalmente, en el Capítulo 3, se presentan las conclusiones generales del estudio, discutiendo la naturaleza física de los estados encontrados y sus implicancias en la robustez frente a perturbaciones.

1.2. Estados ligados en el continuo

Consideremos el ejemplo más sencillo de la mecánica cuántica, un pozo potencial infinito unidimensional. Sea:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Entonces, debido a las condiciones de borde, la energía de una partícula que se encuentre entre $0 \leq x \leq L$ está dada por:

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad ; \quad n \in \mathbb{N}$$

Por lo tanto, podemos decir que esta partícula se encuentra **ligada** en esta región de x , y su espectro de energía es **discreto**.

Para el caso de la partícula libre unidimensional, es decir, donde $V(x) = 0$ en todo el espacio, su espectro de energía es:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad ; \quad k \in \mathbb{R}$$

Como k puede tomar cualquier valor de los números reales, los valores posibles de energía no están discretizados, por lo que en este contexto, la partícula **no está ligada** a una región del espacio, y su espectro es **continuo**.

La mecánica cuántica nos dicta que una partícula localizada en una región del espacio producto de un potencial confinante va a tener una energía discretizada. Estos casos se pueden observar en el oscilador armónico cuántico y en el átomo de hidrógeno para energías negativas. Por otro lado, una partícula que se puede propagar por todo el espacio, tiene un espectro de energía continuo debido a la ausencia de condiciones de borde. Ejemplos paradigmáticos son los estados de dispersión asociados a una barrera o pozo finito, y en los estados no ligados del átomo de hidrógeno, donde la energía es positiva.

El caso de los BICs es una excepción a la convención tradicional descrita anteriormente, ya que corresponde a un estado el cual se encuentra confinado en una región del espacio, a pesar de tener un espectro de energía perteneciente al continuo. Éstos fueron originalmente propuestos en 1929 por von Neumann y Wigner [5], en donde impusieron una función de onda L^2 en todo el espacio, con simetría esférica, para posteriormente elegir un potencial tal que permita a la función de onda ser una solución de energía cero. A partir de la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi + (V(r) - \underbrace{E}_{=0})\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad V(r) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi$$

propusieron un ansatz para la función de onda del tipo $\psi(r) = r^\alpha \sin r^\beta$, y aplicando su condición de cuadrado integrable, se obtiene que:

$$\psi(r) = \frac{\sin^3(r)}{r^2} \quad \Rightarrow \quad V(r) = \frac{2}{r^2} - 9r^4$$

En la figura (1.1) podemos apreciar el gráfico de la función de onda y el potencial en función de r , para energía $E = 0$. A medida que $r \rightarrow \infty$, el potencial tiende a $-\infty$, lo que nos permite infinitos estados de dispersión para energías mayores a la energía potencial. Sin embargo, para el caso donde $E = 0$, vemos que la función de onda está localizada cerca de $r = 0$, a pesar de estar dentro de un rango energético que permite la deslocalización de la partícula. Por lo tanto, tenemos un estado ligado en este sistema, el cual se encuentra dentro de un rango de energías continuas, lo que por definición es un BIC. El origen de este fenómeno se encuentra en la estructura oscilatoria de largo alcance del potencial, que produce una interferencia destructiva entre las ondas de dispersión. Como resultado, la función de onda se vuelve normalizable aun cuando su energía pertenece al

continuo, dando lugar a este fenómeno que buscamos analizar.

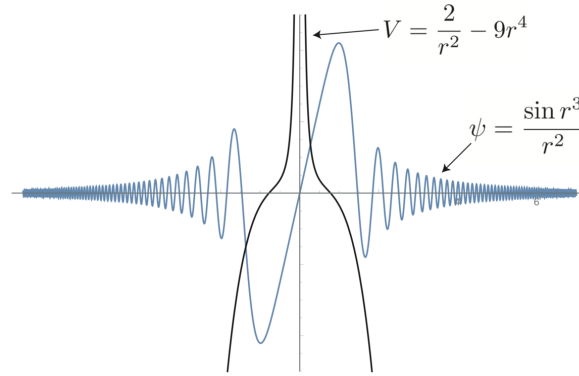


Figura 1.1: Potencial efectivo y función de onda correspondiente a energía $E = 0$ para el caso del potencial de Wigner–von Neumann. A pesar de encontrarse en un rango energético perteneciente al continuo, la función de onda permanece localizada espacialmente, dando lugar a un BIC. Imagen extraída de Ref. [6] .

Como se mencionó en la introducción, los BICs son un fenómeno general ondulatorio, por ende, podemos considerar el caso de una resonancia, la cual localmente se comporta como un estado ligado, sin embargo, se irradia hacia afuera del sistema, como se observa en la figura (1.2). Este tipo de ondas que oscilan de forma sinusoidal, como $e^{-i\omega t}$, se le puede asociar una frecuencia compleja, $\omega = \omega_0 - i\Gamma$, en donde la parte real es la frecuencia de resonancia y la parte imaginaria representa la tasa de fuga. En experimentos de dispersión, las ondas incidentes pueden excitar resonancias convencionales, produciendo variaciones en la fase y amplitud de la señal dispersada dentro de un ancho espectral finito de 2Γ [1]. En cambio, los BICs permanecen inaccesibles a estas excitaciones, ya que están completamente desacoplados de los canales radiantes. Por lo tanto, los BICs son considerados como resonancias con tasa de fuga y ancho espectral nulos, lo que corresponde a $\Gamma = 0$. Éste será nuestro parámetro a la hora de identificar BICs en los modelos a estudiar, en donde buscaremos resonancias con ancho $2\Gamma \rightarrow 0$, debido a que nos indica una partícula con tiempo de vida media muy extenso, lo que se conoce como cuasi-BICs. Al ser $\Gamma = 0$, su tiempo de vida medio es infinito, lo que corresponde al caso ideal de los BICs [7].

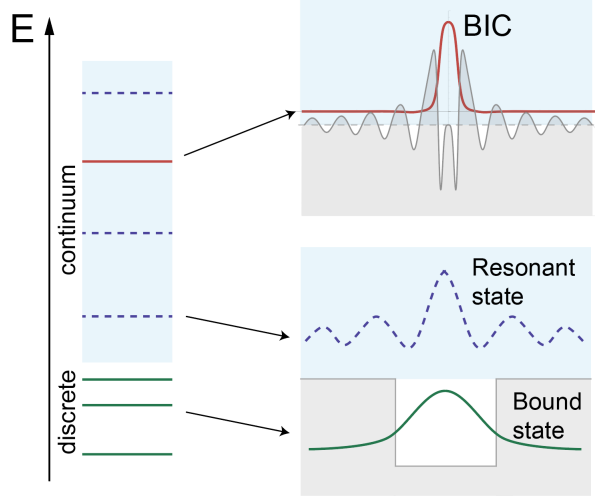


Figura 1.2: Representación esquemática de estados ligados, resonantes y estados ligados en el continuo, destacando la localización espacial de estos últimos dentro del espectro continuo. Imagen extraída de Ref. [6]

1.3. Modelo de Enlace Fuerte Unidimensional

El modelo de enlace fuerte en la física del estado sólido es un método para calcular la estructura electrónica de bandas en sólidos y moléculas de forma aproximada. En este trabajo, seguimos la formulación estándar presentada en Ref. [8] para el modelo de cadenas unidimensionales, las cuales contienen un solo electrón y un solo orbital por átomo, denotado por $|n\rangle$, como se observa en la figura (1.3). Además, asumimos que los orbitales son ortogonales entre sí:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$$

Luego, escribimos el Hamiltoniano como:

$$\hat{H} = \hat{K} + \sum_j V_j$$

En donde $\hat{K} = \hat{p}/(2m)$ es la energía cinética, y V_j corresponde a la interacción coulombiana del electrón en la posición \mathbf{r} con el núcleo en el sitio j . Con estas definiciones, tenemos que:

$$\hat{H} |n\rangle = \underbrace{(\hat{K} + V_n)}_{\epsilon_0} |n\rangle + \sum_{j \neq n} V_j |n\rangle$$

Aquí, ϵ_0 corresponde a la energía del electrón del núcleo n en ausencia de cualquier otro átomo a su alrededor, lo que se conoce como energía de sitio. Por ende, al escribir el Hamiltoniano de forma matricial, obtenemos:

$$\langle n|\hat{H}|m\rangle = H_{n,m} = \epsilon_0\delta_{n,m} + \sum_{j \neq m} \langle n|V_j|m\rangle$$

En la última expresión, el término a la derecha de la suma corresponde a la transferencia de un electrón localizado en un átomo en la posición n , hacia otro sitio en la posición m , producto de la interacción coulombiana entre el electrón y el núcleo. Generalmente, esta transferencia solo ocurre si n y m están muy cercanos el uno del otro. Por ende, consideraremos solo el caso de interacciones entre primeros vecinos:

$$\sum_{j \neq m} \langle n|V_j|m\rangle = \begin{cases} -t, & n = m \pm 1, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

En donde t corresponde al término de salto, el cual tiene dimensión de energía, y permite al Hamiltoniano mover un electrón de un sitio a otro. La magnitud de t depende de la cercanía de los orbitales, la cual decae de forma exponencial a medida que éstos se alejan. Por lo tanto, el elemento matricial del Hamiltoniano para una cadena unidimensional en el modelo de enlace fuerte es:

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

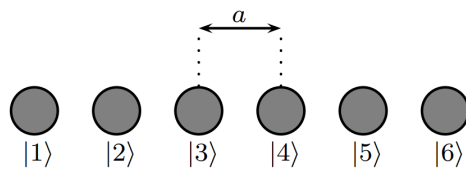


Figura 1.3: Cadena de enlace fuerte unidimensional. Por cada átomo existe un orbital, y los electrones solo pueden saltar entre átomos vecinos. Imagen extraída de Ref. [8]

Además, si consideramos condiciones de borde periódicas en la cadena, el sistema es traslacionalmente invariante, por lo que existe un operador traslación \hat{T} tal que $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$, lo que nos permite diagonalizar el Hamiltoniano en la autobase del operador traslación, los cuales son conocidos y están dados por ondas planas definidas como [9]:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} |j\rangle \quad (1.1)$$

donde k corresponde al número de onda de la partícula, y j es el índice del sitio en la cadena.

1.4. Cadena Su-Schrieffer-Heeger

El modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) es un modelo de enlace fuerte que describe a un único electrón sin spin en una celda unitaria unidimensional de dos sitios [10]. Los átomos dentro de la celda se etiquetan como A y B, dado por la figura (1.4). Para este sistema, se denominan dos potenciales de salto, $-v$ para el intercambio dentro de la celda unitaria, y $-w$, para el intercambio entre celdas unitarias vecinas. El Hamiltoniano de enlace fuerte se expresa como:

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

Aquí, «h.c» denota el hermítico conjugado del término anterior; además, se ha considerado la energía de sitio como $\epsilon_A = \epsilon_B = 0$.

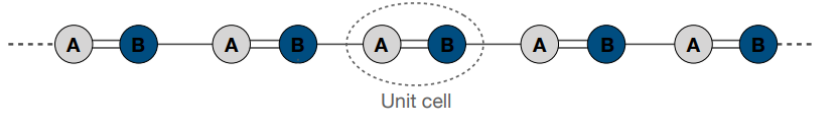


Figura 1.4: Representación visual del modelo SSH. Imagen adaptada de Ref. [11]

Por otro lado, si aplicamos la ecuación (1.1) en el Hamiltoniano de la cadena SSH, ésta se puede expresar como:

$$\hat{H} = \sum_k (v + e^{-ik}w) |k, B\rangle \langle k, A| + (v + e^{ik}w) |k, A\rangle \langle k, B|$$

De forma compacta, podemos escribir el Hamiltoniano de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \sum_k \left(|k, A\rangle \quad |k, B\rangle \right) \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & v + e^{ik}w \\ v + e^{-ik}w & 0 \end{pmatrix}}_{\hat{H}(k)} \begin{pmatrix} \langle k, A| \\ \langle k, B| \end{pmatrix}$$

$\hat{H}(k)$ se conoce como Hamiltoniano de Bloch, el cual nos entrega la información de las bandas de energía que forma la cadena, dada por sus autovalores [11]:

$$E(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos(k)}$$

1.4.1. Simetrías Modelo SSH

Una de las características más relevantes de este modelo corresponde a las simetrías que presenta su Hamiltoniano. En este trabajo nos enfocamos en dos de ellas, por un lado, tenemos la simetría quiral [12], la cual viene dada por la siguiente relación:

$$\hat{C}\hat{H}\hat{C}^{-1} = -\hat{H} \quad (1.2)$$

En donde $\hat{C} = \hat{U}K$, con \hat{U} un operador unitario, y K la conjugación compleja. Además, \hat{C} cumple que:

$$\hat{C}^2 = \mathbf{I}_{n \times n} \quad ; \quad \hat{C} = \hat{C}^\dagger$$

Esta simetría nos dice que el espectro de energía de la cadena SSH es simétrico respecto a $E = 0$, ya que:

$$\begin{aligned} \hat{C}\hat{H}|\psi_m\rangle &= -\hat{H}\hat{C}|\psi_m\rangle \\ \hat{C}E_m|\psi_m\rangle &= -\hat{H}\hat{C}|\psi_m\rangle \leftrightarrow \hat{H}\hat{C}|\psi_m\rangle = -E_m\hat{C}|\psi_m\rangle \end{aligned}$$

Entonces, $|\psi_m\rangle$ es un autoestado de \hat{C} , tal que:

$$\hat{C}|\psi_m(E)\rangle = |\psi_m(-E)\rangle$$

Por lo tanto, los estados con energía $\pm E$ son autoestados del sistema aislado, confirmando su espectro simétrico. La otra simetría de interés para este estudio, corresponde a la inversión espacial, o paridad [13], la cual intercambia el sitio j por el $M + 1 - j$. Ésta

viene dada por:

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P} = \hat{H} \quad ; \quad \hat{P}^2 = \mathbb{I}_{n \times n} \quad (1.3)$$

Podemos ver que:

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle &= \hat{H}|\psi\rangle \quad / \hat{P}. \\ \underbrace{\hat{P}^2}_{\mathbb{I}_{n \times n}}\hat{H}\hat{P}|\psi\rangle &= E\hat{P}|\psi\rangle \end{aligned}$$

Esto implica que $\hat{P}|\psi\rangle$ es autoestado de \hat{H} , por lo que $|\psi\rangle$ es un autoestado de \hat{P} . Además:

$$\begin{aligned} \hat{P}|\psi\rangle &= \lambda|\psi\rangle \quad / \hat{P}. \\ \hat{P}^2|\psi\rangle &= \lambda\hat{P}|\psi\rangle \\ |\psi\rangle &= \lambda^2|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \lambda = \pm 1 \end{aligned}$$

Por ende, se puede inferir que existen estados los cuales van ser simétricos y antisimétricos bajo inversión espacial:

$$\hat{P}\psi_j = \psi_{M+1-j} \quad ; \quad \hat{P}\psi_j = -\psi_{M+1-j}$$

1.4.2. Topología Modelo SSH

Los aislantes eléctricos consisten en materiales que tienen una región prohibida entre las bandas de valencia y conducción. Éstos se pueden diferenciar en aislantes topológicos y aislantes triviales [14].

Un aislante topológico es un material el cual en su interior se comporta como un aislante eléctrico, mientras que en su superficie se comporta como un conductor eléctrico. Esto se debe a que la topología del interior del material es no trivial, por lo que la frontera entre el aislante y el vacío (zona de topología trivial) representa una transición de fase topológica, lo cual implica el cierre de la brecha de bandas en esa región, forzando a soportar un estado de borde conductor. Por esta razón, un aislante topológico no puede ser transformado de forma continua en uno trivial sin provocar un cruce entre las bandas,

siendo ésta la evidencia de una transición de fase [14, 15].

La cadena SSH finita representa el modelo más simple de aislante topológico unidimensional, ya que al definir el parámetro $r = w/v$, podemos analizar la figura (1.5), en donde vemos que a pesar de que la estructura de bandas energéticas luzca exactamente igual para ($r < 1$) y ($r > 1$), la transformación continua de este parámetro exige en ($r = 1$) un cierre de la región prohibida en $k = \pm\pi$, lo que nos indica que la topología para distintos regímenes de r es diferente.

La caracterización topológica de estas dos fases se realiza mediante el *winding number* ν , un invariante topológico definido a partir del Hamiltoniano de Bloch del modelo SSH. Al escribir el Hamiltoniano en el espacio de momentos como

$$H(k) = \mathbf{h}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

con $\mathbf{h}(k) = (v + w \cos k, w \sin k, 0)$, el *winding number* cuenta cuántas veces el vector $\mathbf{h}(k)$ rodea el origen al recorrer la primera zona de Brillouin [11]. Para $r > 1$ el recorrido encierra al origen y se obtiene $\nu = 1$, correspondiente a una fase topológica no trivial que soporta estados de borde. En cambio, para $r < 1$ el origen no queda encerrado, dando lugar a $\nu = 0$ y a una fase topológicamente trivial. En el punto crítico $r = 1$ el invariante no está definido debido al cierre de la brecha de energía, señal inequívoca de una transición de fase topológica.

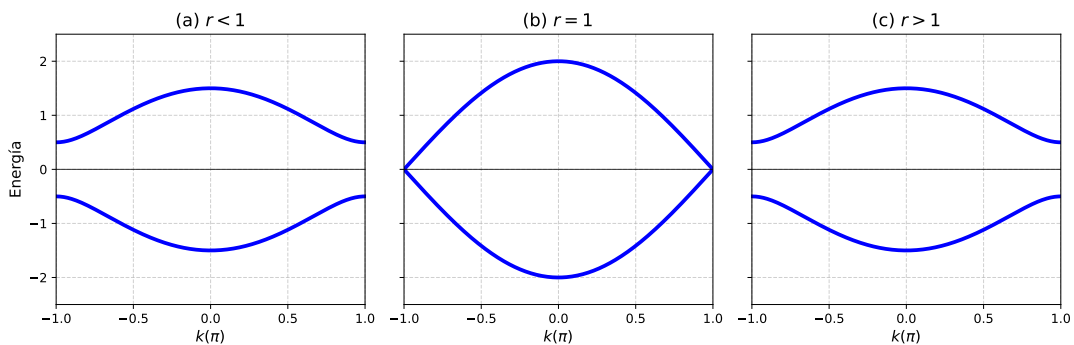


Figura 1.5: Estructura de bandas del modelo SSH para distintos regímenes de acoplamiento, dados por r .

1.4.3. Estados de Borde

En esta sección, queremos ver el mecanismo de protección de los estados de borde. Con ese propósito, necesitamos estructurar el Hamiltoniano en el espacio de subredes, el cual está escrito en una base ordenada por subredes $\{A_1, A_2, \dots, B_1, B_2, \dots, B_N\}$. En dicha base, el Hamiltoniano toma la forma:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & D \\ D^\dagger & 0 \end{pmatrix}$$

en donde los bloques diagonales son nulos, ya que la simetría quirral prohíbe saltos del tipo $A - A$ y $B - B$ [12], mientras que los bloques fuera de la diagonal contiene los saltos entre subredes.

A partir de esta base, buscamos resolver la ecuación de Schrödinger para un estado $|\psi\rangle$ con energía $E = 0$:

$$\begin{pmatrix} 0 & D \\ D^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Esto se desacopla en dos ecuaciones independientes:

$$D\psi_B = 0$$

$$D^\dagger\psi_A = 0$$

La implicancia de este resultado es que el estado solo puede vivir en una subred. Por ejemplo, el estado de borde izquierdo en la fase topológica solo vive en la subred A:

$$|\psi_L\rangle = (\psi_A, 0)^T$$

Ahora, podemos añadir una perturbación de la forma general:

$$\hat{V} = \hat{H}_{AB} + \hat{H}_{BB} + \hat{H}_{AA} + \hat{H}_{BA} \quad (1.4)$$

donde \hat{H}_{ij} son términos que acoplan a sitios del tipo i con los del tipo j , en cualquier orden de vecinos. Queremos ver el cambio de energía del estado de borde izquierdo, por

lo que al calcular la corrección a primer orden en teoría de perturbaciones, obtenemos:

$$\Delta E = \langle \psi_L | \hat{V} | \psi_L \rangle = \begin{pmatrix} \psi_A^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{H}_{AA} & \hat{H}_{AB} \\ \hat{H}_{BA} & \hat{H}_{BB} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ 0 \end{pmatrix}$$

Al multiplicar las matrices, observamos que el corrimiento de energía es:

$$\Delta E = \psi_A^\dagger \hat{H}_{AA} \psi_A$$

Podemos ver que si la perturbación respeta la simetría quiral, es decir, $\hat{H}_{AA} = \hat{H}_{BB} = 0$, entonces la corrección de energía ΔE se anula, por lo que la energía queda clavada en cero, dejando al estado inamovible.

1.4.4. Sub-simetrías SSH

El concepto de **sub-simetría** es un caso de simetría, en donde la ecuación pertinente al Hamiltoniano y al operador de simetría solo se mantienen en un subespacio del espacio de Hilbert completo. Para el caso de la cadena SSH, la sub-simetría se enfoca en perturbaciones que destruyen la simetría quiral, como el acoplamiento entre sitios A-A y B-B, pero que preserva una sub-simetría menos estricta, que definiremos a continuación. Al fijarnos en la ecuación (2.12), se puede descomponer el operador quiral como:

$$\hat{C} = \hat{P}_A - \hat{P}_B$$

donde $\hat{P}_{A(B)}$ corresponde al operador proyección de la subred A(B). También podemos definir el estado de borde izquierdo $|A_L\rangle$ y el derecho $|B_L\rangle$, cuyas amplitudes no son nulas en sus respectivas subredes:

$$\hat{P}_A |A_L\rangle = |A_L\rangle \quad ; \quad \hat{P}_B |B_R\rangle = |B_R\rangle \quad ; \quad \hat{P}_{B(A)} |A_L(B_R)\rangle = 0$$

Con estas definiciones, es posible establecer dos sub-simetrías en la cadena SSH, la sub-simetría A y B, las que se expresan de la siguiente forma:

$$\hat{C} \hat{H} \hat{C}^{-1} \hat{P}_i = -\hat{H} \hat{P}_i \quad , i \in \{A, B\}$$

Posteriormente, recordando la perturbación general dada en (1.4), nos restringimos a

perturbaciones que preservan la sub-simetría A, es decir:

$$\hat{V} = \hat{H}_{AB} + \hat{H}_{BB},$$

estas perturbaciones pueden ser locales, no locales, periódicas o desordenadas.

Dado que \hat{H}_{BB} solo actúa sobre la subred B, se cumple:

$$\hat{H}_{BB}\hat{P}_A = 0,$$

por lo tanto:

$$\hat{H}_{BB}|A_L\rangle = \hat{H}_{BB}\hat{P}_A|A_L\rangle = 0.$$

Además, los términos \hat{H}_{AB} preservan la simetría quiral y no pueden desplazar un estado de energía cero mientras la cadena se encuentre en fase topológica. En consecuencia, el estado de borde izquierdo $|A_L\rangle$ permanece protegido bajo perturbaciones que preservan la sub-simetría A.

En contraste, el estado de borde derecho $|B_R\rangle$, que vive en la subred B, sí es afectado por los términos \hat{H}_{BB} , por lo que no goza de la misma protección. Este procedimiento es análogo para observar la protección del estado de borde $|B_R\rangle$, bajo perturbaciones que preserven la sub-simetría B.

Podemos observar que los estados de borde topológicos siguen existiendo a pesar de la ruptura de la simetría quiral global y de la cuantización de su respectivo invariante topológico, lo que evidencia que la protección de este estado solo requiere de una sub-simetría restringida al subespacio donde vive el estado.

1.5. Funciones de Green

La función de Green es un método sumamente eficaz que aborda el estudio de los problemas de condiciones de borde. Ésta nos permite resolver ecuaciones diferenciales con términos no homogéneos, especialmente cuando tenemos un sistema con una fuente pun-

tual o distribuida, como cargas, masa, calor, entre otros.

Podemos describir un sistema mediante un **operador diferencial** \mathcal{L} , con f y g funciones, tal que:

$$\mathcal{L}f = g \iff f = \mathcal{L}^{-1}g$$

La inversa del operador diferencial \mathcal{L} , si existe, puede definirse a través de una transformada integral como:

$$\mathcal{L}^{-1}g = \int G(x, t)g(t) dt$$

con $G(x, t)$ siendo el Kernel de la transformada. Aplicando \mathcal{L} en ambos lados:

$$\implies \mathcal{L}\mathcal{L}^{-1}g = \mathcal{L} \int G(x, t)g(t) dt$$

$$g = \int \mathcal{L}[G(x, t)]g(t) dt$$

De acuerdo con la definición y características de la delta de Dirac, se tiene:

$$\mathcal{L}[G(x, t)] = \delta(x - t) \tag{1.5}$$

Por ende, la función $G(x, t)$ que satisfaga la ecuación (1.5), se conoce como función de Green del operador diferencial \mathcal{L} [16]. Esta función es la solución particular de la ecuación diferencial asociada a $\delta(x - t)$, utilizada para construir la solución general cuando conocemos las condiciones iniciales o de borde.

1.5.1. Funciones de Green discretas en Mecánica Cuántica

Bajo la idea anteriormente mencionada, se define el operador función de Green en la mecánica cuántica de un sistema descrito por el Hamiltoniano \hat{H} de la siguiente forma:

$$(z - \hat{H})\hat{G} = 1 \quad ; \quad z \in \mathbb{C} \tag{1.6}$$

donde la parte derecha de la ecuación corresponde al operador unidad, el cual depende de la estructura del espacio de Hilbert. Por otro lado, definimos un conjunto de autokets de \hat{H} :

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = \lambda_n |\phi_n\rangle \quad ; \quad \langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{n,m} \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{I}_n \quad (\text{Compleitud})$$

Insertando este operador unitario en la definición de la función de Green, obtenemos:

$$\hat{G}(z) = \sum_n (z - \hat{H})^{-1} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n (z - \lambda_n)^{-1} |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$$

En donde hemos usado la siguiente propiedad de los operadores:

$$f(\hat{H}) |\phi_n\rangle = f(\lambda_n) |\phi_n\rangle$$

Por ende, la función de Green se puede expresar en lo que se conoce como la forma de Lehmann [17]:

$$\hat{G}(z) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{z - \lambda_n} \quad (1.7)$$

En principio, z puede ser cualquier número complejo, pero se decide elegirlo levemente por encima del eje real, obteniendo la llamada función de Green retardada:

$$G^r(E) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{E - \lambda_n + i\eta} \quad (1.8)$$

aquí, E es real y η es un número positivo infinitesimal.

1.5.2. Ecuación de Dyson

La ecuación de Dyson es un método poderoso el cual permite computar funciones de Green de forma exacta y aproximadas, a través de teoría de perturbaciones. Para ese propósito, expresamos el Hamiltoniano de la forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (1.9)$$

en donde \hat{H}_0 corresponde al Hamiltoniano de un sistema sin perturbar, el cual tiene soluciones conocidas, y \hat{V} es una perturbación pequeña. Luego, se define \hat{g} como la función de Green del Hamiltoniano \hat{H}_0 :

$$(z - \hat{H}_0)\hat{g} = 1 \quad (1.10)$$

Por lo tanto, al reemplazar el Hamiltoniano en la definición de la función de Green del sistema completo, obtenemos:

$$\hat{G}^{-1} = z - \hat{H}_0 - \hat{V} = \hat{g}^{-1} - \hat{V}$$

Multiplicando la expresión anterior por $\hat{g} \cdot y \cdot \hat{G}$, se tiene:

$$\hat{G} = \hat{g} + \hat{g}\hat{V}\hat{G} \quad (1.11)$$

Esta expresión se conoce como la ecuación de Dyson, y nos permitirá computar funciones de Green de forma exacta.

Es posible encontrar una aproximación de la ecuación de Dyson al reemplazar \hat{G} en la ecuación (1.11) por la misma ecuación (1.11) [17]:

$$\hat{G} = \hat{g} + \hat{g}\hat{V}(\hat{g} + \hat{g}\hat{V}\hat{G}) = \hat{g} + \hat{g}\hat{V}\hat{g} + \hat{g}\hat{V}\hat{g}\hat{V}\hat{G} \quad (1.12)$$

Al seguir repitiendo este procedimiento, llegamos a lo que se conoce como serie de Dyson, el cual es un método aproximado para computar funciones de Green, dada al truncar la serie para cierto orden.

1.5.3. Densidad de estados

Considerando el sistema dado por el Hamiltoniano \hat{H} mencionado anteriormente, con sus respectivos autovalores y autoestados, definimos la densidad total de estados (DOS por sus siglas en inglés) del sistema como [18]:

$$D(E) = \sum_n \delta(E - \lambda_n) \quad ; \quad \int_{E_1}^{E_2} D(E)dE = N_\alpha$$

en donde N_α es el número de estados en el intervalo $[E_1, E_2]$.

La densidad local de estados (LDOS por sus siglas en inglés) es la proyección de la DOS en un estado de interés arbitrario $|\psi\rangle$, que se define de la forma [18]:

$$n_0(E) = \sum_n |\langle \psi | \phi_n \rangle|^2 \delta(E - \lambda_n) \quad ; \quad \int n_0(E)dE \equiv 1$$

Además, la DOS es la suma de todas las proyecciones de la densidad de estados de cualquier set ortonormal completo $\{|\psi_m\rangle\}$.

Consideremos un elemento diagonal de la matriz de funciones de Green, a partir de la ecuación (1.8):

$$G_{00}(E) = \langle\psi|\sum_n \frac{|\phi_n\rangle\langle\phi_n|}{E - \lambda_n + i\eta}|\psi\rangle = \sum_n |\langle\psi|\phi_n\rangle|^2 \frac{1}{E - \lambda_n + i\eta}$$

Multiplicando tanto el numerador como en el denominador por el complejo conjugado del último, tenemos la siguiente expresión:

$$G_{00} = \sum_n |\langle\psi|\phi_n\rangle|^2 \frac{E - \lambda_n - i\eta}{(E - \lambda_n)^2 - \eta^2}$$

En el eje real de energía, la parte real de $G_{00}(E)$ presenta polos en los valores del espectro discreto de \hat{H} , mientras que la parte imaginaria contiene singularidades del tipo delta; esto se puede observar haciendo el límite $\epsilon \rightarrow 0^+$, y usando el siguiente resultado:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{(E - \lambda_n)^2 + \epsilon^2} = \delta(E - \lambda_n)$$

Combinando esta expresión con la LDOS, obtenemos:

$$n_0(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im } G_{00}(E) \quad (1.13)$$

Dado esto, podemos ver que la densidad de estados del sistema va a estar dada por la traza de la matriz de función de Green para cualquier elección de set ortonormal completo:

$$D(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \text{Im Tr } \hat{G}(E) \quad (1.14)$$

1.6. Transmisión

Al estudiar el transporte en cualquier sistema, la esencia de lo que estamos analizando es la respuesta de un dispositivo frente a una señal externa. Esta respuesta está determinada por los contactos, que actúan como reservorios electrónicos en equilibrio, caracterizados por un potencial químico y una temperatura, y que suministran y absorben electrones del

sistema. Una de estas respuestas corresponde a la transmisión del sistema, siendo ésta la probabilidad de que un electrón se transporte de un contacto a otro, atravesando cierta zona de interés [19]. El esquema propuesto se puede observar en la figura (1.6). Para nuestro análisis, consideraremos dos contactos, uno de lado izquierdo, el cual se denota con la letra L, y otro del lado derecho, denotado por la letra R. Entre medio de estos contactos, tendremos una región central conocida como zona de dispersión.

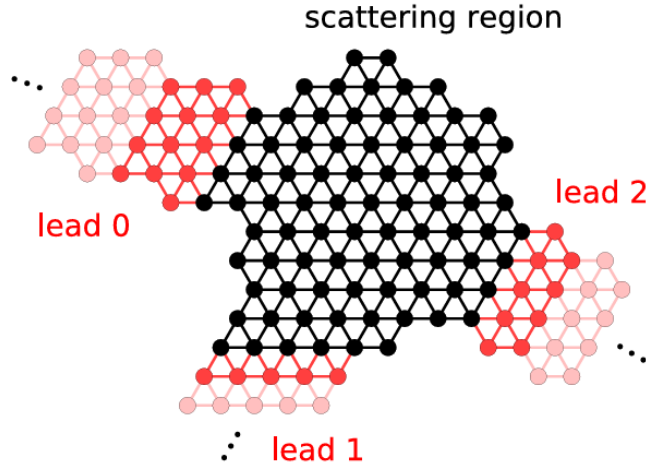


Figura 1.6: Estructura estándar de transporte electrónico, dentro del modelo de enlace fuerte. Ésta consiste de una zona de dispersión (zona de color negro), conectada a tres contactos semi-infinitos (zona de color rojo/rosado). Dentro de la zona de dispersión, se estudian las propiedades de transporte, como la transmisión y la DOS. Imagen extraída de Ref. [20]

Nuestro interés en esta sección es encontrar una expresión que nos permita calcular la transmisión en el sistema. Para eso, partimos el desarrollo a través del la ecuación de autovalores dada por el siguiente Hamiltoniano:

$$[\hat{H}] |\Psi_k\rangle = \begin{bmatrix} \hat{H}_L & \hat{\tau}_L & 0 \\ \hat{\tau}_L^\dagger & \hat{H}_D & \hat{\tau}_R^\dagger \\ 0 & \hat{\tau}_R & \hat{H}_R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |\psi_{L,k}\rangle \\ |\psi_{D,k}\rangle \\ |\psi_{R,k}\rangle \end{bmatrix} = E(k) \begin{bmatrix} |\psi_{L,k}\rangle \\ |\psi_{D,k}\rangle \\ |\psi_{R,k}\rangle \end{bmatrix} \quad (1.15)$$

La matriz 3×3 está compuesta de submatrices. En su diagonal, tenemos los Hamiltonianos del dispositivo, y el de los contactos izquierdo y derecho desacoplados, mientras que los elementos fuera de la diagonal son la matriz de acoplamiento entre los contactos con el dispositivo de conducción. Además, la interacción entre los contactos L y R no es considerada. Por otro lado, el autovector asociado a esta matriz está compuesto de kets, los cuales representan estados asociados a cada contacto y al dispositivo, y están

dados por el subíndice k , el cual nos informa el número de onda relacionada a la partícula.

Recordando la definición de la función de Green, en la ecuación (1.6), podemos observar que:

$$\begin{bmatrix} E - \hat{H}_L & -\hat{\tau}_L & 0 \\ -\hat{\tau}_L^\dagger & E - \hat{H}_D & -\hat{\tau}_R^\dagger \\ 0 & -\hat{\tau}_R & E - \hat{H}_R \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \hat{G}_L & \hat{G}_{L-D} & \hat{G}_{L-R} \\ \hat{G}_{D-L} & \hat{G}_D & \hat{G}_{D-R} \\ \hat{G}_{R-L} & \hat{G}_{R-D} & \hat{G}_R \end{bmatrix} = \mathbb{I}_{n \times n}$$

donde los elementos de la diagonal de la segunda matriz corresponde a matrices de funciones de Green, las cuales conectan elementos dentro del dispositivo y los contactos, mientras que los elementos fuera de la diagonal son funciones de Green en donde se representa la conexión entre el dispositivo con los contactos respectivos. El término a la derecha de la igualdad es una matriz diagonal de matrices unidad, la cual tiene la misma dimensión que las submatrices correspondientes.

A partir de la segunda fila de la primera matriz, con la segunda columna de la segunda matriz, obtenemos la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} -\hat{\tau}_L^\dagger \hat{G}_{L-D} + \underbrace{(E - \hat{H}_D)}_{\hat{g}_d^{-1}} \hat{G}_D - \hat{\tau}_R^\dagger \hat{G}_{R-D} &= \mathbb{I} \\ \hat{G}_D &= \hat{g}_d + \hat{g}_d (\hat{\tau}_L^\dagger \hat{G}_{L-D} + \hat{\tau}_R^\dagger \hat{G}_{R-D}) \end{aligned} \quad (1.16)$$

Para obtener $\hat{G}_{L(R)-D}$, multiplicamos la primera(tercera) fila con la segunda columna:

$$\begin{aligned} \underbrace{(E - \hat{H}_{L(R)})}_{\hat{g}_{L(R)}^{-1}} \hat{G}_{L(R)-D} - \hat{\tau}_{L(R)} \hat{G}_D &= 0 \\ \hat{G}_{L(R)-D} &= \hat{g}_L \hat{\tau}_{L(R)} \hat{G}_D \end{aligned}$$

Reemplazando en (1.16):

$$\hat{G}_D = \hat{g}_D + \hat{g}_D \hat{\Sigma} \hat{G}_D \quad ; \quad \hat{\Sigma} = \sum_{\alpha \in L, R} \hat{\tau}_\alpha^\dagger \hat{g}_\alpha \hat{\tau}_\alpha$$

$\hat{\Sigma}$ representa el acoplamiento entre el dispositivo y los contactos respectivos, y nos otorga

información sobre la naturaleza del último mencionado. A este término se le conoce como **autoenergía** [21]. Despejando \hat{G}_D , se tiene la siguiente expresión:

$$G_D = \frac{\hat{g}_D}{\mathbb{I} - \hat{g}_D \hat{\Sigma}}$$

Para proseguir con el desarrollo, se hace necesario definir ciertos elementos los cuales no se usarán explícitamente en la búsqueda de BICs, pero nos permitirán entender el cálculo para una expresión final de la transmisión.

1.6.1. Función espectral

La función espectral $\hat{A}(E)$ nos da la densidad de estados disponible a una energía E . Se define a partir de las funciones de Green retardada (G^r) y avanzada (G^a) [22]:

$$\hat{A} = i(\hat{G}^r - \hat{G}^a) \quad \text{con} \quad \hat{G}^a = (\hat{G}^r)^\dagger$$

Para entender su significado físico, usamos la ecuación (1.8) y calculamos la diferencia explícitamente:

$$\begin{aligned} \hat{G}^r - \hat{G}^a &= \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \left[\frac{1}{E - \epsilon_n + i\eta} - \frac{1}{E - \epsilon_n - i\eta} \right] \\ &= \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \left[\frac{(E - \epsilon_n - i\eta) - (E - \epsilon_n + i\eta)}{(E - \epsilon_n)^2 + \eta^2} \right] \\ &= \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \left[\frac{-2i\eta}{(E - \epsilon_n)^2 + \eta^2} \right] \end{aligned}$$

Sustituyendo en la definición de \hat{A} :

$$\hat{A} = i \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \left(\frac{-2i\eta}{(E - \epsilon_n)^2 + \eta^2} \right) = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| \underbrace{\frac{2\eta}{(E - \epsilon_n)^2 + \eta^2}}_{\text{Lorentziana}}$$

En el límite $\eta \rightarrow 0$, la Lorentziana tiende a la función Delta de Dirac:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = \delta(x) \implies \frac{2\eta}{x^2 + \eta^2} = 2\pi\delta(x)$$

Por lo tanto:

$$\hat{A}(E) = 2\pi \sum_n \delta(E - \epsilon_n) |u_n\rangle \langle u_n| \quad (1.17)$$

1.6.2. Ecuación de Lippmann-Schwinger

Para describir el transporte, buscamos estados de dispersión que se originan en los contactos. Para eso, deseamos resolver la ecuación de autovalores de uno de estos estados, denominados por $|\psi\rangle$:

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad ; \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

Con ese propósito, se define $|\phi\rangle$, el cual corresponde a un estado libre incidente, y es un autovector de \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle$$

Por ende, lo que buscamos es una solución tal que $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$ cuando $\hat{V} \rightarrow 0$. Se puede comprobar que una expresión la cual cumple con ese objetivo es:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + [E - \hat{H}_0]^{-1} \hat{V} |\psi\rangle$$

Somos capaces de observar que esta expresión no está bien definida, debido a que $[E - \hat{H}_0]^{-1}$ tiene un autovalor que lo anula, lo que impide su invertibilidad. Para darle solución a esto, desplazamos la energía con una cantidad imaginaria infinitesimal, lo que se puede hacer de dos maneras:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + [E - \hat{H}_0 \pm i\eta]^{-1} \hat{V} |\psi^{(\pm)}\rangle$$

Para este caso, tomaremos solo la solución (+). Podemos ver que en la igualdad nuestra incógnita está de ambos lados de la ecuación, por lo que para resolver esto necesitamos ya conocer $|\psi^{(+)}\rangle$. Sin embargo, es posible encontrar una solución al escribir la ecuación nuevamente en $|\psi^{(+)}\rangle$, siendo este el mismo procedimiento realizado en la serie de Dyson. Al reemplazar el término invertido por la función de Green dada en (1.10), obtenemos:

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \hat{g}^r \hat{V} (|\phi\rangle + \hat{g}^r \hat{V} |\psi^{(+)}\rangle)$$

Al seguir iterando este procedimiento, podemos ver que:

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + (\hat{g}^r + \hat{g}^r \hat{V} \hat{g}^r + \hat{g}^r \hat{V} \hat{g}^r \hat{V} \hat{g}^r + \dots) \hat{V} |\phi\rangle$$

Usando la ecuación (1.12), tenemos la ecuación de Lippmann-Schwinger [23]:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \hat{G}^r \hat{V} |\phi\rangle \quad (1.18)$$

Volviendo a nuestro sistema de interés, vamos a considerar un electrón incidente desde el contacto izquierdo en el modo k : $|\psi_{L,k}\rangle$. Queremos saber cómo se ve afectada esta función de onda dentro del dispositivo, para eso, proyectamos la ecuación (1.18) sobre el subespacio del dispositivo D, y aplicamos un operador proyector entre \hat{G}^r y \hat{V} :

$$\langle D | \Psi_k^{\text{total}} \rangle = \underbrace{\langle D | \psi_{L,k} \rangle}_{=0} + \langle D | \hat{G}^r \sum_{D'} |D'\rangle \langle D' | \hat{V} | \psi_{L,k} \rangle$$

El término a la izquierda de la suma es cero, ya que el estado incidente vive en L, por lo que no tiene proyección en D. Por otro lado, no existen términos perturbativos que permitan saltos entre estados desde L a R. Además, el término que conecta a L con D es $\hat{\tau}_L^\dagger$, por lo tanto:

$$|\psi_{D,k}\rangle = \langle D | \hat{G}^r | D \rangle \langle D | \hat{V} | \psi_{L,k} \rangle = \hat{G}_D^r \hat{\tau}_L^\dagger | \psi_{L,k} \rangle \quad (1.19)$$

Esta ecuación nos dice que la función de onda en el dispositivo es la onda incidente, que salta al dispositivo (τ_L^\dagger) y luego se propaga dentro de él (\hat{G}_D^r).

1.6.3. Densidad de corriente

Partimos de la ecuación de Schrödinger para el estado total del sistema:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle .$$

Definimos el proyector operador de la partícula en el dispositivo como:

$$\hat{P}_D |\Psi\rangle \equiv |\psi_D\rangle \quad ; \quad \hat{P}_D |\psi_D\rangle \equiv |\psi_D\rangle$$

Por otro lado, la probabilidad de encontrar la partícula en el dispositivo central se puede

expresar como:

$$P_D(t) = \langle \psi_D(t) | \psi_D(t) \rangle$$

Su derivada temporal viene dada por:

$$\frac{dP_D}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \psi_D | \psi_D \rangle = \langle \dot{\psi}_D | \psi_D \rangle + \langle \psi_D | \dot{\psi}_D \rangle .$$

Utilizando la ecuación de Schrödinger y su conjugada hermítica pasa a substituir $|\dot{\psi}_D\rangle$:

$$\frac{dP_D}{dt} = \langle \dot{\Psi} | \hat{P} | \psi_D \rangle + \langle \psi_D | \hat{P}_D | \dot{\Psi} \rangle$$

$$\frac{dP_D}{dt} = i\hbar \langle \Psi | \hat{H} | \psi_D \rangle - i\hbar \langle \psi_D | \hat{H} | \Psi \rangle$$

$$\frac{dP_D}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left(\langle \psi_D | \hat{H} | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{H} | \psi_D \rangle \right)$$

La variación de la probabilidad en el dispositivo proviene únicamente de los términos de acoplamiento con el contacto j , contenidos en el Hamiltoniano como

$$\hat{H} \supset \hat{\tau}_j + \hat{\tau}_j^\dagger .$$

Por lo tanto,

$$\frac{dP_D}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left(\langle \psi_D | \hat{\tau}_j^\dagger | \psi_j \rangle - \langle \psi_j | \hat{\tau}_j | \psi_D \rangle \right) .$$

Identificando el flujo de probabilidad entre el dispositivo y el contacto j , definimos la densidad de corriente asociada como:

$$J_j = \frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_j | \hat{\tau}_j | \psi_D \rangle - \langle \psi_D | \hat{\tau}_j^\dagger | \psi_j \rangle \right) ,$$

donde e corresponde a la carga eléctrica del electrón. Dicha expresión satisface la ecuación de continuidad para la probabilidad en el dispositivo.

Cualitativamente, la densidad de corriente se entiende como el balance neto del flujo de probabilidad electrónica entre el dispositivo y los contactos. Dado que el sistema se

encuentra en estado estacionario , la densidad de carga en el dispositivo es constante. Por el principio de conservación de carga, esto implica que el flujo de corriente es uniforme en todo el sistema, lo que nos permite calcular la corriente transmitida hacia el contacto R evaluando el flujo de probabilidad proveniente desde el contacto L:

$$J_{L \rightarrow R} = \frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_{R,k} | \hat{\tau}_R | \psi_{D,k} \rangle - \langle \psi_{D,k} | \hat{\tau}_R^\dagger | \psi_{R,k} \rangle \right) \quad (1.20)$$

De la ecuación (1.15), la multiplicación de la tercera fila con el vector nos entrega:

$$\begin{aligned} -\hat{\tau}_R | \psi_D \rangle + \underbrace{(E - \hat{H}_R)}_{\hat{g}_R^{-1}} | \psi_R \rangle &= 0 \\ | \psi_R \rangle &= \hat{g}_R \hat{\tau}_R | \psi_D \rangle \end{aligned}$$

Invocando la ecuación (1.19), obtenemos:

$$| \psi_{R,k} \rangle = \hat{g}_R \hat{\tau}_R \hat{G}_D^r \hat{\tau}_L^\dagger | \Psi_{L,k} \rangle \quad (1.21)$$

Reemplazando $| \psi_{R,k} \rangle$ y $| \psi_{D,k} \rangle$ en (1.20) por (1.21) y (1.19) respectivamente, nos queda la expresión para la densidad de corriente como:

$$\begin{aligned} J_{L \rightarrow R} &= -\frac{ie}{\hbar} \left(\langle \psi_{L,k} | \hat{\tau}_L \hat{G}_D^a \hat{\tau}_R^\dagger \hat{g}_R^a \hat{\tau}_R \hat{G}_D^r \hat{\tau}_L^\dagger | \psi_{L,k} \rangle - \langle \psi_{L,k} | \hat{\tau}_L \hat{G}_D^a \hat{\tau}_R^\dagger \hat{g}_R^r \hat{\tau}_R \hat{G}_D^r \hat{\tau}_L^\dagger | \psi_{L,k} \rangle \right) \\ J_{L \rightarrow R} &= -\frac{ie}{\hbar} \langle \psi_{L,k} | \hat{\tau}_L \hat{G}_D^a \hat{\tau}_R^\dagger (\hat{g}_R^a - \hat{g}_R^r) \hat{\tau}_R \hat{G}_D^r \hat{\tau}_L^\dagger | \psi_{L,k} \rangle \end{aligned} \quad (1.22)$$

A partir de la igualdad encontrada anteriormente, podemos definir la matriz de ancho de línea $\hat{\Gamma}$, la cual nos indica la fuerza de acoplamiento disipativo entre los contactos y el dispositivo [21]:

$$\hat{\Gamma}_R = \hat{\tau}_R^\dagger \hat{A} \hat{\tau}_R = i(\Sigma_R^r - \Sigma_R^a) \quad (1.23)$$

Dado esto, podemos calcular la corriente macroscópica I_R sumando las contribuciones de todos los estados k . Estas contribuciones son ponderadas por la distribución de Fermi $f(E, \mu_L)$, cuya ocupación está determinada por el potencial químico μ_L del contacto izquierdo:

$$I_R = \sum_k f(E, \mu_L) J_{L \rightarrow R} = \frac{e}{\hbar} \sum_k f(E, \mu_L) \langle \psi_{L,k} | \hat{\tau}_L \hat{G}_D^a \hat{\Gamma}_R \hat{G}_D^r \hat{\tau}_L^\dagger | \psi_{L,k} \rangle \quad (1.24)$$

Recordando la siguiente identidad:

$$\int \delta(E - E_k) dE = 1$$

Podemos insertar la expresión anterior y un conjunto completo en la ecuación (1.24), obteniendo:

$$I_R = \frac{e}{\hbar} \int dE \sum_k f_L(E_k) \langle \psi_{L,k} | \hat{\tau}_L \hat{G}_D^a \hat{\Gamma}_R \hat{G}_D^r \hat{\tau}_L^\dagger \sum_m |m\rangle \langle m| \delta(E - E_k) | \psi_{L,k} \rangle$$

Recordando la definición de la función espectral, y reemplazando por la relación encontrada en (1.23), la corriente asociada a los electrones inyectados desde el contacto izquierdo hacia el derecho puede escribirse como:

$$I_R = \frac{2e}{h} \int dE f(E, \mu_L) \text{Tr}(\hat{G}_D^a \hat{\Gamma}_R \hat{G}_D^r \hat{\Gamma}_L)$$

La corriente neta se determina mediante el balance de los flujos de electrones inyectados desde los contactos izquierdo y derecho. Asumiendo que el flujo L→R es positivo:

$$I = \frac{2e}{h} \int dE [f(E, \mu_L) - f(E, \mu_R)] \text{Tr}(\hat{\Gamma}_L \hat{G}_D^r \hat{\Gamma}_R \hat{G}_D^a)$$

Esta expresión corresponde a la fórmula de Landauer-Büttiker [24]. En este marco, la probabilidad de transmisión cuántica $T(E)$ puede identificarse mediante la relación de Fisher-Lee [25] como:

$$T(E) = \text{Tr}(\hat{\Gamma}_L \hat{G}_D^r \hat{\Gamma}_R \hat{G}_D^a) \quad (1.25)$$

Capítulo 2

Modelos y Desarrollo

Los modelos a estudiar consisten de la estructura mencionada en la figura (1.6), compuesta de dos contactos y una zona central de dispersión. Los contactos izquierdo y derecho consisten de una cadena semi-infinita unidimensional, la cual tiene energía de sitio nula, y energía de acople entre primeros vecinos dado por $-t$. Por otro lado, la zona de dispersión está formada por una cadena acoplada en ambos extremos a un punto cuántico. En este trabajo, el QD actúa con un rol de impureza en el sistema. El esquema está dado en la figura (2.1).

Considerando las energías de sitio $\epsilon_0 = 0$ el Hamiltoniano general está dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_{leads} + \hat{H}_{chain} + \hat{V}_{leads-QD} + \hat{V}_{chain-QD}$$

en donde \hat{H}_{leads} , \hat{H}_{chain} corresponden al Hamiltoniano de los contactos y la cadena desacoplados, y $\hat{V}_{leads-QD}$, $\hat{V}_{chain-QD}$ son el acoplamiento entre los contactos y la cadena con el QD, respectivamente. Éstos últimos toman la siguiente forma explícita:

$$\hat{V}_{chain-QD} = V_1(|d\rangle \langle 1, A| + \text{h.c.}) + V_n(|d\rangle \langle N, B| + \text{h.c.})$$

$$\hat{V}_{leads-QD} = V_R(|d\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle d|) + V_L(|d\rangle \langle 0'| + |0'\rangle \langle d|)$$

con $V_{1(n)}$ el acople entre el primer(último) sitio de la cadena con el QD, y $V_{L(R)}$ el acople entre el primer sitio del contacto izquierdo(derecho) con el QD.

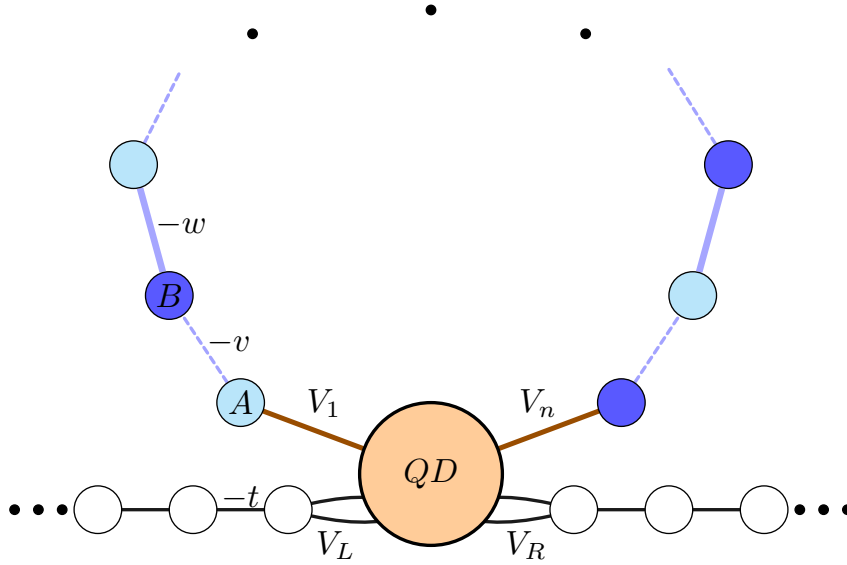


Figura 2.1: Sistema en forma de anillo, compuesto de una cadena SSH acoplada a ambos borde a un punto cuántico. Los contactos izquierdo y derecho se modelan como cadena semi-infinitas unidimensionales, acopladas al QD desde los extremos.

En los modelos a estudiar, las condiciones que imponemos en el sistema para definir un estado como BIC son:

- **Energía real**, ya que esto significa que el estado no presenta una tasa de decaimiento. Esta restricción se expresa como:

$$E = E^* \quad (2.1)$$

- **Probabilidad de transición entre cadena y QD nula**, debido a que el QD representa el puente entre la cadena y los contactos, por lo que al no haber posibilidad de transición, implica que existe un estado localizado en la cadena a pesar de existir en un espectro continuo de energía. Para esto, debemos encontrar los estados $|\psi\rangle$, los cuales cumplan que:

$$\langle d | \hat{V} | \psi \rangle = 0 \quad (2.2)$$

En este sistema, el único canal de transmisión disponible es el QD, por lo tanto, la expresión dada en (1.25) deja de ser la traza de una matriz, si no que corresponde a la función de Green retardada y avanzada del QD, mientras que los anchos de línea dejan de

ser operadores, y se vuelven escalares. Con estas consideraciones, la transmisión en este sistema es [7]:

$$T(E) = \Gamma_L(E)|G_{dd}(E)|^2\Gamma_R(E) \quad (2.3)$$

en donde G_{dd} es la función de Green del QD, y $\Gamma_{L(R)}$ son los ancho de línea del contacto izquierdo(derecho).

Las consideraciones generales para todos los sistemas a estudiar:

- La temperatura es $\mathcal{T} = 0$.
- Los gráficos se realizaron a partir de la inversión del Hamiltoniano para el posterior cálculo de las funciones de Green, dada por la ecuación (1.6). Posteriormente se usaron las ecuaciones (1.14) y (2.3) para graficar la DOS y transmisión, respectivamente. El único cálculo explícito de las funciones de Green se encuentran para el caso de dos dímeros de la cadena SSH.
- En los gráficos, las líneas punteadas en gris corresponden a autovalores de las cadenas desacopladas del QD ($V_1 = V_N = 0$).

2.1. Cadena Trivial

Para estudiar la formación de BICs en el sistema propuesto, partiremos de un sistema más sencillo, en donde transformamos la cadena SSH en una cadena trivial, la cual se caracteriza porque todos los átomos son del mismo tipo ($A = B$), y los acoplamientos inter e intradímero son iguales ($v = w$), lo que implica que no estaremos hablando de dímeros, si no que de sitios.

Los parámetros de los gráficos están en unidades arbitrarias de energía, y toman los valores de $v = w = t = 1.0$, $V_{L(R)} = 0.2$.

2.1.1. Caso minimal: Dos sitios

Partiremos del sistema más simple posible, que consiste de una cadena compuesta de dos átomos, los cuales están acoplados a un QD. En este modelo podemos estudiar la

caracterización de BICs de forma analítica a través del Hamiltoniano matricial del sistema. Con este propósito, podemos modelar un sistema efectivo dado por un QD, cuya energía de sitio contiene tasa de pérdida dada por Γ , siendo esto un mapeo del aporte efectivo de los contactos acoplados al QD [26]. Este enfoque implica una energía compleja, otorgándonos un Hamiltoniano no hermítico de la forma:

$$\hat{H} = -i\Gamma |d\rangle \langle d| - v(|1\rangle \langle 2| + h.c) + (V_1(|d\rangle \langle 1| + h.c) + V_n(|d\rangle \langle 2| + h.c))$$

siendo el primer término correspondiente a la energía del QD con ancho de línea Γ , el segundo representa el acoplamiento intradímico v , mientras que los terceros y cuartos términos describen el acoplamiento del QD con el primer (V_1) y segundo (V_n) sitio del dímico, respectivamente. Para analizar este sistema, se resolvió la ecuación de autovalores, dada por la forma:

$$\begin{pmatrix} -i\Gamma & V_1 & V_n \\ V_1 & 0 & -v \\ V_n & -v & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

Lo que nos otorga el siguiente sistema de ecuaciones:

$$-i\Gamma x_1 + V_1 x_2 + V_n x_3 = \epsilon x_1,$$

$$V_1 x_1 - v x_3 = \epsilon x_2,$$

$$V_n x_1 - v x_2 = \epsilon x_3.$$

Al resolverlo (sección A.1), obtenemos los coeficientes para el autoestado del sistema, dados por:

$$|\psi\rangle = N \begin{pmatrix} \frac{2vV_1V_2 - \epsilon(V_n^2 + V_1^2)}{(vV_1 - \epsilon V_n)(\epsilon + i\Gamma)} \\ \frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = N \left[\frac{2vV_1V_2 - \epsilon(V_n^2 + V_1^2)}{(vV_1 - \epsilon V_n)(\epsilon + i\Gamma)} |d\rangle + \frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} (|1\rangle + |2\rangle) \right]$$

con N la constante de normalización.

Al buscar un BIC, imponemos que el coeficiente de $|d\rangle$ es nulo, ya que nos informa que no existe probabilidad de encontrar el estado en el QD. Para eso, separamos el coeficiente en su parte real e imaginaria:

$$\frac{2vV_1V_2 - \epsilon(V_n^2 + V_1^2)}{(vV_1 - \epsilon V_n)(\epsilon + i\Gamma)} \cdot \frac{(\epsilon - i\Gamma)}{(\epsilon - i\Gamma)} = \frac{[2vV_1V_2 - \epsilon(V_n^2 + V_1^2)](\epsilon - i\Gamma)}{(vV_1 - \epsilon V_n)(\epsilon^2 + \Gamma^2)}$$

Igualamos su parte imaginaria a cero:

$$\frac{[2vV_1V_2 - \epsilon(V_n^2 + V_1^2)](\Gamma)}{(vV_1 - \epsilon V_n)(\epsilon^2 + \Gamma^2)} = 0$$

$$[2vV_1V_2 - \epsilon(V_n^2 + V_1^2)](\Gamma) = 0$$

$$\boxed{\frac{2vV_1V_2}{(V_n^2 + V_1^2)} = \epsilon} \quad (2.4)$$

La segunda condición que imponemos es que el estado asociado a esta energía debe ser autoestado del Hamiltoniano no hermítico. Para eso, sabemos que $|\psi\rangle$ viene dado por la forma:

$$|\psi\rangle = N \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Por lo tanto, calculamos la ecuación de autovalores:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_d - i\Gamma & V_1 & V_n \\ V_1 & 0 & -v \\ V_n & -v & 0 \end{pmatrix} N \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} \\ 1 \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} V_1 \left(\frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} \right) + V_n \\ -v \\ -v \left(\frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} \right) \end{pmatrix}$$

Para que sea autoestado, surgen 3 ecuaciones:

$$V_1 \left(\frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} \right) + V_n = 0$$

$$-v = \epsilon \frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n}$$

$$-v \frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} = \epsilon$$

en donde ϵ es la energía del estado ψ que estamos buscando. Desarrollamos segunda ecuación:

$$-v^2V_1 + v\epsilon V_n = v\epsilon V_n - \epsilon^2V_1$$

$$\boxed{\epsilon = \pm|v|}$$

Sabemos que la autoenergía de este estado es (2.4), además, tomando $v > 0$, igualamos ambas expresiones, obteniendo:

$$\frac{2vV_1V_2}{(V_n^2 + V_1^2)} = \pm v$$

$$2vV_1V_2 = \pm(V_n^2 + V_1^2)$$

$$(V_1 \pm V_n)^2 = 0$$

$$\boxed{V_1 = \pm V_n} \tag{2.5}$$

Por ende, para que un estado sea BIC en este sistema, éste debe cumplir que su energía está asociada a un autovalor de la cadena aislada, y que los acoples del QD a los extremos de la cadena tengan la misma magnitud. Podemos ver este análisis en la figura (2.2), en donde obtenemos BIC en la autoenergía v cuando los acoples son idénticos ($\delta V = 0$), y al romper esta simetría ($\delta V \neq 0$), pasa a ser cuasi-BIC, transmitiéndose al continuo con un ancho muy fino.

2.1.2. Caso general: N sitios

Podemos generalizar este análisis para una cantidad de sitios N en una cadena trivial. Partiendo del siguiente Hamiltoniano de enlace fuerte:

$$\hat{H} = \hat{H}_{QD} + \hat{H}_{cadena} + \hat{V}$$

Con:

$$\hat{H}_{QD} = -i\Gamma |d\rangle \langle d| \quad \hat{H}_{cadena} = -v \sum_{j=1}^{N-1} (|j\rangle \langle j+1| + |j+1\rangle \langle j|)$$

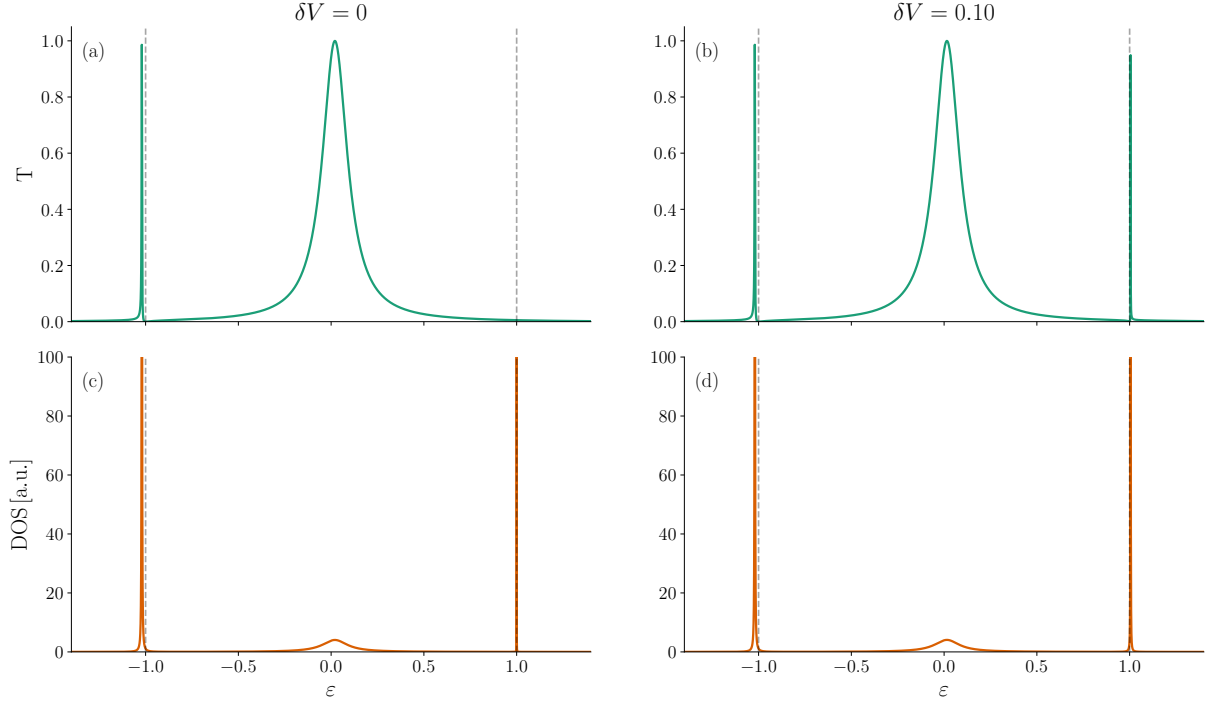


Figura 2.2: Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 2 átomos de una cadena trivial. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).

Y el término de acople entre el QD y la cadena está dado por:

$$\hat{V} = V_1 (|d\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle d|) + V_n (|d\rangle \langle N| + |N\rangle \langle d|)$$

Como vimos para el caso de dos átomos, el BIC provenía desde un autoestado de la cadena aislada, por lo que buscaremos a partir de ese enfoque los BICs en una cadena trivial de N sitios. Considerando una cadena aislada, con condiciones de borde abiertas, los autoestados tienen energías:

$$\epsilon_{k_n} = -2v \cos(k_n), \quad \text{con} \quad k_n = \frac{n\pi}{N+1}, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (2.6)$$

y las funciones de onda en la base de posición son:

$$\psi_k(j) = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin(kj)$$

En donde k es el número de onda, y j representa el índice del sitio. Expresamos los estados de posición en términos de los modos propios de la cadena:

$$|1\rangle = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^N \sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right) |k_n\rangle, \quad |N\rangle = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^N \sin\left(\frac{n\pi N}{N+1}\right) |k_n\rangle$$

Reemplazando estos términos en el Hamiltoniano de acoplamiento, se obtiene:

$$\hat{V} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^N \left[V_1 \sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right) + V_2 \sin\left(\frac{n\pi N}{N+1}\right) \right] (|d\rangle \langle k_n| + |k_n\rangle \langle d|)$$

Si consideramos $V_1 = V_0$, y $V_n = V_0 + \delta V$, la perturbación se reescribe como:

$$\hat{V} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^N \left[V_0 \left(\sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right) + \sin\left(\frac{n\pi N}{N+1}\right) \right) + \delta V \sin\left(\frac{n\pi N}{N+1}\right) \right] (|d\rangle \langle k_n| + |k_n\rangle \langle d|)$$

Para el caso donde los acoples entre el primer y último sitio de la cadena son simétricos, tenemos que $\delta V = 0$, por lo tanto:

$$\hat{V} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^N \left[V_0 \left(\sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right) + \sin\left(\frac{n\pi N}{N+1}\right) \right) \right] (|d\rangle \langle k_n| + |k_n\rangle \langle d|) \quad (2.7)$$

Usando identidades trigonométricas (sección A.2):

$$\sin\left(\frac{n\pi N}{N+1}\right) = (-1)^{n+1} \sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right)$$

Por lo tanto:

$$\hat{V} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{n=1}^N V_0 [1 + (-1)^{n+1}] \sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right) (|d\rangle \langle k_n| + |k_n\rangle \langle d|)$$

El factor $[1 + (-1)^{n+1}]$ es cero para n par, lo que implica que los autoestados de la cadena con modo de energía ϵ_{2n} no se acoplan al QD, ya que el término perturbativo dado por \hat{V} se anula, lo cual constituye un BIC en este sistema. En contraste, para $\delta V \neq 0$, podemos observar que no se pueden formar BICs, debido a que existe probabilidad no nula de salto hacia el QD para cualquier modo de la cadena.

El análisis realizado previamente se visualiza en el comportamiento en la figura (2.3), en donde para un sistema de 10 sitios, vemos que los estados que no se transmiten por el QD vienen dados por energías con n par, consistentes con la ecuación (2.6). Los resultados calculados numéricamente se encuentran en la tabla 2.1. Además, observamos que los estados que estaban protegidos en la cadena, se transmiten al continuo al romper la

simetría de los acoplos, lo cual está dado por el hecho de que no se anula el término de salto ante acoplos asimétricos.

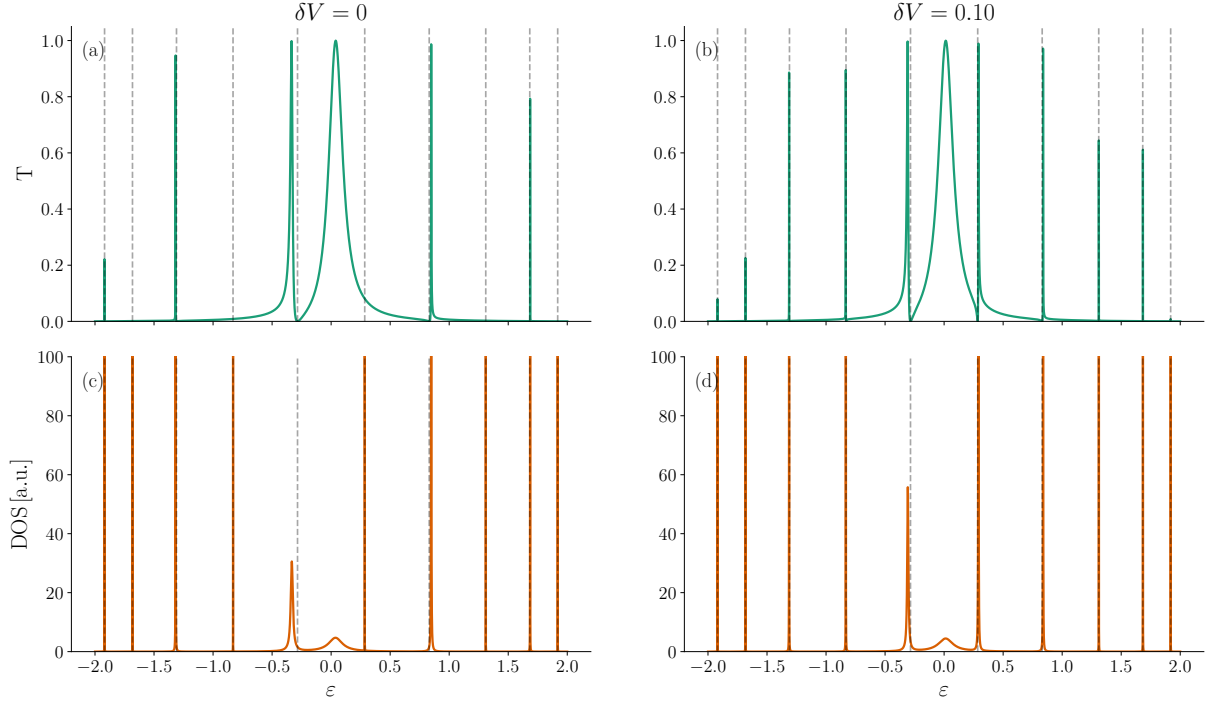


Figura 2.3: Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 10 átomos de una cadena trivial. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).

Modo n	E_n^{num}	E_n^{exacto}	Error
1	-1,91898595	-1,91898595	0,0
2	-1,68250707	-1,68250707	$8,9 \times 10^{-16}$
3	-1,30972147	-1,30972147	$4,4 \times 10^{-16}$
4	-0,83083003	-0,83083003	$-2,2 \times 10^{-16}$
5	-0,28462968	-0,28462968	$5,6 \times 10^{-17}$
6	0,28462968	0,28462968	$1,1 \times 10^{-16}$
7	0,83083003	0,83083003	0,0
8	1,30972147	1,30972147	$-2,2 \times 10^{-16}$
9	1,68250707	1,68250707	$-4,4 \times 10^{-16}$
10	1,91898595	1,91898595	$2,2 \times 10^{-16}$

Cuadro 2.1: Comparación entre los autovalores numéricos de la cadena trivial aislada y las energías exactas dadas por $\epsilon_n = -2v \cos\left(\frac{n\pi}{N+1}\right)$.

2.2. Cadena SSH

2.2.1. Dos dímeros

La construcción del sistema comenzó a partir del estudio de una cadena SSH de dos dímeros, sin acoplos externos. Considerando la energía de sitios $\epsilon_0 = 0$, se puede escribir el Hamiltoniano de enlace fuerte de la forma:

$$\hat{H} = -v(|1, A\rangle\langle 2, A| + |1, B\rangle\langle 2, B| + h.c.) - w(|2, A\rangle\langle 1, B| + h.c.)$$

En donde $-v$ y $-w$ corresponde a los acoplamientos intradímero e interdímero, respectivamente. De forma matricial, el Hamiltoniano se escribe como:

$$[\hat{H}] = \begin{bmatrix} 0 & -v & 0 & 0 \\ -v & 0 & -w & 0 \\ 0 & -w & 0 & -v \\ 0 & 0 & -v & 0 \end{bmatrix}$$

Con esta información, diagonalizamos la matriz, obteniendo los siguientes autovalores de energía:

$$\epsilon_1 = \frac{1}{2}(-w - \Delta) \quad \epsilon_2 = \frac{1}{2}(w - \Delta) \quad \epsilon_3 = \frac{1}{2}(\Delta - w) \quad \epsilon_4 = \frac{1}{2}(w + \Delta)$$

Con $\Delta = \sqrt{w^2 + 4v^2}$. Posteriormente, obtenemos los autovectores normalizados del sistema $|\chi_i\rangle$, correspondientes a cada autoenergía ϵ_i :

$$|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 + \frac{(w+\Delta)^2}{4v^2}\right)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{w+\Delta}{2v} \\ \frac{w+\Delta}{2v} \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\chi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 + \frac{(w-\Delta)^2}{4v^2}\right)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\Delta-w}{2v} \\ -\frac{\Delta-w}{2v} \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$|\chi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 + \frac{(w-\Delta)^2}{4v^2}\right)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{w-\Delta}{2v} \\ \frac{w-\Delta}{2v} \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\chi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 + \frac{(w+\Delta)^2}{4v^2}\right)}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{w+\Delta}{2v} \\ \frac{w+\Delta}{2v} \\ -1 \end{pmatrix}$$

Usando la forma de Lehman dado por la ecuación (1.8), podemos construir la matriz completa de las funciones de Green de la cadena SSH aislada. La forma explícita de ésta se encuentra en la sección B.1.

Ahora, podemos añadir al sistema el QD, a través de un acoplamiento con el primer y último sitio de la cadena de forma simultánea. El nuevo Hamiltoniano del sistema toma la siguiente expresión:

$$\hat{H} = \hat{H}_{SSH} + V_1(|d\rangle \langle 1, A| + h.c) + V_n(|d\rangle \langle 2, B| + h.c)$$

en donde $V_{1(N)}$ son los valores de los acoplamientos entre el QD con el primer(último) sitio de la cadena, respectivamente. Podemos observar que el operador toma la forma de un Hamiltoniano conocido más una perturbación, como se ve en la ecuación (1.9). Por lo tanto, podemos usar la ecuación de Dyson, dada en (1.11), para poder calcular la función de Green del sistema completo SSH-QD. Con eso, podemos sacar el elemento de la matriz correspondiente a la función de Green del punto cuántico, G_{dd} , de la siguiente forma:

$$\langle d | \hat{G} | d \rangle = \langle d | \hat{g} | d \rangle + \langle d | \hat{g} \hat{V} \hat{G} | d \rangle$$

Recordando la relación de completitud de bases:

$$\sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n| = \mathbb{I}_{N \times N}$$

Podemos introducir estos conjuntos completos entre los operadores \hat{g} y \hat{V} , y entre \hat{V} y \hat{G} :

$$G_{dd} = g_{dd} + \langle d | \hat{g} \sum_n |n\rangle \langle n| \hat{V} \sum_m |m\rangle \langle m| \hat{G} | d \rangle$$

Los cálculos explícitos se encuentran en la sección B.2. Al realizar este procedimiento, se obtiene:

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd}[V_1 \langle 1, A | \hat{G} | d \rangle + V_n \langle 2, B | \hat{G} | d \rangle]$$

Para poder cerrar el sistema, necesitamos calcular los elementos de matriz $\langle 1, A | \hat{G} | d \rangle$ y

$\langle 2, B | \hat{G} | d \rangle$, usando nuevamente la ecuación de Dyson:

$$\langle 1, A | \hat{G} | d \rangle = \langle 1, A | \hat{g} | d \rangle + \langle 1, A | \hat{g} \hat{V} \hat{G} | d \rangle$$

$$G_{1A;d} = g_{1A;d} + \langle 1A | \hat{g} \sum_n |n\rangle \langle n| \hat{V} \sum_m |m\rangle \langle m| \hat{G} | d \rangle$$

Usando el hecho de que antes de la perturbación entre el QD con la cadena, el sitio $|1, A\rangle$ estaba desconectado con el QD, por lo que $g_{1A;d} = 0$, entonces:

$$G_{1A;d} = G_{dd}(V_1 \cdot g_{1A;1A} + V_N \cdot g_{1A;2B})$$

Realizamos el mismo procedimiento para $\langle 2, B | \hat{G} | d \rangle$:

$$\langle 2B | \hat{G} | d \rangle = \langle 2B | \hat{g} | d \rangle + \langle 2B | \hat{g} \hat{V} \hat{G} | d \rangle$$

$$G_{2B;d} = g_{2B;d} + \langle 2B | \hat{g} \sum_n |n\rangle \langle n| \hat{V} \sum_m |m\rangle \langle m| \hat{G} | d \rangle$$

$$G_{2B;d} = G_{dd}(V_1 \cdot g_{2B;1A} + V_2 \cdot g_{2B;2B})$$

Donde hemos usado el mismo argumento que el caso anterior para deshacernos de $g_{2B;d}$.

Reemplazando estos valores en la función de Green del QD, obtenemos:

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd} \cdot G_{dd}[V_1(V_1 \cdot g_{1A;1A} + V_n \cdot g_{1A;2B}) + V_n(V_1 \cdot g_{2B;1A} + V_n \cdot g_{2B;2B})]$$

$$G_{dd} - g_{dd} \cdot G_{dd}[V_1^2 \cdot g_{1A;1A} + V_n^2 \cdot g_{2B;2B} + V_1 V_n (g_{2B;1A} + g_{1A;2B})] = g_{dd}$$

$$G_{dd}(1 - g_{dd}[V_1^2 \cdot g_{1A;1A} + V_n^2 \cdot g_{2B;2B} + V_1 V_n (g_{2B;1A} + g_{1A;2B})]) = g_{dd}$$

$$G_{dd} = [g_{dd}^{-1} - (V_1^2 \cdot g_{1A;1A} + V_n^2 \cdot g_{2B;2B} + V_1 V_n (g_{2B;1A} + g_{1A;2B}))]^{-1}$$

Considerando el caso de acoples simétricos entre QD-SSH, es decir, $V_1 = V_N = V$, la función de Green resulta en:

$$G_{dd} = [g_{dd}^{-1} - V^2(g_{1A;1A} + g_{2B;2B} + g_{2B;1A} + g_{1A;2B})]^{-1}$$

Reemplazando los valores de la matriz de la función de Green de la cadena aislada, y

usando:

$$g_{dd} = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_d}$$

obtenemos la expresión explícita de G_{dd} :

$$G_{dd}(\epsilon) = \left[\epsilon - \epsilon_d - 4V^2 \left(\frac{|N_1|^2}{\epsilon - \epsilon_1} + \frac{|N_3|^2}{\epsilon - \epsilon_3} \right) \right]^{-1}$$

en donde N_i corresponde al coeficiente de normalización de los autovectores $|\chi_i\rangle$.

Para obtener el sistema completo, se añaden los contactos por izquierda y por derecha del QD. Para ese propósito, modelamos los contactos como perturbaciones dados por el siguiente operador:

$$\hat{V} = V_R(|d\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle d|) + V_L(|d\rangle \langle 0'| + |0'\rangle \langle d|)$$

Con $V_{L(R)}$ los acoples entre el primer sitio del contacto izquierdo(derecho) con el QD, y $|0\rangle, |0'\rangle$, los kets que representan los primeros sitios de cada cadena respectivamente.

Podemos utilizar nuevamente la ecuación de Dyson, con la diferencia de que \hat{g} ahora corresponde al operador de Green de la cadena SSH conectada con el QD, \hat{V} es la perturbación dada por los contactos, mientras que \hat{G} es el Green del sistema completo, es decir, acoplando los contactos al QD.

$$\hat{G} = \hat{g} + \hat{g}\hat{V}\hat{G}$$

$$\langle d | \hat{G} | d \rangle = \langle d | \hat{g} | d \rangle + \langle d | \hat{g} \hat{V} \hat{G} | d \rangle$$

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd}(V_R \langle 0 | \hat{G} | d \rangle + V_L \langle 0' | \hat{G} | d \rangle)$$

Calculamos los elementos de matriz presentes en G_{dd} para cerrar el sistema (sección B.3):

$$\langle 0 | \hat{G} | d \rangle = \langle 0 | \hat{g} | d \rangle + \langle 0 | \hat{g} \hat{V} \hat{G} | d \rangle$$

El primer término de la derecha de la igualdad es cero, mientras que al insertar conjuntos completos obtenemos:

$$\langle 0 | \hat{G} | d \rangle = g_{00} V_R G_{dd}$$

En donde g_{00} es la función de Green del primer sitio del contacto izquierdo, que a priori desconocemos. Análogamente para $\langle 0' | \hat{G} | d \rangle$:

$$\langle 0' | \hat{G} | d \rangle = g_{0'0'} V_L G_{dd}$$

Reemplazamos estos elementos en la función de Green del QD:

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd}(V_R \cdot g_{00} \cdot V_R \cdot G_{dd} + V_L \cdot g_{0'0'} \cdot V_L \cdot G_{dd})$$

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd}(V_R^2 \cdot g_{00} + V_L^2 \cdot g_{0'0'})G_{dd}$$

$$G_{dd} = \frac{g_{dd}}{1 - g_{dd}(V_R^2 g_{00} + V_L^2 g_{0'0'})}$$

$$G_{dd} = \frac{1}{g_{dd}^{-1} - (V_R^2 g_{00} + V_L^2 g_{0'0'})}$$

Como cada contacto representa el mismo tipo de cadena, la función de Green del sitio $|0\rangle$ es la misma que la del sitio $|0'\rangle$. El desarrollo de ésta se encuentra en la sección B.4, y su expresión es:

$$G_{00} = G_{0'0'} = \frac{-e^{ik}}{t} = \frac{-\cos(k) - i\sin(k)}{t}$$

En donde k y t corresponden al número de onda del electrón, y el acoplamiento entre sitios de la cadena, respectivamente.

Por lo tanto, la función de Green del QD acoplado a los extremos de la cadena SSH y a los contactos es:

$$G_{dd}^{-1} = \epsilon - \epsilon_d - 4V^2 \left(\frac{|N_1|^2}{\epsilon - \epsilon_1} + \frac{|N_3|^2}{\epsilon - \epsilon_3} \right) - \frac{V_R^2 + V_L^2}{t} (-\cos(k) - i\sin(k))$$

Con esta expresión, podemos calcular las propiedades de interés, siendo estas la densidad de estados y la transmisión en el QD, dadas por las expresiones (1.14) y (2.3), respectivamente. Para esta última $\Sigma_{L(R)}$ corresponde al término de autoenergía. La expresión de éstos es la que se calculó anteriormente:

$$\Sigma_{L(R)} = \frac{V_{L(R)}^2}{t} (-\cos(k) - i\sin(k))$$

donde k es el número de onda del contacto semi-infinito. Además, es posible considerar el llamado límite de banda ancha, en el cual se asume que la densidad de estados de los contactos es aproximadamente constante en el rango energético relevante. Bajo esta aproximación, las autoenergías dejan de depender de la energía, de modo que los anchos de línea Γ_L y Γ_R pueden considerarse constantes, simplificando notablemente la expresión de la transmisión sin alterar la física esencial del problema. Por ende, consideramos la unidad energética como $\Gamma = \Gamma_R + \Gamma_L$, y medimos todos nuestros parámetros a partir de esa unidad. Para los gráficos, consideramos $w = \Gamma$, $v = 0,312\Gamma$, y $V_1, V_2 < v$.

Posteriormente, buscamos las condiciones de los estados que no se transmiten por el QD, formando BICs en el sistema SSH-QD. Para eso, mantendremos el enfoque usado en las cadenas triviales, donde los autoestados de la cadena aislada tiene la posibilidad de ser BIC. Con ese propósito, explotaremos las simetrías presentes en la cadena SSH aislada del QD, y analizamos el elemento de matriz de transición. Recordando que la perturbación de la cadena dada por el QD es:

$$\hat{V} = V_1(|d\rangle \langle 1, A| + |1, A\rangle \langle d|) + V_N(|d\rangle \langle 2, B| + |2, B\rangle \langle d|) \quad (2.8)$$

Considerando acoples simétricos $V_1 = V_N = V$:

$$\hat{V} = V(|d\rangle \langle 1, A| + |d\rangle \langle N, B| + h.c) \quad (2.9)$$

Analizamos el elemento de matriz de transición dado un estado $|\psi\rangle$, el cual corresponde a un autoestado de la cadena SSH:

$$\langle d| \hat{V} |\psi\rangle = V(\langle d|d\rangle \langle 1, A|\psi\rangle + \langle d|d\rangle \langle N, B|\psi\rangle) = 0$$

$$V[\psi(1, A) + \psi(2, B)] = 0$$

$$\psi(1, A) = -\psi(2, B) \quad (2.10)$$

La ecuación (2.10) nos indica la condición que debe cumplir el estado $|\psi\rangle$ para que no exista amplitud de transferencia entre el QD y el estado de la cadena, implicando la formación de BIC. Sabemos que esta condición se cumple para la cadena SSH, ya que existe el operador paridad, tal que para el Hamiltoniano en la base de sitios:

$$[\hat{P}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -v & 0 & 0 \\ -v & 0 & -w & 0 \\ 0 & -w & 0 & -v \\ 0 & 0 & -v & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -v & 0 & 0 \\ -v & 0 & -w & 0 \\ 0 & -w & 0 & -v \\ 0 & 0 & -v & 0 \end{pmatrix} = \hat{H}$$

Por otro lado, recordando el espectro simétrico de la cadena SSH debido a la simetría quiral, buscamos analizar que sucede con un estado de energía $-E$ si es que existe un estado con energía E que cumpla con la condición de BIC.

Al igual que el operador paridad, como todas las energías son reales, podemos definir \hat{C} de forma matricial:

$$[\hat{C}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Se verifica fácilmente que se cumple la anticonmutación entre operadores en el caso que estamos estudiando:

$$\hat{C}\hat{H}\hat{C}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -v & 0 & 0 \\ -v & 0 & -w & 0 \\ 0 & -w & 0 & -v \\ 0 & 0 & -v & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & v & 0 & 0 \\ v & 0 & w & 0 \\ 0 & w & 0 & v \\ 0 & 0 & v & 0 \end{pmatrix} = -\hat{H}$$

Como el Hamiltoniano contiene esta simetría, podemos decir lo siguiente:

Si tenemos un estado $|\psi(E)\rangle$, el cual cumple con la condición de BIC impuesta por la paridad de la cadena, entonces asumiremos que el estado $|\psi(-E)\rangle$ también cumple con dicha condición. Con esto, tenemos:

$$\langle d | \hat{V} | \psi(-E) \rangle = V[\langle d | d \rangle \langle 1, A | \psi(-E) \rangle + \langle d | d \rangle \langle 2, B | \psi(-E) \rangle]$$

$$\langle d | \hat{V} | \psi(-E) \rangle = V[\langle 1, A | \hat{C} | \psi(E) \rangle + \langle 2, B | \hat{C} | \psi(E) \rangle]$$

Insertamos conjuntos completos:

$$\langle d | \hat{V} | \psi(-E) \rangle = V[\langle 1, A | \hat{C} \sum_k |k\rangle \langle k | \psi(E) \rangle + \langle 2, B | \hat{C} \sum_m |m\rangle \langle m | \psi(E) \rangle]$$

Como \hat{C} es una matriz diagonal, tenemos:

$$\langle d | \hat{V} | \psi(-E) \rangle = V[C_{1A;1A} \langle 1, A | \psi \rangle + C_{2B;2B} \langle 2, B | \psi \rangle]$$

Por la definición de \hat{C} , sabemos que el primer elemento de la matriz es 1, mientras que el último toma el valor de -1, por lo tanto:

$$\langle d | \hat{V} | \psi(-E) \rangle = V[\psi(1, A) - \psi(2, B)]$$

Como asumimos que este estado es un BIC, el elemento de transición debe ser cero, por lo que debe cumplirse que:

$$\psi(1, A) = \psi(2, B)$$

Sin embargo, esto no es posible que se cumpla de forma simultánea para los estados $|\psi(E)\rangle$ y $|\psi(-E)\rangle$. Si afirmamos la ecuación (2.10) como verdadera, entonces el elemento de transición para su contraparte energética es:

$$\langle d | \hat{V} | \psi(-E) \rangle = V[\psi(1, A) + \psi(1, A)] \neq 0$$

Es por esto que el estado $|\psi(-E)\rangle$ no puede ser un BIC puro, debido a que su probabilidad de salto al QD no se puede anular. Por ende, si un estado $|\psi\rangle$ con energía E es un BIC, entonces el estado $\hat{C} |\psi\rangle$ con energía $-E$ **no puede ser BIC**.

Físicamente, esto se debe a que la existencia del BIC depende de una estricta interferencia destructiva entre las amplitudes de probabilidad de los bordes. La simetría quiral, al invertir el signo de la función de onda en solo una de las subredes, altera la fase relativa

entre estos puntos de contacto. Esta operación rompe la simetría de cancelación original, eliminando la interferencia destructiva total, abriendo el canal de escape hacia el punto cuántico para el estado de energía negativa.

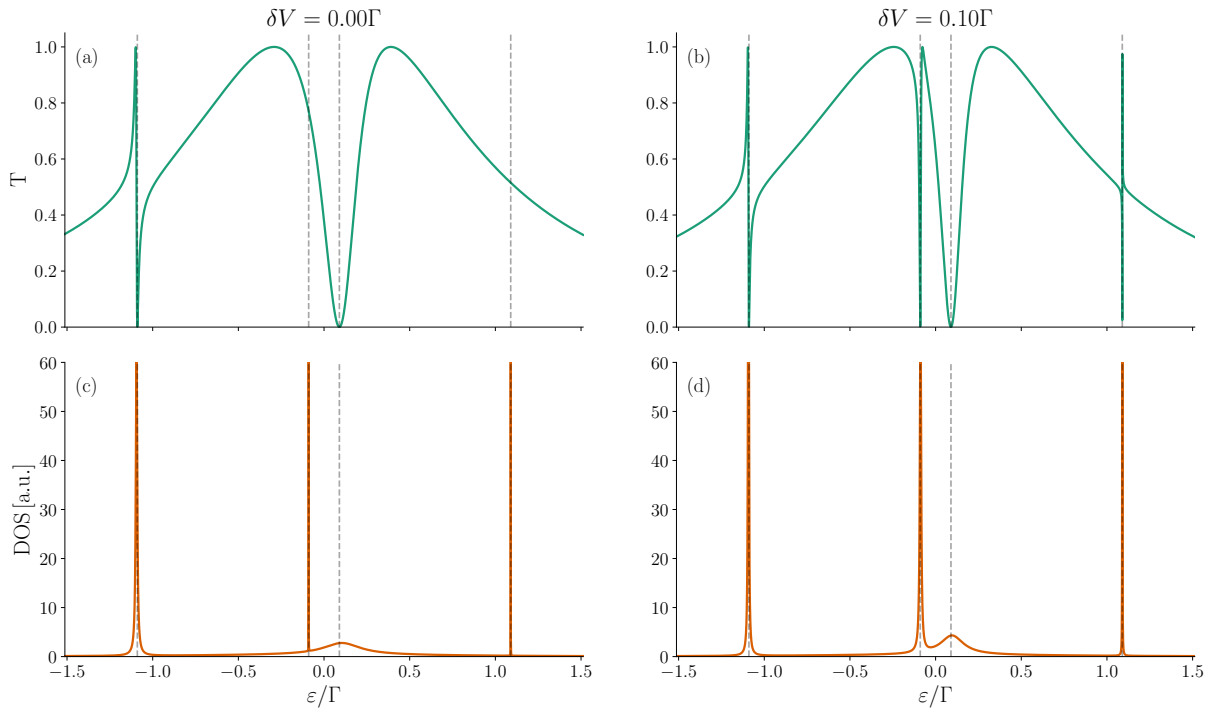


Figura 2.4: Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 2 dímeros de una cadena SSH. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).

La figura (2.4) nos muestra la DOS y transmisión del sistema de dos dímeros. Aquí podemos observar como se cumplen todas estas condiciones impuestas en la formación de BICs, ya que tenemos los autoestados $|\chi_2\rangle$ y $|\chi_4\rangle$, los cuales cumplen con la ecuación (2.10), y las resonancias dadas por las energías ϵ_2 y ϵ_4 no se acoplan al QD ante la presencia de acoplos simétricos. Por otro lado, los estados $|\chi_1\rangle$ y $|\chi_3\rangle$, los cuales tienen energías $\epsilon_1 = -\epsilon_4$ y $\epsilon_3 = -\epsilon_2$, no forman BICs ante acoplos simétricos. Al romper la simetría, los estados BICs se quiebran y presentan un ancho muy pequeño en la resonancia de la transmisión, siendo esta la firma de un cuasi-BIC.

2.2.2. N dímeros

Si pensamos para el caso de N dímeros en la cadena trivial, encontramos las energías exactas a las cuales se forma un BIC en el sistema, sin embargo, realizar la misma tarea

para una cadena SSH es una misión de vastas magnitudes, ya que por la forma de su Hamiltoniano, con dos acoplamientos diferentes entre sitios, las ecuaciones para calcular los k que cumplan las condiciones impuestas anteriormente se vuelven trascendentales. Sin embargo, al realizar el mismo procedimiento de la sección anterior, la condición para que un estado del sistema sea BIC es que el estado sea antisimétrico bajo paridad:

$$\psi(1, A) = -\psi(N, B) \quad (2.11)$$

Ya que siempre existe un operador paridad matricial \hat{P} para cualquier dimensión del Hamiltoniano de la cadena SSH, el cual cumpla con la ecuación (1.3). La forma general de este operador es de la forma:

$$\hat{P} = R_N \otimes \sigma_x$$

Con R_N la matriz identidad inversa de dimensión N , siendo este número la cantidad de dímeros de la cadena, y σ_x la matriz de Pauli X. Además, también se cumple la imposición de la simetría quirral en los BICs para N dímeros, ya que el siguiente operador matricial cumple con la relación impuesta en (1.2):

$$\hat{C} = \mathbf{I}_n \otimes \sigma_z \quad (2.12)$$

En donde \mathbf{I}_n es la matriz identidad de dimensión N , y σ_z la matriz de Pauli Z.

Podemos comprobar esta condición de forma numérica. Calculamos los autovalores de la cadena aislada, y verificamos el primer y último componente de los autovectores a partir del valor asignado de v y w , y comparamos con las energías de resonancias en la DOS y la transmisión. Este procedimiento se realizó para 5 dímeros, y los resultados se pueden ver en la tabla 2.2 y figura (2.5), respectivamente.

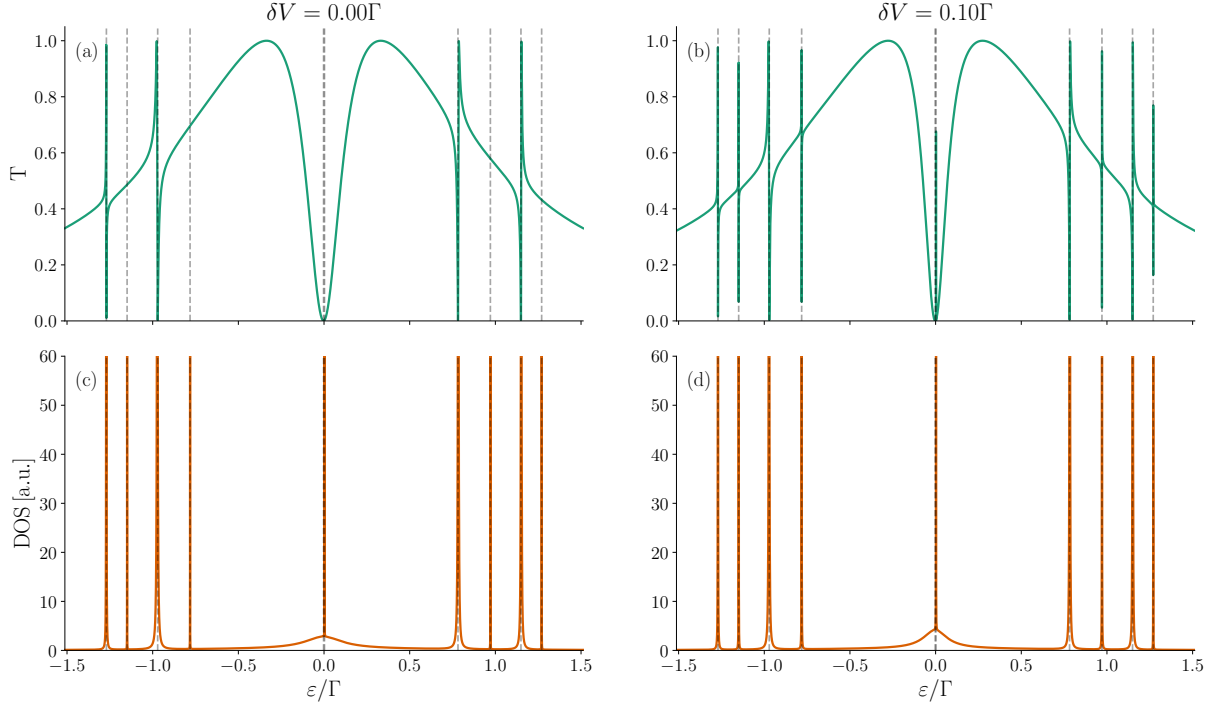


Figura 2.5: Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 5 dímeros de una cadena SSH. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).

Modo n	Energía ϵ_n	ψ_1	ψ_N
1	-1,2702	$+6,08 \times 10^{-2}$	$+6,08 \times 10^{-2}$
2	-1,1494	$+1,12 \times 10^{-1}$	$-1,12 \times 10^{-1}$
3	-0,9709	$+1,39 \times 10^{-1}$	$+1,39 \times 10^{-1}$
4	-0,7819	$-1,15 \times 10^{-1}$	$+1,15 \times 10^{-1}$
5	$-2,69 \times 10^{-3}$	$-6,72 \times 10^{-1}$	$-6,72 \times 10^{-1}$
6	$+2,69 \times 10^{-3}$	$+6,72 \times 10^{-1}$	$-6,72 \times 10^{-1}$
7	+0,7819	$-1,15 \times 10^{-1}$	$-1,15 \times 10^{-1}$
8	+0,9709	$+1,39 \times 10^{-1}$	$-1,39 \times 10^{-1}$
9	+1,1494	$+1,12 \times 10^{-1}$	$+1,12 \times 10^{-1}$
10	+1,2702	$-6,08 \times 10^{-2}$	$+6,08 \times 10^{-2}$

Cuadro 2.2: Autovalores de la cadena SSH y amplitudes de los autovectores en los sitios de borde.

Podemos observar en las DOS que los picos corresponden a autoenergías de la cadena SSH. Al tener acoplos simétricos, vemos que los estados antisimétricos ante paridad forman un BIC, ya que no presentan proyección en la transmisión, mientras que los que son simétricos, presentan resonancias agudas. Al igual que el resto de casos anteriores, al quebrar la simetría, los estados se transmiten con tiempo de vida extenso, formando cuasi-BICs.

2.2.3. BIC Topológico

Para los parámetros de energía dentro del sistema estudiado, al aumentar el número de dímeros presente, se originó un BIC cercano a energía cero. En la figura (2.6), se graficó este estado para una cantidad de nueve dímeros. Una característica especial es que éste se encuentra protegido frente a perturbaciones del sistema, dado que a pesar de ir variando en mayor medida la diferencia δV , el estado sigue sin presentar una firma en la transmisión, a diferencia de los BICs convencionales de los casos anteriores.

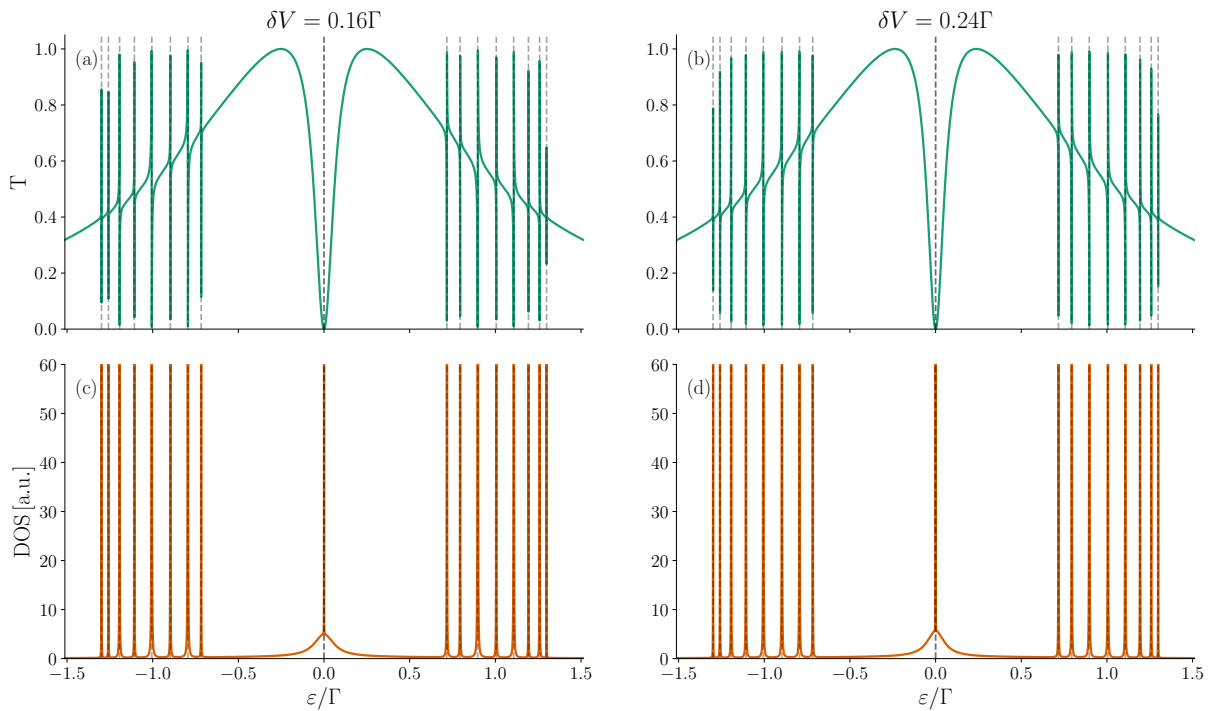


Figura 2.6: Comparación entre distintos casos asimétricos, $\delta V = 0,16\Gamma$, (paneles (a) y (c)) y $\delta V = 0,24\Gamma$ (paneles (b) y (d)) para un sistema de 9 dímeros de una cadena SSH. Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).

Se ve que se puede variar de muchas formas los acoplos de la cadena al QD, y a pesar de que las bandas de energía del sistema varían de un régimen a otro, la única forma de que el BIC robusto desaparezca, corresponde a cuando existe una transición de fase topológica en la cadena SSH, dada por el panel (d) de la figura (2.7).

Además, se estudió las consecuencias para el BIC al variar el número de dímeros. Para la figura (2.8) se estudió el caso de doce dímeros. Podemos observar que en la fase trivial de la cadena ($r < 1$), no existe un estado asociado a energía cero en la DOS, mientras que al transicionar a la fase topológica ($r > 1$), existe un pico de estados dicho valor de

energía, el cual no se transmite por el QD. Esto confirma que el BIC se mantiene robusto ante la perturbación de la simetría de acoplos SSH-QD, y de la deformación geométrica del sistema, dada por el aumento de dímeros.

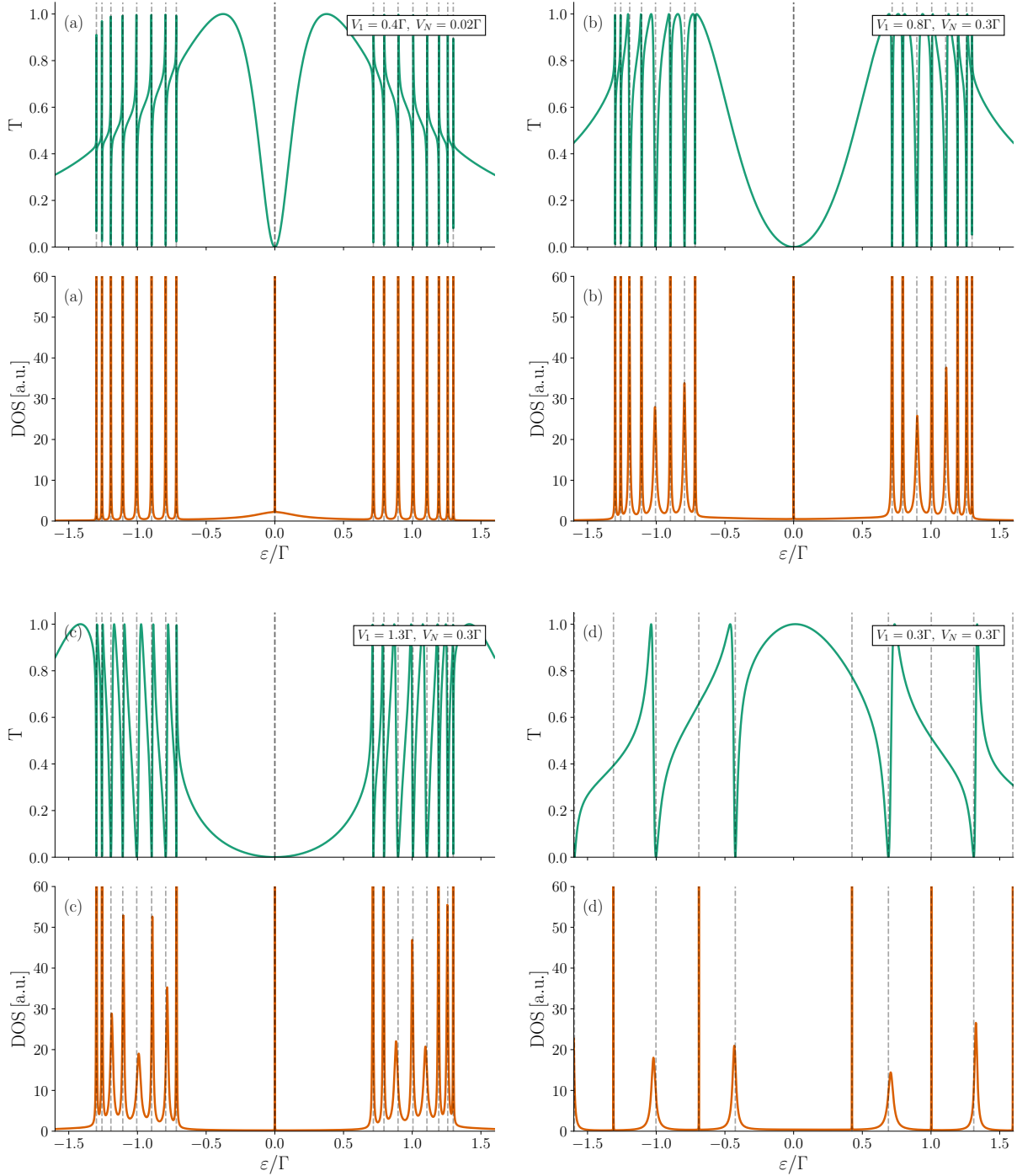


Figura 2.7: Transmisión y DOS para sistema de 9 dímeros de cadena SSH, comparando distintos valores del acoplamiento $V_{1(N)}$. En los paneles (a)–(c) se fija $v = 0,3125\Gamma$, mientras que en el panel (d) se considera $v = 1,3125\Gamma$. En todos los casos el acoplamiento intercelda se mantiene constante en $w = \Gamma$.

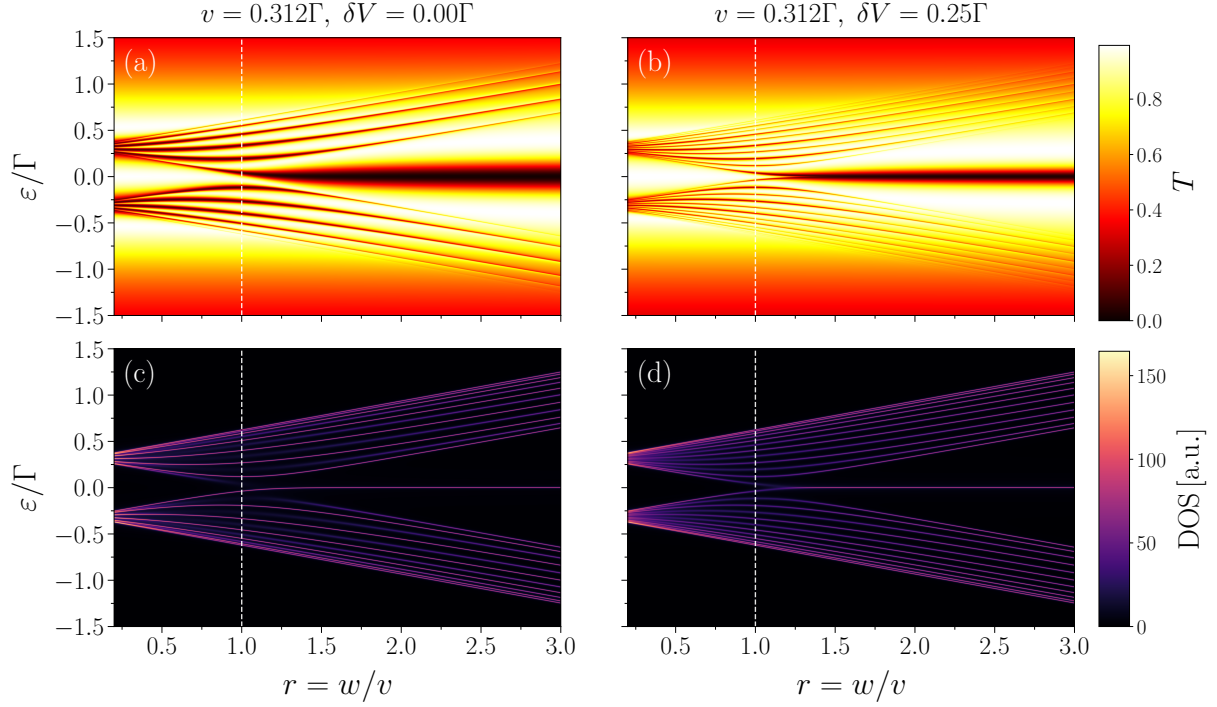


Figura 2.8: Comparación entre el caso simétrico ($\delta V = 0$, paneles (a) y (c)) y asimétrico ($\delta V \neq 0$, paneles (b) y (d)) para un sistema de 12 dímeros de una cadena SSH, al transicionar desde fase trivial ($r < 1$) a fase topológica ($r > 1$). Paneles superiores: transmisión $T(\epsilon)$. Paneles inferiores: densidad de estados global (DOS).

Por otro lado, al graficar la LDOS por sitio, dado por la figura (2.9), podemos ver que en la fase topológica, el estado a energía cero se encuentra localizado en uno de los bordes de la cadena SSH, lo que está dado por la correspondencia bulto-borde.

Estos indicios vistos en las gráficas anteriores apuntan a que el estado es de naturaleza topológica, sin embargo, no se puede verificar formalmente un invariante topológico para todo el sistema de forma convencional, dado que el sistema es finito y carece de periodicidad traslacional estricta, por lo que la definición convencional del *winding number* ν mediante integración en el espacio recíproco k deja de ser directamente aplicable.

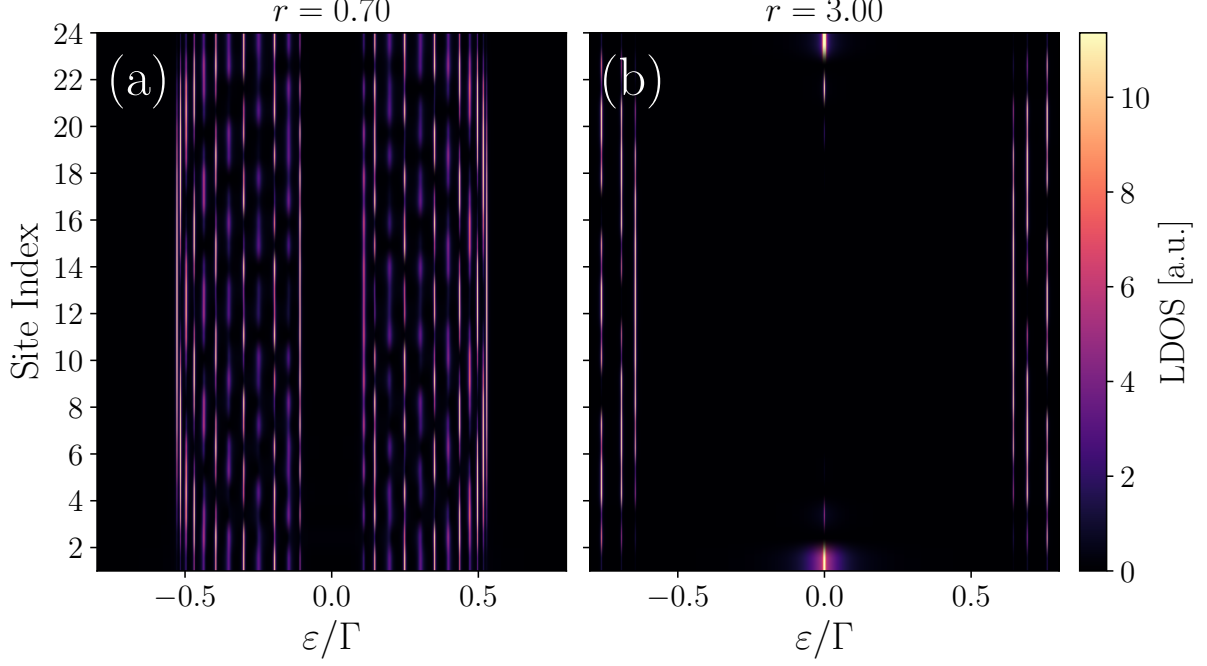


Figura 2.9: Densidad de estados por sitio para un sistema de cadena SSH de doce dímeros, en el caso asimétrico $\delta V \neq 0$. El panel de la izquierda muestra la cadena en la fase trivial, mientras que en el panel de la derecha la cadena se encuentra en fase topológica.

A pesar de esto, dado el marco teórico de la sección 1.4.4, es posible determinar la naturaleza de este BIC, basándonos en la Ref. [27]. En este estudio, se aplica el concepto de sub-simetrías para la construcción de BICs topológicos, para eso, se considera el sistema global como la composición de dos subsistemas acoplados, donde uno de estos subsistemas se encuentra en fase topológica no trivial, mientras que la fase del otro no está definida a priori. El Hamiltoniano asociado al sistema global es:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_T & \hat{V} \\ \hat{V}^\dagger & \hat{H}_A \end{pmatrix}$$

donde \hat{H}_T corresponde al Hamiltoniano del subsistema topológico, \hat{H}_A describe el subsistema auxiliar, y \hat{V} representa el operador de acoplamiento entre ambos subsistemas. Por otro lado, podemos definir los autovectores de cada subsistema $\Psi_{T(A)}$ con sus respectivos autovalores $E_{T(A)}$. Si es que el acoplamiento \hat{V} es nulo, entonces los vectores $[\Psi_T, 0]^T$ y $[0, \Psi_A]^T$ siguen siendo autoestados de \hat{H} . En este caso, consideramos un modo de borde dado por el sistema topológico, $|\Psi_{N0}\rangle$, el cual es autovector de \hat{H} al expresarlo de la forma $|\Psi_0\rangle = [\Psi_{N0}, 0]^T$.

En el caso donde los sistemas están acoplados, $\hat{V} \neq 0$, $|\Psi_0\rangle$ deja de ser necesariamente autovector de \hat{H} , sin embargo, si se satisface la siguiente relación:

$$\hat{V}^\dagger |\Psi_{N0}\rangle = 0 \quad (2.13)$$

Entonces el estado de borde sigue siendo autoestado del Hamiltoniano completo, con el mismo autovalor del sistema topológico desacoplado. Esto implica que el estado topológico permanece completamente desacoplado del subsistema auxiliar. El otro requisito consiste en que la energía del modo de borde se encuentre dentro de un rango continuo de energía, para así cumplir con las condiciones de BIC.

La conexión con la sección 1.4.4 consiste en que mientras la perturbación o el acople del subsistema hacia un sistema topológico no destruya la simetría que protege a los estados de borde, éstos siguen siendo de carácter topológico en el sistema global, debido a que la protección del BIC no proviene de una simetría global del Hamiltoniano total, sino que es heredada del subsistema topológico \hat{H}_T , cuya fase topológica garantiza la existencia del estado $|\Psi_0\rangle$.

En el modelo estudiado, el subsistema topológico corresponde a la cadena SSH, mientras que el subsistema auxiliar se reduce a un grado de libertad adicional, que en nuestro caso corresponde a un canal disipativo dado por el QD. El acoplamiento entre ambos subsistemas preserva una sub-simetría efectiva, siendo ésta la simetría quirál de la cadena SSH, debido a que el acoplamiento de los bordes de la cadena hacia el QD no constituye una ruptura de la quiralidad.

Además, es posible comprobar la ecuación (2.13) para nuestro sistema. Para eso, definimos el estado $|\Psi_{N0}\rangle$ como una combinación lineal de los estados de borde $|\psi_L\rangle$ y $|\psi_R\rangle$, y recordando el acople entre los sistemas dados por la ecuación (2.8):

$$\hat{V}^\dagger |\Psi_0\rangle = (V_1^*(|1, A\rangle \langle d| + |1, A\rangle \langle d|) + V_N^*(|d\rangle \langle N, B| + |N, B\rangle \langle d|))(\alpha |\psi_L\rangle + \beta |\psi_R\rangle)$$

Considerando energías reales, y recordando que $\langle d|\psi_{L(R)}\rangle = \langle 1, A|\psi_R\rangle = \langle N, B|\psi_L\rangle = 0$,

tenemos:

$$\hat{V}^\dagger |\Psi_0\rangle = \alpha V_1 \langle 1, A | \psi_L \rangle + \beta V_N \langle N, B | \psi_R \rangle$$

Igualando esta expresión a cero, para cumplir con la condición impuesta en (2.13), se tiene:

$$\frac{\beta}{\alpha} = -\frac{V_1 \langle 1, A | \psi_L \rangle}{V_N \langle N, B | \psi_R \rangle} \quad (2.14)$$

Este resultado es fundamental para comprender la naturaleza del estado observado: la ecuación (2.14) implica que, independientemente de cuán asimétricos sean los acoplos, siempre existe una superposición específica de los modos de borde izquierdo y derecho que anula la función de onda en el QD. Físicamente, esto significa que el sistema aprovecha la degeneración de los estados de borde topológicos para generar una interferencia destructiva exacta en el canal de fuga. A diferencia de los BICs triviales estudiados anteriormente, que requerían un ajuste fino de parámetros, el BIC topológico posee la libertad de ajustar sus coeficientes α y β para desacoplarse del continuo en cualquier configuración. En consecuencia, la robustez del BIC no proviene de la simetría del acoplamiento, sino que está garantizada por la protección topológica de la cadena SSH, preservada por la sub-simetría quiral.

Capítulo 3

Conclusiones

En este trabajo se estudió a partir del modelo de enlace fuerte, la formación de BICs y cuasi-BICs en sistemas de cadenas triviales y SSH acopladas a ambos extremos de la cadena a un punto cuántico, asociado a una tasa de pérdida debido a su acople a contactos unidimensionales semi-infinitos. Para el desarrollo de este estudio se utilizaron el método de las funciones de Green en el cálculo de propiedades de interés, como la densidad local y global de estados (LDOS y DOS), y la transmisión en el punto cuántico.

Es posible concluir para todos los sistemas, que la formación de BICs y cuasi-BICs va a estar sujeta a dos condiciones:

- Los acoples a los extremos de la cadena deben tener la misma magnitud, es decir, $|V_1| = |V_N|$, esto se puede evidenciar en las ecuaciones (2.5), (2.7) y (2.9). Al romper esta simetría, el estado BIC se convierte en un cuasi-BIC.
- El estado $|\psi\rangle$ debe corresponder a un autoestado de la cadena aislada. En el caso de la cadena trivial, $|\psi\rangle$ debe pertenecer a un modo de energía par para la ecuación (2.6), mientras que en la cadena SSH, $|\psi\rangle$, debe ser un modo antisimétrico bajo inversión espacial, consistente con la ecuación (2.11).

La restricción, impuesta por la simetría espacial de la cadena SSH, junto con la simetría quiral del modelo, implica que los estados relacionados por dicha simetría no pueden ser simultáneamente BIC. En consecuencia, al acoplar el sistema al continuo, uno de estos estados permanece completamente desacoplado, mientras que su contraparte adquiere un ancho finito y se manifiesta como un cuasi-BIC.

Un aspecto relevante observado en el régimen no trivial del modelo SSH es la presencia de un estado ligado fuertemente localizado en los extremos de la cadena, cuya energía permanece cercana a cero y que no se acopla al continuo bajo condiciones de acople asimétrico. Este estado presenta una notable robustez frente a variaciones moderadas de los parámetros del sistema, lo que sugiere un origen relacionado con la estructura topológica del modelo SSH. A pesar de no poder calcular de forma directa el invariante topológico, fue posible concluir que el origen de este BIC es de carácter topológico, a través del concepto de sub-simetrías. Esto debido a que el acoplamiento entre el QD con la cadena son del tipo inter-sitio, por lo que no quiebra la simetría quirral de la cadena SSH, lo que implica una sub-simetría dentro de este sistema la cual protege a los estados de borde topológicos. Por ende, se puede observar que la condición de desacople con el continuo se satisface para cualquier configuración asimétrica de los parámetros V_1 y V_N , mediante el ajuste automático de la superposición de los modos de borde degenerados, confirmando que la robustez del estado es intrínseca a la fase topológica y no depende de la simetría espacial de impuesta para los BICs asimétricos bajo paridad.

Finalmente, el análisis comparativo entre cadenas triviales y topológicas pone de manifiesto que la aparición y protección de los BICs no dependen únicamente de la estructura espectral del sistema, sino que están profundamente determinadas por las simetrías del Hamiltoniano y la forma específica del acoplamiento al continuo. En particular, la topología del modelo SSH introduce restricciones adicionales que gobiernan la selección de los modos que pueden permanecer localizados en presencia de contactos, proporcionando un mecanismo robusto para el control y la manipulación de estados ligados en sistemas abiertos. Estos resultados refuerzan el rol fundamental de la simetría y la topología en la ingeniería de estados cuánticos localizados y abren la posibilidad de extender este estudio a geometrías más complejas y a sistemas con interacciones o desorden controlado.

Apéndice A

Cálculos cadena trivial

A.1. Caso minimal: Dos sitios

Del siguiente sistema de ecuaciones:

$$(\epsilon_d - i\Gamma)x_1 + V_1 x_2 + V_n x_3 = \epsilon x_1, \quad (\text{A.1})$$

$$V_1 x_1 - v x_3 = \epsilon x_2, \quad (\text{A.2})$$

$$V_n x_1 - v x_2 = \epsilon x_3. \quad (\text{A.3})$$

Despejando x_1 en (A.2) y (A.3), obtenemos:

$$x_1 = \frac{\epsilon x_2 + v x_3}{V_1} \quad ; \quad x_1 = \frac{\epsilon x_3 + v x_2}{V_n}$$

Igualamos ambas expresiones:

$$\begin{aligned} (\epsilon x_2 + v x_3)V_n &= (\epsilon x_3 + v x_2)V_1 \\ x_3(vV_n - \epsilon V_1) &= x_2(vV_1 - \epsilon V_n) \\ \frac{x_3(vV_n - \epsilon V_1)}{(vV_1 - \epsilon V_n)} &= x_2 \end{aligned}$$

Reemplazamos este resultado en (A.1):

$$(\epsilon_d - i\Gamma)x_1 + V_1 \frac{x_3(vV_n - \epsilon V_1)}{(vV_1 - \epsilon V_n)} + V_n x_3 = \epsilon x_1$$

$$\left(V_1 \frac{x_3(vV_n - \epsilon V_1)}{(vV_1 - \epsilon V_n)} + V_n \right) x_3 = x_1(\epsilon - \epsilon_d + i\Gamma)$$

$$\left(V_1 \frac{x_3(vV_n - \epsilon V_1)}{(vV_1 - \epsilon V_n)} + V_n \right) \frac{x_3}{(\epsilon - \epsilon_d + i\Gamma)} = x_1$$

Poniendo estos valores en $|\psi\rangle$, se tiene:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = x_3 \begin{pmatrix} \frac{2vV_1V_2 - \epsilon(V_n^2 + V_1^2)}{(vV_1 - \epsilon V_n)(\epsilon - \epsilon_d + i\Gamma)} \\ \frac{vV_n - \epsilon V_1}{vV_1 - \epsilon V_n} \\ 1 \end{pmatrix}$$

A.2. Caso general: N sitios

De forma explícita, separamos el ángulo dentro de la integral:

$$\sin\left(\frac{n\pi N}{N+1}\right) = \sin\left(n\pi - \frac{n\pi}{N+1}\right)$$

Usamos las propiedades de resta de ángulos del seno:

$$\sin\left(n\pi - \frac{n\pi}{N+1}\right) = \sin(n\pi) \cos\left(\frac{n\pi}{N+1}\right) - \cos(n\pi) \sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right)$$

Sabemos que $\sin(n\pi) = 0$ y $\cos(n\pi) = (-1)^n$, para cualquier $n \in \mathbb{N}$, por lo tanto:

$$\sin\left(\frac{n\pi N}{N+1}\right) = (-1)^{n+1} \sin\left(\frac{n\pi}{N+1}\right)$$

Apéndice B

Cálculos Cadena SSH

B.1. Función de Green cadena SSH de dos dímeros

Con las autoenergías y autovectores dados por el Hamiltoniano matricial de la cadena SSH, podemos construir la matriz de funciones de Green usando la forma de Lehman:

$$[\hat{G}^r]_{SSH} = \sum_{n=1}^N \frac{|\chi_n\rangle \langle \chi_n|}{\epsilon - \epsilon_n + i\eta} = \frac{|\chi_1\rangle \langle \chi_1|}{\epsilon - \epsilon_1 + i\eta} + \frac{|\chi_2\rangle \langle \chi_2|}{\epsilon - \epsilon_2 + i\eta} + \frac{|\chi_3\rangle \langle \chi_3|}{\epsilon - \epsilon_3 + i\eta} + \frac{|\chi_4\rangle \langle \chi_4|}{\epsilon - \epsilon_4 + i\eta}$$

Calculamos cada producto de Kronecker entre autoestados:

$$|\chi_1\rangle \langle \chi_1| = |N_1|^2 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{w+\gamma}{2v} \\ \frac{w+\gamma}{2v} \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{w+\gamma}{2v} & \frac{w+\gamma}{2v} & 1 \end{pmatrix} = |N_1|^2 \begin{pmatrix} 1 & \frac{w+\gamma}{2v} & \frac{w+\gamma}{2v} & 1 \\ \frac{w+\gamma}{2v} & (\frac{w+\gamma}{2v})^2 & (\frac{w+\gamma}{2v})^2 & \frac{w+\gamma}{2v} \\ \frac{w+\gamma}{2v} & (\frac{w+\gamma}{2v})^2 & (\frac{w+\gamma}{2v})^2 & \frac{w+\gamma}{2v} \\ 1 & \frac{w+\gamma}{2v} & \frac{w+\gamma}{2v} & 1 \end{pmatrix}$$

$$|\chi_2\rangle \langle \chi_2| = |N_2|^2 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\gamma-w}{2v} \\ \frac{\gamma-w}{-2v} \\ -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\gamma-w}{2v} & \frac{\gamma-w}{-2v} & -1 \end{pmatrix} = |N_2|^2 \begin{pmatrix} 1 & \frac{\gamma-w}{2v} & \frac{\gamma-w}{-2v} & -1 \\ \frac{\gamma-w}{2v} & (\frac{\gamma-w}{2v})^2 & -(\frac{\gamma-w}{2v})^2 & \frac{\gamma-w}{-2v} \\ \frac{\gamma-w}{-2v} & -(\frac{\gamma-w}{2v})^2 & (\frac{\gamma-w}{2v})^2 & \frac{\gamma-w}{2v} \\ -1 & \frac{\gamma-w}{-2v} & \frac{\gamma-w}{2v} & 1 \end{pmatrix}$$

$$|\chi_3\rangle \langle \chi_3| = |N_3|^2 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{w-\gamma}{2v} \\ \frac{w-\gamma}{2v} \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{w-\gamma}{2v} & \frac{w-\gamma}{2v} & 1 \end{pmatrix} = |N_3|^2 \begin{pmatrix} 1 & \frac{w-\gamma}{2v} & \frac{w-\gamma}{2v} & 1 \\ \frac{w-\gamma}{2v} & (\frac{w-\gamma}{2v})^2 & (\frac{w-\gamma}{2v})^2 & \frac{w-\gamma}{2v} \\ \frac{w-\gamma}{2v} & (\frac{w-\gamma}{2v})^2 & (\frac{w-\gamma}{2v})^2 & \frac{w-\gamma}{2v} \\ 1 & \frac{w-\gamma}{2v} & \frac{w-\gamma}{2v} & 1 \end{pmatrix}$$

$$|\chi_4\rangle \langle \chi_4| = |N_4|^2 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\gamma+w}{-2v} \\ \frac{\gamma+w}{2v} \\ -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\gamma+w}{-2v} & \frac{\gamma+w}{2v} & -1 \end{pmatrix} = |N_4|^2 \begin{pmatrix} 1 & \frac{\gamma+w}{-2v} & \frac{\gamma+w}{2v} & -1 \\ \frac{\gamma+w}{-2v} & (\frac{\gamma+w}{2v})^2 & -(\frac{\gamma+w}{2v})^2 & \frac{\gamma+w}{2v} \\ \frac{\gamma+w}{2v} & -(\frac{\gamma+w}{2v})^2 & (\frac{\gamma+w}{2v})^2 & \frac{\gamma+w}{-2v} \\ -1 & \frac{\gamma+w}{2v} & \frac{\gamma+w}{-2v} & 1 \end{pmatrix}$$

Con estas matrices, podemos calcular de forma explícita G_{dd} :

$$G_{dd} = [g_{dd}^{-1} - V^2(g_{1A;1A} + g_{2B;2B} + g_{2B;1A} + g_{1A;2B})]^{-1}$$

Extraemos los elementos de la matriz:

$$g_{1A;1A} = \frac{|N_1|^2}{\epsilon - \epsilon_1 + i\eta} + \frac{|N_2|^2}{\epsilon - \epsilon_2 + i\eta} + \frac{|N_3|^2}{\epsilon - \epsilon_3 + i\eta} + \frac{|N_4|^2}{\epsilon - \epsilon_4 + i\eta}$$

$$g_{1A;2B} = \frac{|N_1|^2}{\epsilon - \epsilon_1 + i\eta} - \frac{|N_2|^2}{\epsilon - \epsilon_2 + i\eta} + \frac{|N_3|^2}{\epsilon - \epsilon_3 + i\eta} - \frac{|N_4|^2}{\epsilon - \epsilon_4 + i\eta}$$

$$g_{2B;1A} = \frac{|N_1|^2}{\epsilon - \epsilon_1 + i\eta} - \frac{|N_2|^2}{\epsilon - \epsilon_2 + i\eta} + \frac{|N_3|^2}{\epsilon - \epsilon_3 + i\eta} - \frac{|N_4|^2}{\epsilon - \epsilon_4 + i\eta}$$

$$g_{2B;2B} = \frac{|N_1|^2}{\epsilon - \epsilon_1 + i\eta} + \frac{|N_2|^2}{\epsilon - \epsilon_2 + i\eta} + \frac{|N_3|^2}{\epsilon - \epsilon_3 + i\eta} + \frac{|N_4|^2}{\epsilon - \epsilon_4 + i\eta}$$

Sumando todas las funciones, podemos ver que las contribuciones ϵ_2 y ϵ_4 se cancelan, por lo que la función de Green del QD se expresa como:

$$G_{dd} = \left[g_{dd}^{-1} - 4V^2 \left(\frac{|N_1|^2}{\epsilon - \epsilon_1 + i\eta} + \frac{|N_3|^2}{\epsilon - \epsilon_3 + i\eta} \right) \right]^{-1}$$

B.2. Conexión SSH-QD

En este apéndice, se muestra el cálculo explícito al insertar conjuntos completos para el cálculo de la función de Green a través de la ecuación de Dyson. Partiendo desde la expresión de G_{dd} :

$$G_{dd} = g_{dd} + \langle d | \hat{g} \sum_n |n\rangle \langle n| \hat{V} \sum_m |m\rangle \langle m| \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{dd} = g_{dd} + \langle d | \sum_{n,m} \hat{g} |n\rangle \langle n| \hat{V} |m\rangle \langle m| \hat{G} |d\rangle$$

Calculamos $\langle n | \hat{V} |m\rangle$:

$$\langle n | \hat{V} |m\rangle = V_1(\langle n|d\rangle \langle 1, A|m\rangle + \langle n|1, A\rangle \langle d|m\rangle) + V_n(\langle n|d\rangle \langle 2, B|m\rangle + \langle n|2, B\rangle \langle d|m\rangle)$$

Usando la ortogonalidad de los kets:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$$

$$\langle n | \hat{V} |m\rangle = V_1(\delta_{n,d}\delta_{1A,m} + \delta_{n,1A}\delta_{d,m}) + V_n(\delta_{n,d}\delta_{2B,m} + \delta_{n,2B}\delta_{d,m})$$

Recordando que el QD no se acopla a ningún sitio de la cadena antes de la perturbación, sabemos que $\langle d | \hat{g} |n\rangle = g_{dn}\delta_{dn}$; por lo tanto:

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd} \sum_m \langle d | \hat{V} |m\rangle \langle m | \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd} \sum_m V_1(\delta_{d,d}\delta_{1A,m} + \delta_{d,1A}\delta_{d,m}) + V_n(\delta_{d,d}\delta_{2B,m} + \delta_{d,2B}\delta_{d,m}) \langle m | \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd} \sum_m (V_1\delta_{1A,m} + V_n\delta_{2B,m}) \langle m | \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd}(V_1 \langle 1, A | \hat{G} |d\rangle + V_n \langle 2, B | \hat{G} |d\rangle)$$

Esta es la misma expresión que la ecuación (). Realizamos el mismo procedimiento para los otros elementos de la matriz de Green, que corresponden a la cadena. Cabe recordar que antes de que exista perturbación, los sitios de la cadena están conectados entre sí, por lo que \hat{g}_{SSH} tiene elementos fuera de la diagonal, como se muestra a continuación:

$$G_{1A;d} = g_{1A;d} + \langle 1, A | \hat{g} \sum_{n,m} |n\rangle \langle n| \hat{V} |m\rangle \langle m| \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{1A;d} = \langle 1A | \hat{g} \sum_{n,m} |n\rangle [V_1(\delta_{n,d}\delta_{1A,m} + \delta_{n,1A}\delta_{d,m}) + V_n(\delta_{n,d}\delta_{2B,m} + \delta_{n,2B}\delta_{d,m})] \langle m| \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{1A;d} = \langle 1A | \hat{g} \sum_m [|1, A\rangle V_1\delta_{d,m} + |2, B\rangle V_n\delta_{d,m}] \langle m| \hat{G} |d\rangle$$

En este paso, se usó el hecho de que $g_{1A;d} = g_{2B;d} = 0$. Siguiendo con el cálculo:

$$G_{1A;d} = g_{1A;1A}V_1 \langle d| \hat{G} |d\rangle + g_{1A;2B}V_n \langle d| \hat{G} |d\rangle = G_{dd}(g_{1A;1A}V_1 + g_{1A;2B}V_n)$$

Repetimos el mismo proceso para calcular $\langle 2, B | \hat{G} |d\rangle$:

$$G_{2B;d} = \langle 2B | \hat{g} \sum_m [|1, A\rangle V_1\delta_{d,m} + |2, B\rangle V_n\delta_{d,m}] \langle m| \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{2B;d} = g_{2B;1A}V_1 \langle d| \hat{G} |d\rangle + g_{2B;2B}V_n \langle d| \hat{G} |d\rangle = G_{dd}(g_{2B;1A}V_1 + g_{2B;2B}V_n)$$

B.3. Conexión Contactos-QD

Realizamos el mismo mecanismo usado en la conexión SSH-QD, con la diferencia de que la interacción toma la forma:

$$\hat{V} = V_R(|d\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle d|) + V_L(|d\rangle \langle 0'| + |0'\rangle \langle d|)$$

Calculamos el elemento de matriz $\langle n | V |m\rangle$:

$$\langle n | \hat{V} |m\rangle = V_R(\langle n|d\rangle \langle 0|m\rangle + \langle n|0\rangle \langle d|m\rangle) + V_L(\langle n|d\rangle \langle 0'|m\rangle + \langle n|0'\rangle \langle d|m\rangle)$$

$$\langle n | \hat{V} |m\rangle = V_R(\delta_{n,d}\delta_{0,m} + \delta_{n,0}\delta_{d,m}) + V_L(\delta_{n,d}\delta_{0',m} + \delta_{n,0'}\delta_{d,m})$$

Por ende, la función de Green del QD dado el sistema completo se calcula como:

$$\langle d | \hat{G} |d\rangle = \langle d | \hat{g} |d\rangle + \langle d | \hat{g} \sum_{n,m} |n\rangle \langle n| \hat{V} |m\rangle \langle m| \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd} \sum_m \langle d | \hat{V} |m\rangle \langle m| \hat{G} |d\rangle$$

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd} \sum_m V_R(\delta_{d,d}\delta_{0,m} + \delta_{d,0}\delta_{d,m}) + V_L(\delta_{d,d}\delta_{0',m} + \delta_{d,0'}\delta_{d,m}) \langle m | \hat{G} | d \rangle$$

$$G_{dd} = g_{dd} + g_{dd}(V_R \langle 0 | \hat{G} | d \rangle + V_L \langle 0' | \hat{G} | d \rangle)$$

Cerramos el sistema utilizando la ecuación de Dyson:

$$\langle 0 | \hat{G} | d \rangle = \langle 0 | \hat{g} | d \rangle + \langle 0 | \hat{g} \sum_{n,m} | n \rangle \langle n | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{G} | d \rangle$$

$$G_{0d} = \langle 0 | \hat{g} \sum_{n,m} | n \rangle [V_R(\delta_{n,d}\delta_{0,m} + \delta_{n,0}\delta_{d,m}) + V_L(\delta_{n,d}\delta_{0',m} + \delta_{n,0'}\delta_{d,m})] \langle m | \hat{G} | d \rangle$$

El contacto izquierdo no está conectado a ningún sitio inicialmente, por lo que solamente $g_{00} \neq 0$, obteniendo lo siguiente:

$$G_{0d} = g_{00} \sum_m [V_R(\delta_{0,d}\delta_{0,m} + \delta_{0,0}\delta_{d,m}) + V_L(\delta_{0,d}\delta_{0',m} + \delta_{0,0'}\delta_{d,m})] \langle m | \hat{G} | d \rangle$$

$$G_{0d} = g_{00} V_R \langle d | \hat{G} | d \rangle$$

Exactamente con el mismo procedimiento, se obtiene $\langle 0' | \hat{G} | d \rangle$:

$$G_{0'd} = g_{0'0'} \sum_m [V_R(\delta_{0',d}\delta_{0,m} + \delta_{0',0}\delta_{d,m}) + V_L(\delta_{0',d}\delta_{0',m} + \delta_{0',0'}\delta_{d,m})] \langle m | \hat{G} | d \rangle$$

$$G_{0'd} = g_{0'0'} V_L \langle d | \hat{G} | d \rangle$$

Por lo tanto, el único elemento desconocido es la función de Green del primer sitio del contacto, $g_{00}^{L(R)}$, el cual calcularemos a continuación.

B.4. Función de Green de los contactos

Tomamos una cadena semi infinita, que parte desde el sitio $|1\rangle$. Le agregamos a esta cadena una impureza como sitio $|0\rangle$, la cual no cambia la cadena. El acople entre la impureza y la cadena está dado por:

$$\hat{V} = -t(|0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|)$$

En donde $-t$ es el término de hopping entre sitios de la cadena. Al calcular la ecuación de Dyson para encontrar la función de Green en el borde de la cadena, hay que tener en

cuenta que $G_{00} = g_{11}$, ya que en ambos casos estamos representando la propagación del electrón en el borde de una cadena semi infinita, por lo que la física detrás no cambia por la etiqueta del sitio, por ende:

$$\begin{aligned}\langle 0 | \hat{G} | 0 \rangle &= \langle 0 | \hat{g} | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{g} \sum_{n,m} | n \rangle \langle n | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{00} &= g_{00} + g_{00} \sum_m \langle 0 | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{00} &= g_{00} + g_{00} \sum_m \langle 0 | (-t(|0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|) | m \rangle \langle m | \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{00} &= g_{00} + g_{00}(-t) \langle 1 | \hat{G} | 0 \rangle\end{aligned}$$

Procedemos a calcular $\langle 1 | \hat{G} | 0 \rangle$:

$$\begin{aligned}\langle 1 | \hat{G} | 0 \rangle &= \langle 1 | \hat{g} | 0 \rangle + \langle 1 | \hat{g} | 0 \rangle + \langle 1 | \hat{g} \sum_{n,m} | n \rangle \langle n | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{10} &= g_{11} \sum_m \langle 1 | \hat{V} | m \rangle \langle m | \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{10} &= g_{11} \sum_m \langle 1 | (-t(|0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|) | m \rangle \langle m | \hat{G} | 0 \rangle \\ G_{10} &= g_{11}(-t) \langle 0 | \hat{G} | 0 \rangle\end{aligned}$$

Reemplazamos este resultado en G_{00} :

$$G_{00} = g_{00} + g_{00}(-t)g_{11}(-t)G_{00}$$

Recordando que $g_{11} = G_{00}$, obtenemos una ecuación cuadrática para G_{00} :

$$\begin{aligned}g_{00}t^2G_{00}^2 - G_{00} + g_{00} &= 0 \\ G_{00} &= \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4g_{00}^2t^2}}{2g_{00}t^2} = \frac{1 \pm g_{00}t\sqrt{\frac{g_{00}^2}{t^2} - 4}}{2g_{00}t^2}\end{aligned}$$

Recordando que la función de Green de un sitio de la cadena es:

$$g_{00} = \frac{1}{\epsilon - \epsilon_0}$$

Siendo ϵ_0 la energía del sitio. Con esto, podemos reescribir la función de Green G_{00} en términos de estas energías:

$$G_{00} = \frac{g_{00}^{-1}}{2t^2} \pm \frac{\sqrt{\frac{g_{00}^{-2}}{t^2} - 4}}{2t} = \frac{\epsilon - \epsilon_0}{2t^2} \pm \frac{1}{2t} \sqrt{\frac{(\epsilon - \epsilon_0)^2}{t^2} - 4}$$

Usando la relación de dispersión de una cadena monoatómica:

$$\epsilon - \epsilon_0 = -2t \cos(k)$$

Podemos reescribir G_{00} en términos de k :

$$G_{00} = \frac{-2t \cos(k)}{2t^2} \pm \frac{1}{2t} \sqrt{\frac{4t^2 \cos^2(k)}{t^2} - 4}$$

$$G_{00} = \frac{-\cos(k)}{t} \pm \frac{1}{2t} \sqrt{4 \cos^2(k) - 4}$$

$$G_{00} = \frac{-\cos(k)}{t} \pm \frac{i \sin(k)}{t} = \frac{-e^{\pm ik}}{t}$$

La cual corresponde a la función de Green del borde del contacto izquierdo y derecho, ya que se modelan como el mismo tipo de cadena.

Referencias

- [1] Chia Wei Hsu, Bo Zhen, A. Douglas Stone, John D. Joannopoulos y Marin Soljačić. «Bound states in the continuum». En: *Nature Reviews Materials* 1 (2016).
- [2] Kirill Koshelev, Sergey Lepeshov, Mingkai Liu, Andrey Bogdanov y Yuri Kivshar. «Asymmetric metasurfaces with high-Q resonances governed by bound states in the continuum». En: *Physical Review Letters* 121 (2018), pág. 193903.
- [3] Man Luo, Yi Zhou, Xuyang Zhao, Yuxiang Li, Zhihe Guo, Xi Yang, Meng Zhang, You Wang y Xiang Wu. «Label-Free Bound-States-in-the-Continuum Biosensors». En: *Biosensors* 12.12 (2022).
- [4] Ali Valizadeh, Hossein Mikaeili, Mahdi Samiei, Seyed Morteza Hosseini Farkhani, Nosratollah Zarghami y Abolfazl Akbarzadeh. «Quantum dots: synthesis, bioapplications, and toxicity». En: *Nanoscale Research Letters* 7 (2012), pág. 480.
- [5] J. von Neumann y E. Wigner. «Über merkwürdige diskrete Eigenwerte». En: *Physikalische Zeitschrift* 30 (1929), págs. 465-467.
- [6] Vektorfeld. *Bound states in the continuum: schematic comparison of bound, resonant and BIC states*. n.d.
- [7] Juan Pablo Ramos-Andrade, David Zambrano y Pedro A. Orellana. «Fano–Majorana Effect and Bound States in the Continuum on a Crossbar-Shaped Quantum Dot Hybrid Structure». En: *Annalen der Physik* 531.4 (2019), pág. 1800498.
- [8] Steven H. Simon. *The Oxford Solid State Basics*. Oxford University Press, 2013.
- [9] Neil W. Ashcroft y N. David Mermin. *Solid State Physics*. Cengage Learning, 1976.
- [10] W. P. Su, J. R. Schrieffer y A. J. Heeger. «Solitons in Polyacetylene». En: *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979), págs. 1698-1701.

- [11] Navketan Batra y Goutam Sheet. «Understanding Basic Concepts of Topological Insulators Through Su-Schrieffer-Heeger (SSH) Model». En: *arXiv* (2019).
- [12] Ziteng Wang, Xiangdong Wang, Zhichan Hu, Domenico Bongiovanni, Dario Jukić, Liqin Tang, Daohong Song, Roberto Morandotti, Zhigang Chen y Hrvoje Buljan. «Sub-symmetry-protected topological states». En: *Nature Physics* 19.7 (2023), págs. 992-998.
- [13] Deep Mondal, Arka Bandyopadhyay y Debnarayan Jana. «Su–Schrieffer–Heeger Model – From Fundamentals to Responses». En: *International Journal of Theoretical Physics* 64 (2025), pág. 125.
- [14] Xiao-Liang Qi y Shou-Cheng Zhang. «Topological insulators and superconductors». En: *Reviews of Modern Physics* 83.4 (2011), págs. 1057-1110.
- [15] Zhiyong Zhu, Yingchun Cheng y Udo Schwingenschlögl. «Band inversion mechanism in topological insulators: A guideline for materials design». En: *Physical Review B* 85.23 (2012), pág. 235401.
- [16] George B. Arfken, Hans J. Weber y Frank E. Harris. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 2013.
- [17] E. N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer, 2006.
- [18] Giuseppe Grosso y Giuseppe Pastori Parravicini. *Solid State Physics*. Academic Press, 2000.
- [19] R. Landauer. «Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction». En: *IBM Journal of Research and Development* 1.3 (1957), págs. 223-231.
- [20] Christoph W. Groth, Michael Wimmer, Anton R. Akhmerov y Xavier Waintal. «Kwant: A software package for quantum transport». En: *New Journal of Physics* 16 (2014), pág. 063065.
- [21] Supriyo Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1995.
- [22] Hartmut Haug y Antti-Pekka Jauho. *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*. Springer, 2008.

- [23] B. A. Lippmann y Julian Schwinger. «Variational Principles for Scattering Processes. I». En: *Phys. Rev.* 79 (3 1950), págs. 469-480.
- [24] M. Büttiker. «Four-Terminal Phase-Coherent Conductance». En: *Phys. Rev. Lett.* 57 (14 1986), págs. 1761-1764.
- [25] Daniel S. Fisher y Patrick A. Lee. «Relation between conductivity and transmission matrix». En: *Phys. Rev. B* 23 (12 1981), págs. 6851-6854.
- [26] Luis E. F. Foa Torres. «Perspective on topological states of non-Hermitian lattices». En: *Journal of Physics: Materials* 3.1 (2019), pág. 014002.
- [27] Xiangdong Wang, Domenico Bongiovanni, Ziteng Wang, Amgad Abdrabou, Zhi-
chan Hu, Dario Jukić, Daohong Song, Ramy Elganainy, Zhigang Chen y H. Buljan.
«Construction of Topological Bound States in the Continuum Via Subsymmetry». En: *ACS Photonics* 11 (2024).