



Universidad Técnica Federico Santa María.
Departamento de Física.

Estados ligados topológicos en el continuo: caso de una red Su-Schiffer-Heeger bidimensional

Jorge Schifferli Verdugo

Profesor guía: Vladimir Juričić

Profesor coguía: Pedro Orellana

Trabajo de tesis presentado en cumplimiento parcial de los
requisitos para el grado de Licenciatura en Ciencias, mención
física, de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Marzo, 2023

TÍTULO DE LA TESIS:

**ESTADOS LIGADOS TOPOLÓGICOS EN EL CONTINUO:
CASO DE UNA RED SU-SCHRIFER-HEEGER
BIDIMENSIONAL**

AUTOR:

JORGE SCHIFFERLI VERDUGO

Trabajo de tesis presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para el grado de Licenciatura en Ciencias, mención física, de la Universidad Técnica Federico Santa María.

COMISIÓN EXAMINADORA:

Vladimir Juričić (USM)

Pedro Orellana (USM)

Francisco Peña (USM)

22 de mayo de 2023

Índice general

1. Introducción	5
2. Estados ligados en el continuo	7
3. Modelo de enlace fuerte	11
3.1. Combinación lineal de orbitales atómicos	11
3.2. Energías propias	13
3.3. Segunda cuantización	14
3.4. Cristales fotónicos	16
4. Red Su-Schriffer-Heeger bidimensional	23
4.1. Revisión del Hamiltoniano y estructura de bandas	23
4.2. Red finita: ruptura de simetría en x e y	28
4.2.1. Reescritura de la matriz $\mathbb{H}_{\mathbf{k}}$	30
4.3. Transición al espacio real	31
4.3.1. Resultados numéricos	33
4.4. Simetría de los estados localizados en las esquinas	34
4.5. Observaciones experimentales en una red fotónica	37
5. Dislocaciones	39
6. Conclusiones	43
A. Notas sobre cambio de índices por transformaciones de operadores	45
B. Propiedad matemática (4.38)	47
C. Interpretación de las <i>Matrices paternas</i>	49

Agradecimientos

Debo agradecer, en primer lugar, a mi familia, ya que sin ella nunca hubiera llegado a este punto. En particular, gracias a mi mamá por estar siempre apoyándome en los caminos que he decidido tomar a lo largo de mi vida. Agradezco su constante preocupación y su cariño incondicional, los cuales me han llevado a atravesar diversos obstáculos. También a mi hermana, quien me ha acompañado por las distintas etapas de mi vida y siempre ha estado a mi lado dispuesta a ayudarme. Ya sea revisando mi redacción, o aconsejándome en diversos temas, sé que de necesitarlo ella estará allí. Agradecer también a mi padrino, por su fuerte responsabilidad emocional, su comprensión y sus sabias palabras; cosas que lo han convertido en un verdadero modelo a seguir.

Debo agradecer también a mis queridos amigos, los cuales alegran mi día a día. En particular, agradecer a aquellos que estuvieron en mis peores momentos. Sebastián, Diego, Tamara; no sé dónde estaría hoy sin ustedes. Es un privilegio saber que, aun si mi camino se ve nublado, ustedes estarán a mi lado para recorrerlo. No saben lo feliz que estoy de tenerlos.

Por otro lado, Agradezco a mis profesores, los cuales me han enseñado, de una u otra manera, como ampliar mi conocimiento y poder entender cosas que no cualquiera puede asimilar. Han sido siempre un ejemplo en lo intelectual y gran parte de mi motivación por la física se debe a ellos. En particular, Francisco Peña, Marat Siddikov, Alfonso Zerwekh y Marcela Paz. Sépanlo o no, han impactado de distintas maneras mi entendimiento de la física y proceso de aprendizaje.

Agradezco mucho a mi tutor Vladimir por su paciencia, comprensión y disposición. Se me hace difícil poner en palabras lo agradecido que estoy con él. Desde inicio a fin, su motivación y carácter fueron destacables y estuvo a mi lado respondiéndome dudas y ayudándome hasta último minuto, aun estando cansado. También doy gracias al resto del comité, los profesores Francisco Peña y Pedro Orellana, por la disposición a evaluar mi trabajo, lo que significa mucho.

Finalmente, quiero agradecer el apoyo financiero del proyecto Fondecyt No. 1201876 de profesor Pedro Orellana.

Abstract

Dentro del área de la física de materia condensada, el estudio de topologías no triviales en la estructura de bandas de redes cristalinas es un área de estudio joven. En esta, se destaca la aparición de estados localizados como lo son los estados de borde en semimetales y aislantes topológicos. Recientemente, se ha descubierto que existen redes capaces de generar estados ligados en el continuo del espectro de energías. Este tipo de estados, los cuales fueron descubiertos a inicios del siglo pasado, constituyen un área contingente de estudio debido a su continua aparición en distintas ramas de la física. Un caso particular y novedoso corresponde a la aparición de estados ligados en el continuo de energías de una Red Su-Schriffer-Heeger (SSH) bidimensional. En este escrito se procederá profundizar en el estudio de estos estados utilizando el formalismo de enlace fuerte. Comenzaremos realizando una revisión de este formalismo tanto en sistemas cuánticos como materiales fotónicos permitiéndonos extender la validez de nuestros resultados a ambos tipos de sistemas. Posteriormente, analizaremos la estructura de bandas y las simetrías que posee la red para poder entender la aparición de los estados ligados. Luego, utilizaremos el mismo formalismo de enlace fuerte para presenciarlos numéricamente y hablaremos brevemente sobre la evidencia experimental existente. Finalmente introduciremos una dislocación con el fin de observar la respuesta del sistema y sus estados frente a esta.

Introducción

En la física de materia condensada, las redes corresponden a uno de los objetos matemáticos fundamentales en el estudio de materia en estado sólido, esto debido a la tendencia existente de los materiales a componerse de átomos o moléculas agrupadas periódicamente. El hecho de que los materiales que se estudian sean de escalas espaciales considerablemente mayores a las distancias interatómicas permite que la estructura microscópica de estos pueda quedar bien descrita por el arreglo de sus constituyentes en una red que se extiende infinitamente a lo largo del material. Sin embargo, la existencia de bordes en el sólido se traduce en la aparición de propiedades emergentes. En particular, cuando estudiamos las características electrónicas de un sólido, la pérdida de periodicidad en la estructura debido a los límites del material resulta en la aparición de estados electrónicos cuyas distribuciones de probabilidad resultan espacialmente afectadas por estos. A estos estados los llamados *estados topológicos* y son consecuencia de la existencia de topología no trivial de la estructura de bandas electrónicas correspondiente a los estados de Bloch

El estudio de estados topológicos es un área joven cuyo desarrollo empieza al rededor de la década de los 80 y se mantiene hasta hoy. Fue el estudio del efecto cuántico de Hall el cual gatilló la necesidad de entender y poder clasificar aquellos sistemas que los presentan [1, 2]. Posteriormente se llegó a descubrir que los estados topológicos pueden entenderse a través de cualidades específicas de un Hamiltoniano las que se estudian utilizando clasificaciones topológicas [3–10].

El estudio de la topología de este tipo de sistemas llevó eventualmente al desarrollo de materiales con propiedades exóticas como lo son los aislantes topológicos [11–13]. Estos últimos corresponden a materiales que en su interior tiene propiedades aislantes (La estructura de bandas presenta una brecha entre la banda de valencia y conductancia) pero que en sus bordes permiten la conducción de corriente. Ejemplos de estos son el HgTe, CdTe [14, 15] entre otros. También se ha observado que semimetales como el grafeno presentan características peculiares cuando se tratan considerando las terminaciones del material.

Un resultado particular, es el de la obtención de *estados ligados en el continuo* (BIC) como estados topológicos por Wladimir A. Benalcazar y Alexander Cerjan [16]. La obtención de este tipo de estados es de suma relevancia debido a que la aparición de BICs está usualmente acompañada de una protección por algún tipo simetría, haciendo que los estados puedan mantenerse sin hibridarse con el continuo de estados que se hallan en el mismo espacio de degeneración cuando el sistema es expuesto a ciertos tipos de perturbación.

En este escrito pretendemos reproducir y examinar los resultados obtenidos por Benalcazar y Cerjan. Para esto, iniciaremos con una revisión de conceptos fundamentales como lo son el concepto de BIC así como la formulación de enlace fuerte. Posteriormente analizaremos la misma red tratada por los autores la cual consiste en un sistema de cadenas Su-Schriffer-Heeger acopladas (la cual abreviaremos como SSH bidimensional). Comenzaremos obteniendo la correspondiente estructura de bandas a través del modelo de enlace fuerte y analizaremos la simetría existente en los estados situados en los puntos Γ y M . Esto con el fin de notar ciertas características de los estados del bulto (bulk states) los cuales nos entregarán información sobre el motivo tras la existencia de BICs. Luego de esto impondremos la pérdida de periodicidad que caracteriza los límites en la red utilizando un Hamiltoniano en segunda cuantización en el espacio real. Hacer esto permitirá la aparición de estados de borde y podremos corroborar numéricamente la existencia de BICs. Luego, terminaremos de entender los motivos tras su aparición así como las propiedades que les otorgan su capacidad de preservarse bajo perturbaciones que respeten las simetrías del sistema. Finalmente, llevaremos a cabo calculaciones numéricas no abordadas por los autores las cuales consisten en introducir una dislocación de borde sobre la red con el fin de observar si aparecen estados localizados en el centro de dislocación.

Estados ligados en el continuo

No es extraño en el estudio de fenómenos oscilatorios encontrar formas de onda cuya distribución espacial se encuentre completamente o parcialmente localizada en una región bien definida. Una de las situaciones más frecuentes es encontrar ondas completamente localizadas en una región con un espectro discreto debido a la existencia de un potencial o condición de borde que las confina, es decir no hay forma de a que la perturbación se irradie y disipe. Otro caso típico es encontrar resonancias formadas dentro del espectro continuo de ondas extendidas. Estas resonancias tienden a decaer debido a que irradian continuamente y, debido a esto, su existencia prolongada solo puede lograrse estimulando este tipo de excitación.

Cabe preguntarse entonces si es posible encontrar estados localizados que pertenezcan al espectro continuo y no se decaen. En efecto, aunque de carácter más exótico que los casos anteriores, se han observado en distintos contextos sistemas en los que pueden existir ondas con estas características. *Bound state in the continuum* (BIC), *embedded trapped mode* o *estado ligado en el continuo* son los nombres que reciben aquellos fenómenos oscilatorio poco usuales en los que la distribución espacial de una onda se encuentra bien localizada sin pertenecer a un espectro discreto de modos de oscilación (ver figura 2.1). Este tipo de excitaciones son incapaces de ser estimuladas por modos extendidos de oscilación ya que requieren ser ortogonales al resto del espectro para que sea imposible la existencia de radiación y resultante decrecimiento de la amplitud. Esta última propiedad permite entender los BICs como resonancias con infinito factor de calidad.

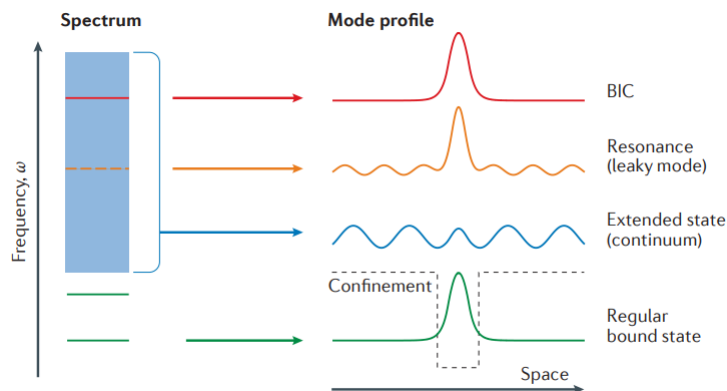


FIGURA 2.1: A la izquierda podemos ver una representación de un espectro discreto (verde) y continuo (azul) así como las ondas capaces de reproducir [17].

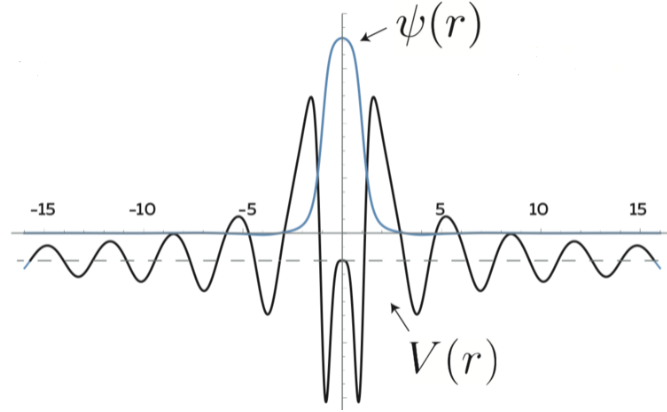


FIGURA 2.2: Potencial creado por von Neumann y Wigner y función de onda para el BIC resultante.

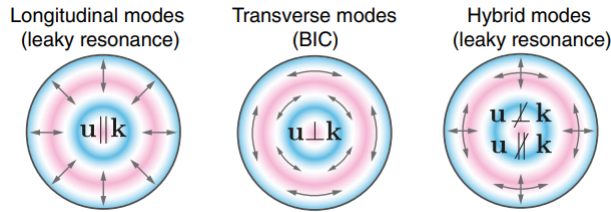


FIGURA 2.3: Formas en las que ondas de deformación pueden propagarse desde el resonador esférico. \mathbf{u} corresponde al vector de desplazamiento y \mathbf{k} al vector de onda [19].

Los BICs fueron propuestos originalmente por Jhon von Neumann y Eugene Wigner en 1929 [18] como una solución particular a la ecuación de Schrödinger para un par de potenciales específicos (ver 2.2). Sin embargo BICs han resultado ser objetos más generales y han hecho aparición en contextos de ondas electromagnéticas, sonoras, elásticas y más. Un ejemplo sencillo y propio del sistema al cual pertenece son las ondas de deformación elástica puramente de corte en un resonador esférico que se encuentra sumergido en un fluido no viscoso [19]. En este caso, a pesar de coexistir en el continuo de ondas extendidas de deformación, aquellos modos formados puramente de ondas de corte serán incapaces de propagarse por el medio no viscoso ya que no podrán perturbarlo (ver figura 2.3). Por otro lado, ondas de presión o híbridadas no tendrán problema en extenderse a lo largo del fluido no viscoso ya que inevitablemente lo perturbarán, transformando a este tipo de modos en resonancias con finito factor de calidad.

Si bien los motivos por los que aparecen BICs son en gran parte propios del sistema, un punto común es que en aquellos sistemas que presentan simetrías, soluciones con diferentes clases de simetrías forman espacios ortogonales entre si. En estos casos existe la posibilidad de que modos pertenecientes a un subespacio de soluciones dado por una clase de simetría, se encuentre a alguna frecuencia que quede dentro del continuo de frecuencias pertenecientes a un espacio ortogonal referente a otra clase de simetría. Volviendo al ejemplo anterior, de tener un resonador no sumergido en un fluido, entonces observaremos discretización de modos longitudinales y transversales. Sabemos que estos modos son ortogonales vectorialmente por lo que al agregar el fluido los modos normales de las ondas de corte quedan inmersas en el ahora continuo de

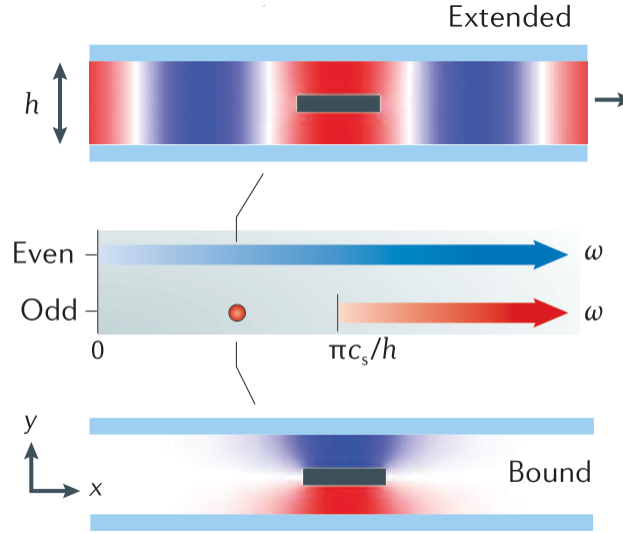


FIGURA 2.4: Ondas de presión desplazándose en el guía de onda de ancho h con una placa en su centro. En la imagen superior se observa una onda par extendida bajo la frecuencia de corte. Bajo de esta vemos el espectro de frecuencias con la correspondiente frecuencia de corte $\pi c_s/h$ para los modos impares y también se encuentra señalado el modo impar (BIC) que aparece bajo la frecuencia de corte. Finalmente, en la parte inferior de la figura vemos ilustrado el BIC correspondiente que se encuentra a igual frecuencia que el modo par ilustrado en el tope de la figura [17].

ondas propagantes de presión. Otro ejemplo es el de aire viajando por un guía de onda que cuenta con una placa colocada en el centro de este (ver figura 2.4).

Consideremos un guía de onda alineados horizontalmente con el eje x de modo que el eje y de nuestro sistema sea acotado por las paredes de este guía de onda. Sabemos que este tiene simetría de reflexión con respecto al eje x . También sabemos que los modos propagantes pueden ser pares o impares a lo largo del eje y , donde los últimos solo pueden existir sobre una frecuencia de corte $\pi c_s/h$ para c_s velocidad del sonido y h el ancho del guía de onda. Introducir una placa en el centro del sistema respetará la simetría de reflexión y sobre la superficie de esta, al igual que en las paredes del guía de onda, se deberá respetar que $\partial p/\partial n = 0$ para n la dirección normal a la superficie. En consecuencia aparecerá un modo impar que, al centro de la placa, se comportará localmente como un dos de modos pares separados por esta con frecuencia bajo el corte. Luego, como este modo impar es ortogonal al resto de modos impares extendidos así como al espectro de modos pares extendidos, no queda otra opción que tener por resultado una distribución no propagante situada en el continuo de frecuencias pares, un BIC [17].

Existen variados ejemplos de estos BICs apareciendo en distintas áreas de la física y la física de materia condensada no es la excepción. En este escrito veremos como BICs aparecen como modos normales de la función de onda (o de una onda electromagnética en el caso de redes fotónicas) producto de la existencia de bordes en el cristal a tratar, sin embargo para lograr

esto primero debemos entender el formalismo que nos permite obtener estas soluciones.

Modelo de enlace fuerte

En este capítulo procederemos a revisar el formalismo de enlace fuerte el cual será utilizado de forma extensiva para el análisis de la red bidimensional Su-Schriffer-Heeger. En primer lugar, nos centraremos en una formulación por medio de combinaciones lineales de orbitales atómicos que es como se suele introducir este tipo de modelos. Para esto utilizaremos un acercamiento similar al utilizado en el artículo [20]. Posteriormente procederemos a demostrar que en materiales fotónicos se puede construir un operador equivalente al Hamiltoniano de enlace fuerte entre orbitales lo que permite una descripción bajo el mismo formalismo de segunda cuantización. Esto permite evidenciar que modelos de enlace fuerte pueden ser utilizados tanto en sólidos como en cristales fotónicos.

3.1. Combinación lineal de orbitales atómicos

Sea $H_{at}(\mathbf{r})$ el Hamiltoniano de un electrón bajo un potencial atómico centrado en el origen y sea $|\varphi_j\rangle$ el estado asociado a un orbital j del átomo desde el cual transiciones a otros orbitales son posibles (e.g. transiciones desde un orbitales de valencia a otro orbital de valencia de un átomo próximo), sabemos que estos satisfacen la ecuación de valores propios:

$$\hat{H}_{at}|\varphi_j\rangle = \varepsilon_j |\varphi_j\rangle \quad (3.1)$$

Donde ε_j corresponden a la energía propia del estado. También es sabido que las norma de la función de onda de los orbitales atómicos es suprimida exponencialmente para distancias lejanas del núcleo. Esto nos lleva a desarrollar un modelo para redes cristalinas que tome en cuenta tanto el carácter periódico del cristal así como el decaimiento de potenciales atómicos externos a un sitio particular de la red en las proximidades de de este. Dicho de otra manera, dada una red de Bravais con base y N sitios, construimos un hamiltoniano que satisface:

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R} \implies H(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{\mathbf{P}}{2m} + \sum_{\nu} U(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\nu}_{\nu}) \wedge H(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = H(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

El cual podemos escribir explícitamente como:

$$H(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{P}}{2m} + \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\nu} U(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\nu}_{\nu}) \equiv H_0(\mathbf{r}) + \Delta U(\mathbf{r}) \quad (3.3)$$

Donde los distintos \mathbf{R} corresponden a vectores primitivos de la red, $\boldsymbol{\nu}_{\nu}$ los vectores de la base y $U(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\nu}_{\nu})$ los potenciales atómicos en cada uno de los sitios de la red. Por simplicidad, llamamos $H_0(\mathbf{r})$ al hamiltoniano asociado a las contribuciones atómicas para $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ y $\Delta U(\mathbf{r})$

a las contribuciones del resto de la red. Para poder encontrar una solución aproximada procederemos a construir un espacio vectorial para un conjunto de estados o funciones de prueba sobre las que aplicaremos método variacional. Es en este punto que imponemos la primera gran suposición del modelo: *Una buena función de prueba ϕ_μ corresponde a una combinación lineal de orbitales de un mismo tipo (j) para una posición \mathbf{r}_ν dada en la base. En consecuencia distintos ϕ_μ forman una base para el espacio de posibles funciones de prueba.* En otras palabras, construimos un espacio de soluciones aproximadas tiene como base elementos del tipo:

$$\begin{aligned} |\phi_\mu\rangle &:= \sum_{\mathbf{R}} b_\mu(\mathbf{R}) |\varphi_\mu(\mathbf{R} + \mathbf{r}_\mu)\rangle \\ \implies \phi_\mu(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{R}} b_\mu(\mathbf{R}) \varphi_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{r}_\mu) \\ &\equiv \sum_{\mathbf{R}} b_\mu(\mathbf{R}) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Donde definimos el índice μ como aquel que considera un orbital y posición de base fijos:

$$\mu := \nu + W(j-1) \quad \Bigg/ \quad 1 \leq \nu \leq W \quad \wedge \quad 1 \leq j \leq J \quad (3.5)$$

De modo que $1 \leq \mu \leq W \cdot J$. La expresión (3.4) es la misma enunciada en *Condense matter physics* por Michael P. Marder [21]. Teniendo esta forma, notemos que en principio hemos considerado que las combinaciones lineales pueden estar dadas por escalares arbitrarios diferentes para distintos vectores primitivos de la red. Sin embargo el teorema de Bloch impone que traslaciones de la función de onda debe satisfacer:

$$\phi_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{R}_1) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} \phi_\mu(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

Donde consideraremos que \mathbf{R}_1 corresponde a un vector de la red. Esto evidencia que para cada valor de \mathbf{k} existirán funciones de prueba distintas (todas con la misma estructura pero diferente \mathbf{k}). Explícitamente (3.6) se escribe:

$$\phi_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{R}_1) = \sum_{\mathbf{R}} b_j(\mathbf{R}) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \mathbf{R}_1) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} \sum_{\mathbf{R}} b_\mu(\mathbf{R}) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (3.7)$$

Luego, podemos hacer el cambio de variable $\mathbf{R}_p = \mathbf{R} - \mathbf{R}_1$ y reescribir:

$$\phi_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{R}_1) = \sum_{\mathbf{R}} b_\mu(\mathbf{R}) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R} + \mathbf{R}_1) = \sum_{\mathbf{R}_p} b_\mu(\mathbf{R}_p + \mathbf{R}_1) \tilde{\varphi}_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) \quad (3.8)$$

Como $\mathbf{R}_p = \mathbf{R} - \mathbf{R}_1$ podemos reemplazar el índice de la suma $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}_1$ sin problema. Por otro lado, \mathbf{R}_p también corresponde a un vector arbitrario de la red (al igual que \mathbf{R}) por lo que podemos escribir de forma paralela:

$$\phi_\mu(\mathbf{r} + \mathbf{R}_1) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} \sum_{\mathbf{R}} b_\mu(\mathbf{R}_n) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad \underbrace{\equiv}_{\mathbf{R}_n \rightarrow \mathbf{R}_p} \quad e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} \sum_{\mathbf{R}_p} b_\mu(\mathbf{R}_p) \tilde{\varphi}_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) \quad (3.9)$$

Reemplazando (3.8) y (3.9) en (3.7) obtenemos la igualdad:

$$\sum_{\mathbf{R}_p} b_\mu(\mathbf{R}_p + \mathbf{R}_1) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_1} \sum_{\mathbf{R}_p} b_\mu(\mathbf{R}_p) \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_p) \quad (3.10)$$

De lo que podemos concluir que $\forall \mathbf{R}_p$:

$$b_\mu(\mathbf{R}_p + \mathbf{R}_1) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_1} b_\mu(\mathbf{R}_p) \quad (3.11)$$

Por lo que b_μ es una función de Bloch. En particular:

$$b_\mu(\mathbf{R}_1) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_1} b_\mu(\mathbf{0}) \quad (3.12)$$

De modo que (3.4) se reescribe:

$$\phi_\mu(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = b_\mu(\mathbf{0}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (3.13)$$

Donde hemos puesto énfasis en la dependencia de un vector de onda \mathbf{k} escribiendo $\phi_\mu(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ ya que esperamos que los vectores \mathbf{k} posibles corresponden a los distintos estados propios. Como ya enunciado, hemos asumido las funciones de onda descritas por la ecuación (3.13) corresponden a una base del espacio de funciones de prueba (no necesariamente son ellas funciones de prueba para las funciones propias), por esta razón, podemos escribir funciones de prueba para los estados propios del Hamiltoniano como combinaciones lineales de las funciones ϕ_μ :

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mu} c_\mu(\mathbf{k}) \phi_\mu(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mu} c_\mu(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (3.14)$$

Donde los $b_\mu(\mathbf{0})$ han sido absorbidos por los coeficientes de combinación lineal c_μ y hemos agregado un factor de $1/\sqrt{N}$ ya que este suele aparecer seguido en el proceso de normalización.

3.2. Energías propias

Las energías propias del hamiltoniano total vienen dadas por:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\langle \Psi_{\mathbf{k}} | \hat{H} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle}{\langle \Psi_{\mathbf{k}} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle} \quad (3.15)$$

Reemplazando nuestra función de prueba (3.14) en (3.15) obtenemos:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{\mu\mu'} H_{\mu\mu'} c_\mu^*(\mathbf{k}) c_{\mu'}(\mathbf{k})}{\sum_{\mu\mu'} S_{\mu\mu'} c_\mu^*(\mathbf{k}) c_{\mu'}(\mathbf{k})} \quad (3.16)$$

Donde:

$$H_{\mu\mu'} := \langle \phi_\mu | \hat{H} | \phi_{\mu'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}' - \mathbf{R})} t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{\mu\mu'} \quad (3.17)$$

Donde $t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{\mu\mu'}$ corresponderá al *parámetro de salto*:

$$t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{\mu\mu'} := \langle \varphi_\mu(\mathbf{R} + \mathbf{r}_\mu) | \hat{H} | \varphi_{\mu'}(\mathbf{R}' + \mathbf{r}_{\mu'}) \rangle \quad (3.18)$$

Por otra parte

$$S_{\mu\mu'} := \langle \phi_\mu | \phi_{\mu'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}' - \mathbf{R})} s_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{\mu\mu'} \quad (3.19)$$

contiene el *parámetro de superposición entre orbitales* $s_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}^{\mu\mu'}$:

$$s_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}^{\mu\mu'} := \langle \varphi_\mu(\mathbf{R} + \mathbf{r}_\mu) | \varphi_{\mu'}(\mathbf{R}' + \mathbf{r}_{\mu'}) \rangle \quad (3.20)$$

Considerar solamente transiciones entre vecinos más cercanos suele reducir considerablemente ambos parámetros así como las ecuaciones (3.17) y (3.19). Como es usual en el método variacional, buscamos que los coeficientes $c_\mu(\mathbf{k})$ minimicen expresión (3.16) para garantizar una buena aproximación a las energías propias. Esto es:

$$\frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial c_\mu(\mathbf{k})} = \frac{\sum_{\mu'} H_{\mu\mu'} c_{\mu'}(\mathbf{k})}{\sum_{\mu\mu'} \mathcal{S}_{\mu\mu'} c_\mu^*(\mathbf{k}) c_{\mu'}(\mathbf{k})} - \frac{\sum_{\mu\mu'} H_{\mu\mu'} c_\mu^*(\mathbf{k}) c_{\mu'}(\mathbf{k})}{\left(\sum_{\mu\mu'} \mathcal{S}_{\mu\mu'} c_\mu^*(\mathbf{k}) c_{\mu'}(\mathbf{k})\right)^2} \sum_{\mu'} \mathcal{S}_{\mu\mu'} c_{\mu'}(\mathbf{k}) = 0 \quad (3.21)$$

Multiplicar esta última ecuación por $\sum_{\mu\mu'} \mathcal{S}_{\mu\mu'}^* c_\mu^*(\mathbf{k}) c_{\mu'}(\mathbf{k})$ y substituir (3.16) en esta entrega:

$$\sum_{\mu'} H_{\mu\mu'} c_{\mu'}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) \sum_{\mu'} \mathcal{S}_{\mu\mu'} c_{\mu'}(\mathbf{k}) \quad (3.22)$$

Podemos escribir esta ecuación en forma matricial:

$$\mathbb{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k}) \mathbb{S} \Psi_{\mathbf{k}} \quad / \quad \Psi_{\mathbf{k}} := \begin{bmatrix} c_1(\mathbf{k}) \\ \vdots \\ c_N(\mathbf{k}) \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

Al escribir (3.23) de la siguiente manera:

$$(\mathbb{H}_{\mathbf{k}} - E(\mathbf{k}) \mathbb{S}) \Psi_{\mathbf{k}} = \mathbf{0} \quad (3.24)$$

Podemos darnos cuenta de que soluciones no triviales para $\Psi_{\mathbf{k}}$ se obtienen cuando el determinante de la matriz al lado izquierdo es nulo:

$$|\mathbb{H}_{\mathbf{k}} - E(\mathbf{k}) \mathbb{S}| = 0 \quad (3.25)$$

Ecuación de la cual deberíamos recuperar las energías propias y la resultante estructura de bandas. Es usual considerar la matriz $\mathbb{S} = \mathbf{1}$ en la transición a segunda cuantización ya que el parámetro de superposición entre orbitales suele ser despreciable debido al rápido decaimiento de las funciones de onda para los orbitales a medida que nos alejamos del sitio correspondiente. En tal caso, la ecuación (3.23) se transforma en una ecuación de Schrödinger matricial (ecuación de valores propios) para los estados $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ entérminos de la base compuesta de los estados $|\phi_\mu\rangle$. En este caso entonces reescribimos la ecuación (3.25) como la ecuación característica:

$$|\mathbb{H}_{\mathbf{k}} - E(\mathbf{k}) \mathbf{1}| = 0 \quad (3.26)$$

3.3. Segunda cuantización

Comenzamos asumiendo $\mathbb{S} = \mathbf{1}$ ya que esto vuelve la ecuación (3.23) en una ecuación de Schrödinger efectiva bajo la base de los estados $|\phi_\mu\rangle$. Bajo esta premisa deberíamos ser capaces de escribir:

$$\hat{H} = \sum_{ij} \langle \phi_i | \hat{H} | \phi_j \rangle | \phi_i \rangle \langle \phi_j | = \sum_{ij} H_{ij} | \phi_i \rangle \langle \phi_j | \quad (3.27)$$

Las transición a segunda cuantización se consigue reemplazando todos operadores $|\phi_i\rangle\langle\phi_j|$ por operadores creación y aniquilación $\hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger\hat{c}_{j\mathbf{k}}$ así como sumando por todos los posibles \mathbf{k} en la primera zona de Brillouin. Es decir que:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ij} H_{ij} \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{k}} \quad (3.28)$$

Luego podemos desarrollar:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ij} H_{ij}(\mathbf{k}) \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{k}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{ij} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} H_{ij}(\mathbf{k}') \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{k}'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{ij} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})} t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{ij} \right) \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{k}'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{ij} \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}''} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}''} \right) \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})} t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{ij} \right) \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Donde hemos utilizado el hecho de que:

$$\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}''} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}''} \quad (3.30)$$

Luego, utilizamos el cambio de variable $\Delta\mathbf{R} = \mathbf{R}' - \mathbf{R}$ de modo que:

$$t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{ij} = t_{\Delta\mathbf{R}}^{ij} \quad \wedge \quad \mathbf{R}' = \mathbf{R} + \Delta\mathbf{R} \quad (3.31)$$

La última expresión de (3.29) toma la forma:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{ij} \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}''} e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}''} \right) \underbrace{\left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}} 1 \right)}_1 \left(\sum_{\Delta\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \Delta\mathbf{R}} t_{\Delta\mathbf{R}}^{ij} \right) \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{k}'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{R}''} \sum_{\Delta\mathbf{R}} \frac{t_{\Delta\mathbf{R}}^{ij}}{N} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}''} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R}'' + \Delta\mathbf{R})} \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Bajo el cambio de variable $\tilde{\mathbf{R}} = \mathbf{R}'' + \Delta\mathbf{R}$ tenemos:

$$t_{\Delta\mathbf{R}}^{ij} = t_{\tilde{\mathbf{R}}, \mathbf{R}''}^{ij} \quad (3.33)$$

De modo que:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{R}''} \sum_{\tilde{\mathbf{R}}} \frac{t_{\tilde{\mathbf{R}}, \mathbf{R}''}^{ij}}{N} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}''} e^{i\mathbf{k}' \cdot \tilde{\mathbf{R}}} \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{k}'} \\ &= \sum_{ij} \sum_{\mathbf{R}''} \sum_{\tilde{\mathbf{R}}} t_{\tilde{\mathbf{R}}, \mathbf{R}''}^{ij} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}''} \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \tilde{\mathbf{R}}} \hat{c}_{j\mathbf{k}'} \right) \end{aligned} \quad (3.34)$$

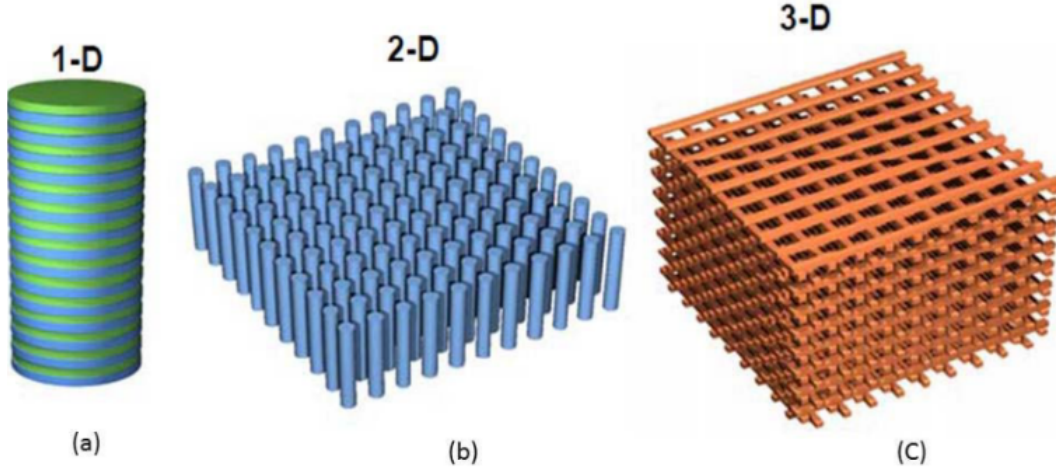


FIGURA 3.1: Ilustración de posibles cristales fotónicos en una dimensión (a), dos dimensiones (b) y tres dimensiones (c) [22].

Procedemos a usar las transformaciones entre espacios de momentum y real:

$$\hat{c}_{i\mathbf{R}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \hat{c}_{i\mathbf{k}}^\dagger \quad (3.35)$$

Para escribir el Hamiltoniano de enlace fuerte en el espacio real:

$$\hat{H} = \sum_{\tilde{\mathbf{R}}, \mathbf{R}''} \sum_{ij} t_{\tilde{\mathbf{R}}, \mathbf{R}''}^{ij} \hat{c}_{i\tilde{\mathbf{R}}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{R}''} \quad (3.36)$$

Cambiando a índices más amigables: ($\tilde{\mathbf{R}} \rightarrow \mathbf{R} \wedge \mathbf{R}'' \rightarrow \mathbf{R}'$):

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \sum_{ij} t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}^{ij} \hat{c}_{i\mathbf{R}}^\dagger \hat{c}_{j\mathbf{R}'} \quad (3.37)$$

Finalmente, considerar vecinos cercanos permite escribir el operador de forma más sencilla:

$$\hat{H} = \sum_{\langle m, l \rangle} t_{ml} \hat{c}_m^\dagger \hat{c}_l + \text{h.c.} \quad (3.38)$$

donde m y l indexan pares de vecinos cercanos.

3.4. Cristales fotónicos

La forma más sencilla de entender un cristal fotónico es como un arreglo periódico de medios con distintos índices de refracción los que forman una estructura periódica. En esta sección, nuestro objetivo será demostrar que cristales fotónicos unidimensionales y bidimensionales compuestos por guías de onda pueden ser tratados con una ecuación de Schrödinger efectiva que contiene un Hamiltoniano periódico como el tratado en (3.3). Esto dará paso a que el mismo formalismo matemático desarrollado para redes de solidos cristalinos también sea valido para

este tipo de estructuras periódicas [23, 24]. Iniciamos recordando las definiciones de campos auxiliares:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) := \epsilon(\mathbf{r})\epsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (3.39)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) := \frac{1}{\mu_0}\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (3.40)$$

Donde $\epsilon(\mathbf{r})$ corresponde a la permitividad relativa la cual variará para distintos puntos del espacio (en nuestro caso periódicamente). Por otro lado hemos considerado la permeabilidad relativa $\mu(\mathbf{r}) \approx 1$ como es usual. Luego, escribimos las leyes de Maxwell de la siguiente manera:

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) \iff \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \epsilon(\mathbf{r})\epsilon_0\mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) \quad (3.41)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}(\mathbf{r}, t) \quad (3.42)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 0 \iff \nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = 0 \quad (3.43)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (3.44)$$

Luego, podemos extraer el rotor de (3.42):

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= \nabla \times \left(-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right) \\ \nabla (\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} &= -\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{B}) \end{aligned} \quad (3.45)$$

Luego reemplazamos el rotor por (3.41) en su segunda forma y obtenemos que:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon(\mathbf{r}) \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{E}). \quad (3.46)$$

Ecuación diferencial desacoplada para el campo eléctrico que mantiene una forma similar a una ecuación de onda no homogénea. Procederemos ahora a calcular el gradiente:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\epsilon(\mathbf{r})\epsilon_0} \right) \\ &= \frac{1}{\epsilon_0} \left(-\frac{1}{\epsilon^2(\mathbf{r})} \epsilon(\mathbf{r}) \cdot \nabla \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) + \epsilon(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) \right) \\ &= -\frac{\nabla \epsilon(\mathbf{r})}{\epsilon(\mathbf{r})} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\therefore \nabla (\nabla \cdot \mathbf{E}) = -\nabla [\nabla (\ln \epsilon(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{E}] \quad (3.48)$$

De forma que (3.46) queda:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon(\mathbf{r}) \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\nabla [\nabla (\ln \epsilon(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{E}] \quad (3.49)$$

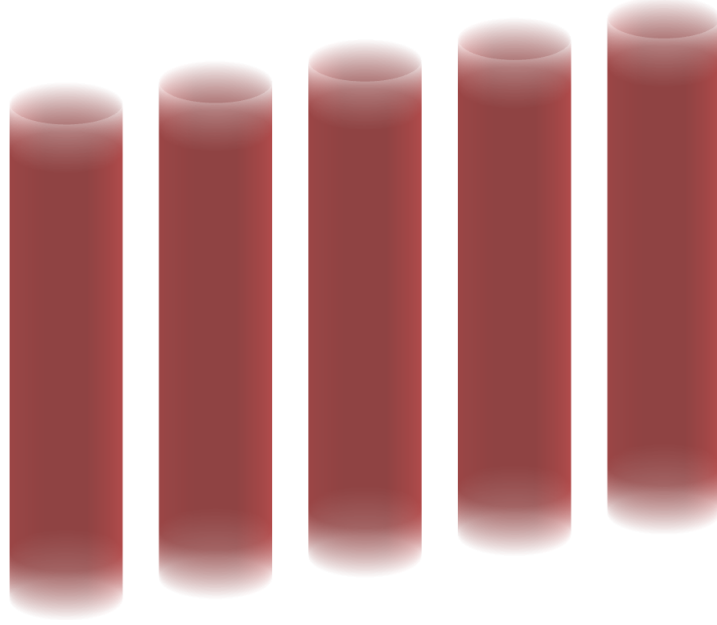


FIGURA 3.2: Guías de onda cilíndricas alineados y equidistantes.

Procedimiento similar se puede hacer sobre el campo magnético para obtener:

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \epsilon(\mathbf{r}) \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = -\nabla \cdot (\ln \epsilon(\mathbf{r})) \times [\nabla \times \mathbf{H}] \quad (3.50)$$

Suponiendo una solución monocromática para (3.49) de la forma:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}'(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \quad (3.51)$$

Obtenemos la forma:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon(\mathbf{r}) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E} = -\nabla [\nabla (\ln \epsilon(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{E}] \quad (3.52)$$

Para poder tratar un sistema como el visualizado en la Figura 3.1(b), tenemos que considerar un sistema unidimensional compuesto por una hilera de guías de onda equidistantes que se extienden en línea recta a lo largo del eje z . De este modo veremos que existe un gradiente periódico $\nabla \epsilon(\mathbf{r})$ definido por la fila de guías de onda como se ilustran en la Figura 3.2. Ahora consideremos una onda electromagnética viajando por el guía de onda y polarizada de manera que el campo el \mathbf{E} sea casi perpendicular a $\nabla \epsilon(\mathbf{r})$ salvo por la desviación en un ángulo Θ . Bajo este escenario la ecuación (3.52) toma la forma:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - n^2(\mathbf{r}) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E} = 0 \quad (3.53)$$

Donde reconocemos $n^2(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r})$ como el coeficiente de refracción dependiente de la posición. Debido a que este último solo varía en la dirección ortogonal a la propagación, podemos escribir $\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r}_\perp) \iff n^2(\mathbf{r}) = n^2(\mathbf{r}_\perp)$ de modo que (3.53):

$$\nabla^2 \mathbf{E} - n^2(\mathbf{r}_\perp) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E} = 0 \quad (3.54)$$

Consideremos entonces una solución aproximada del tipo:

$$E(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}\Psi(\mathbf{r}) \approx e^{ik_0n_0z-i\omega t}\Psi(\mathbf{r}) \quad (3.55)$$

Donde $\mathbf{k}_0 = k_0\mathbf{e}_z = (\omega/c)\mathbf{e}_z$ corresponde al vector de onda de viajar a lo largo del eje z y n_0 corresponde a un coeficiente de refracción efectivo. Reemplazar esta forma en (3.54) entrega:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial z} = -\frac{1}{2k_0n_0}\nabla^2\Psi + \left(\frac{k_0n_0}{2} - \frac{n^2(\mathbf{r}_\perp)k_0}{2n_0}\right)\Psi \quad (3.56)$$

De la aproximación paraxial se pueden obtener las correcciones a segundo orden referentes a la desviación entre \mathbf{k} y \mathbf{k}_0 :

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} \rightarrow k_0n_0z + \left(k_0n_0\Theta r_\perp - k_0n_0\frac{\Theta^2}{2}z\right) \quad (3.57)$$

Escribir z y \mathbf{r}_\perp en términos de estas desviaciones corresponde a definir:

$$\Delta\mathbf{r}_\perp := \Theta\mathbf{r}_\perp \quad \wedge \quad \Delta z := \frac{\Theta^2}{2}z \quad (3.58)$$

Sin embargo utilizaremos un cambio de variables sutilmente distinto que permita obtener una forma final más sugerente [24]. Esto es:

$$\tilde{\mathbf{r}}_\perp := \Theta k_0n_0\mathbf{r}_\perp \quad \wedge \quad \tilde{z} := \Theta^2 k_0n_0z \equiv \Theta^2\tau/\hbar \quad (3.59)$$

Donde para la definición de \tilde{z} hemos utilizado un parámetro temporal definido por:

$$\tau := \hbar k_0n_0z \quad (3.60)$$

Este par de cambios de variable permite escribir (3.56):

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial\tilde{z}} = -\frac{1}{2}\tilde{\nabla}_\perp^2\Psi - \frac{1}{2\Theta^2}\left[\frac{n^2(\tilde{\mathbf{r}}_\perp) - n_0^2}{n_0^2}\right]\Psi - \frac{\Theta^2}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\tilde{z}^2} \quad (3.61)$$

Debido a la aproximación paraxial esperamos que:

$$\frac{\Theta^2}{2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\tilde{z}^2} \rightarrow 0 \quad (3.62)$$

Así como que el término :

$$\left[\frac{n^2(\tilde{\mathbf{r}}_\perp) - n_0^2}{n_0^2}\right] \quad (3.63)$$

Sea del orden de Θ^2 para no ser despreciado. Bajo estas consideraciones podemos escribir:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial\tilde{z}} = -\frac{1}{2}\tilde{\nabla}_\perp^2\Psi - \frac{1}{2\Theta^2}\left[\frac{n^2(\tilde{\mathbf{r}}_\perp) - n_0^2}{n_0^2}\right]\Psi \quad (3.64)$$

Volver a la variable \mathbf{r}_\perp y utilizar el parámetro temporal τ definido en (3.59) y (3.60), se traduce en que (3.64) tome la forma:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial\tau}(\mathbf{r}_\perp, \tau) = -\frac{\hbar^2}{2m_{opt}}\nabla_\perp^2\Psi(\mathbf{r}_\perp, \tau) + V_{opt}(\mathbf{r}_\perp)\Psi(\mathbf{r}_\perp, \tau) \quad (3.65)$$

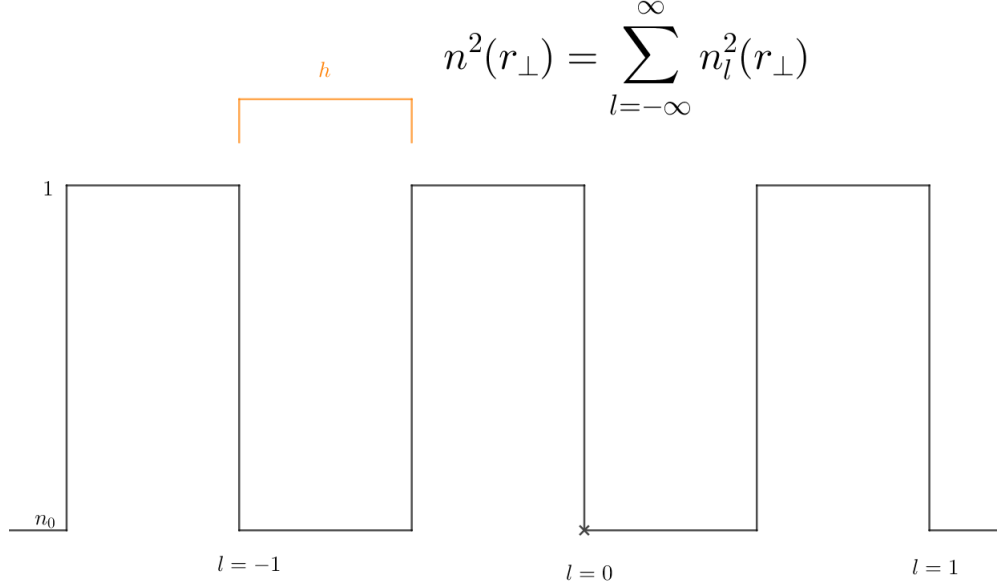


FIGURA 3.3: Ilustración de el índice de refracción periódico.

Que corresponde a una ecuación de Schrödinger efectiva o ecuación óptica de Schrödinger. Para esta tendremos que:

$$m_{opt} := (\hbar k_0 n_0)^2 \wedge V_{opt} = -\frac{1}{2} \left[\frac{n^2(\mathbf{r}_\perp) - n_0^2}{n_0^2} \right] \quad (3.66)$$

Recordando que $n^2(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r})$ es una función periódica con la forma de a una suma de funciones del tipo pozo potencial cuadrado:

$$n^2(\mathbf{r}_\perp) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} n_l^2(\mathbf{r}_\perp) \quad / \quad n_l^2(\mathbf{r}_\perp) = \begin{cases} n_0^2, & al < r_\perp < al + h \\ 1, & al + h < r_\perp < a(l+1) - h \\ 0, & \sim \end{cases} \quad (3.67)$$

Para a la distancia entre guías de onda y h el ancho de cada guía de onda. Tenemos entonces que la ecuación (3.65) es del mismo tipo que una ecuación de Schrödinger con el el Hamiltoniano expuesto en (3.3). De igual manera, es posible tratar este arreglo periódico de pozos potenciales bajo un formalismo de segunda cuantización con estados descritos por una base de Wannier (mismo Hamiltoniano de (3.38)):

$$\hat{H} = t \sum_l \hat{c}_{l+1}^\dagger \hat{c}_l + \text{h.c.} \quad (3.68)$$

Finalmente, para extender este formalismo a dos dimensiones basta considerar la suma de soluciones para campos polarizados de maneras distintas siempre ortogonales al correspondiente gradiente de permitividad $\nabla\epsilon$ (ver figura 3.4). Es importante que los campos satisfagan esto ya que la aproximación requiere que (3.53) sea valida para todo \mathbf{r} .

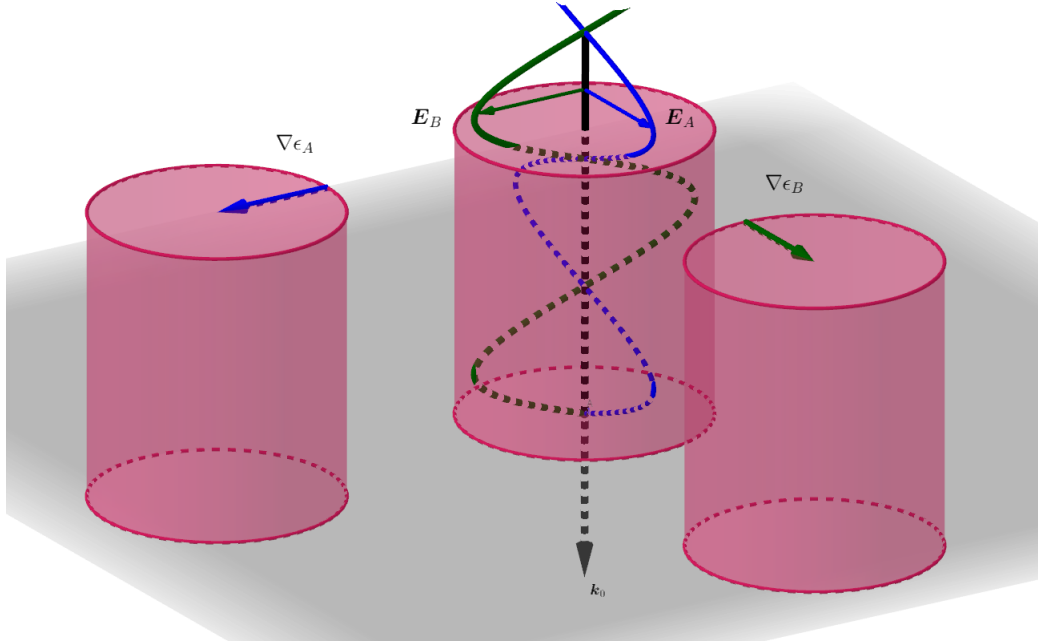


FIGURA 3.4: Segmento de un cristal fotónico bidimensional. Podemos ver que el campo es descompuesto en partes ortogonales a dos gradientes de permitividad distintos (A, B). Cada onda de esta descomposición obedece la ecuación (3.53) por separado y tendrá su propio Hamiltoniano en segunda cuantización. El Hamiltoniano total en este caso correspondería a $\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$.

Red Su-Schriffer-Heeger bidimensional

En este capítulo, nos centraremos en la reproducción de resultados obtenidos por Benalcazar y Cerjan [16] para corroborar la aparición de BICs. Al final del capítulo aboremos resultados experimentales que se han encontrado respecto a la existencia de estos estados para un sistema bidimensional SSH fotónico [25].

4.1. Revisión del Hamiltoniano y estructura de bandas

Iniciaremos analizando la red de interés y obtendremos su estructura de bandas con el fin de notar algunas propiedades preliminares de esta. La red mencionada corresponde a la mostrada en la figura 4.1 la cual es descrita por celdas unitarias cuadradas de largo $2a$ que contienen cuatro sitios para los cuales tenemos un término de salto t entre vecinos cercanos. Por otra parte, para sitios vecinos que no pertenecen a la misma celda existirá un distinto término de salto τ .

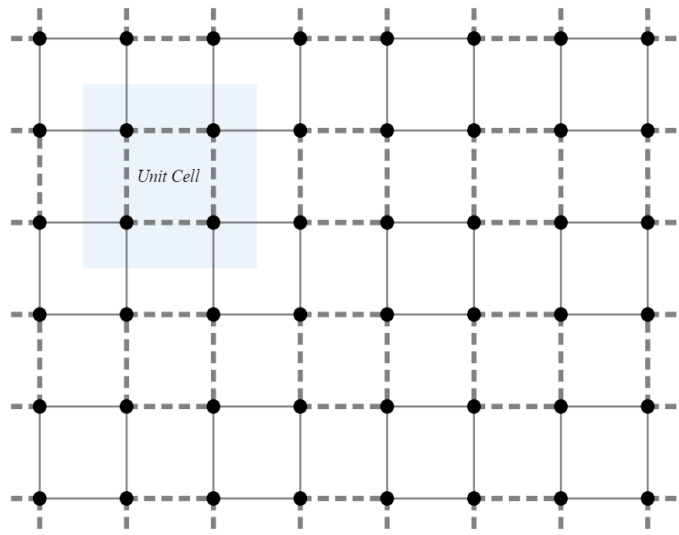


FIGURA 4.1: Red cristalina y su correspondiente celda unitaria.

Lo primero que notamos acerca de esta red es que no puede ser descrita como una simple red de Bravais cuadrada ya que la diferencia entre términos de salto dentro y fuera de la celda resulta en cuatro tipos de sitios con entornos distintos. En la figura 4.2 hemos decidido asignar un color a cada uno de estos sitios para facilitar la construcción del Hamiltoniano. Para poder describir esta configuración podemos considerar la red como una red de Bravais cuadrada con

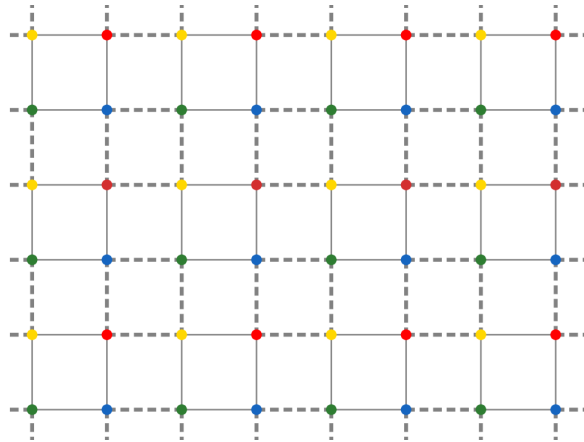


FIGURA 4.2: Representación de la red cristalina de interés. Hemos utilizado colores para etiquetar cada posición de la base.

base:

$$\mathbf{r} = \mathbf{0} , \quad \mathbf{g} = a(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) , \quad \mathbf{b} = a\mathbf{e}_y , \quad \mathbf{y} = a\mathbf{e}_x \quad (4.1)$$

Donde hemos llamado a cada vector de sitio según el color que le hemos asignado en la figura 4.2 (red, green, blue, yellow).

Considerando todo esto, nuestro Hamiltoniano corresponderá a la suma de dos términos:

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_\tau \quad (4.2)$$

Donde \hat{H}_t corresponde a un Hamiltoniano de enlace fuerte que encapsula todas las transiciones entre sitios que tienen término de salto t y \hat{H}_τ corresponde a aquel que encapsula todas las transiciones posibles para aquellas con término τ . Para poder proceder entonces, debemos centrarnos en una celda unitaria y estudiar todos los distintos saltos que pueden existir a vecinos cercanos dentro y fuera de esta. Para poder ver esto, consideremos la figura 4.3 la cual muestra todas las distintas conexiones que existen para una celda unitaria dada.

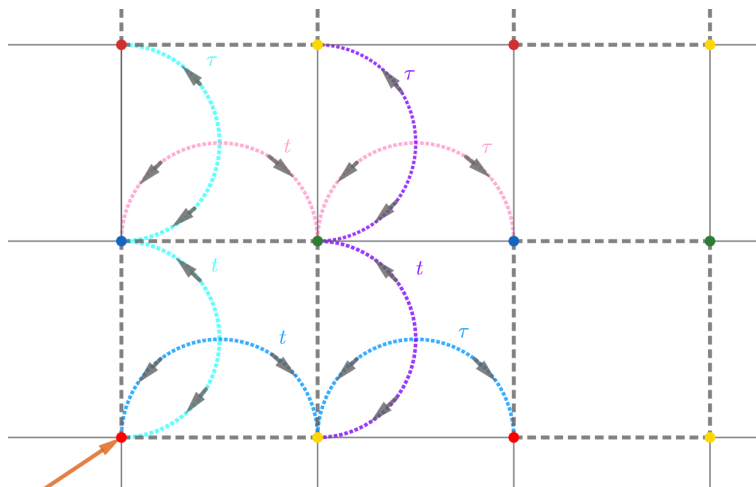


FIGURA 4.3: Transiciones a considerar en cada término del Hamiltoniano

Sabemos que para una celda dada en posición (n_x, n_y) existirán 4 conexiones entre vecinos dentro de la celda y 8 fuera de esta. Sin embargo, 4 de las conexiones con el exterior se encuentran repetidas y por tanto solo estas 4 serán consideradas en cada término del hamiltoniano. Las restantes serán encapsuladas por los términos correspondientes a las celdas vecinas. En el caso de la figura 4.3, los términos de la celda a la izquierda $(n_x - 1, n_y)$ y de la celda a la debajo $(n_x, n_y + 1)$ de la celda ilustrada contienen las 4 conexiones omitidas en la figura. De esta manera, sean los operadores creación $\hat{b}^\dagger, \hat{g}^\dagger, \hat{r}^\dagger, \hat{y}^\dagger$ correspondientes a los distintos sitios ya señalados, tendremos:

$$\hat{H}_t = -t \sum_{n_x=1}^{N_x} \sum_{n_y=1}^{N_y} (\hat{b}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{g}_{n_x, n_y} + \hat{g}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{y}_{n_x, n_y} + \hat{y}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{r}_{n_x, n_y} + \hat{r}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{b}_{n_x, n_y}) + \text{h.c.} \quad (4.3)$$

$$\hat{H}_\tau = -\tau \sum_{n_x=1}^{N_x-1} \sum_{n_y=1}^{N_y-1} (\hat{b}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{r}_{n_x, n_y+1} + \hat{g}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{y}_{n_x, n_y+1} + \hat{g}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{b}_{n_x+1, n_y} + \hat{y}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{r}_{n_x+1, n_y}) + \text{h.c.} \quad (4.4)$$

Donde N_x corresponde al número de celda unitarias de la red a lo largo del eje x , N_y el número de celdas a lo largo del eje y , y $N := N_x N_y$ el número total de celdas (en el límite termodinámico tratamos $N \rightarrow \infty$). Procedemos ahora a escribir el Hamiltoniano en términos del vector de onda \mathbf{k} con el fin de obtener la estructura de bandas de la red. Para esto utilizaremos que, para todo operador creación $\hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger$ (donde α representa un color) en la red tiene transformada de Fourier de la forma:

$$\hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \quad \left/ \quad \mathbf{r}_{n_x, n_y} = 2a(n_x \mathbf{e}_x + n_y \mathbf{e}_y) \quad \wedge \quad \mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y \right. \quad (4.5)$$

Nuestro Hamiltoniano tiene 3 tipos de términos distintos para distintos pares de operadores. Estos pueden ser reescritos:

$$\hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{\beta}_{n_x, n_y} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-2a(k_x n_x + k_y n_y)i} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{2a(k'_x n_x + k'_y n_y)i} \hat{\beta}_{\mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}'} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{\beta}_{n_x, n_y+1} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-2a(k_x n_x + k_y n_y)i} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{2a(k'_x n_x + k'_y (n_y+1))i} \hat{\beta}_{\mathbf{k}'} = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} e^{2ak'_y i} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{\beta}_{n_x, n_y+1} &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-2a(k_x n_x + k_y n_y)i} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{2a(k'_x (n_x+1) + k'_y n_y)i} \hat{\beta}_{\mathbf{k}'} = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} e^{2ak'_x i} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Donde α y β representan algún sitio con color asociado. Si cada par de operadores en (4.3) es reescrito usando (4.6) y cada par en (4.4) es reescrito usando (4.7) y (4.8) tendremos:

$$\hat{H}_t = -t \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{n_x, n_y} \frac{1}{N} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} (\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{g}_{\mathbf{k}'} + \hat{g}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{y}_{\mathbf{k}'} + \hat{y}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{r}_{\mathbf{k}'} + \hat{r}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}) + \text{h.c.} \quad (4.9)$$

$$\hat{H}_\tau = -\tau \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{n_x, n_y} \frac{1}{N} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} \left(e^{2ak'_y i} [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{r}_{\mathbf{k}'} + \hat{g}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{y}_{\mathbf{k}'}] + e^{2ak'_x i} [\hat{g}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} + \hat{y}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{r}_{\mathbf{k}'}] \right) + \text{h.c.} \quad (4.10)$$

Luego, utilizamos que:

$$\sum_{n_x, n_y} \frac{1}{N} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (4.11)$$

Para obtener:

$$\hat{H}_t = -t \sum_{\mathbf{k}} \left(\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{g}_{\mathbf{k}} + \hat{g}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{y}_{\mathbf{k}} + \hat{y}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{r}_{\mathbf{k}} + \hat{r}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \right) + \text{h.c.} \quad (4.12)$$

$$\hat{H}_\tau = -\tau \sum_{\mathbf{k}} \left(e^{2ak_y i} [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{r}_{\mathbf{k}} + \hat{g}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{y}_{\mathbf{k}}] + e^{2ak_x i} [\hat{g}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{y}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{r}_{\mathbf{k}}] \right) + \text{h.c.} \quad (4.13)$$

Juntando ambos términos y organizando de forma conveniente podemos escribir el hamiltoniano de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \left([t + \tau e^{-2ak_x i}] \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{g}_{\mathbf{k}} + [t + \tau e^{2ak_x i}] \hat{y}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{r}_{\mathbf{k}} + [t + \tau e^{-2ak_y i}] \hat{r}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + [t + \tau e^{2ak_y i}] \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{g}_{\mathbf{k}} \right) + \text{h.c.} \quad (4.14)$$

De forma más compacta podemos escribir la forma cuadrática:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Phi}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbb{H}_{\mathbf{k}} \hat{\Phi}_{\mathbf{k}} \quad (4.15)$$

Con:

$$\hat{\Phi}_{\mathbf{k}} := \begin{bmatrix} \hat{g}_{\mathbf{k}} \\ \hat{r}_{\mathbf{k}} \\ \hat{b}_{\mathbf{k}} \\ \hat{y}_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \wedge \mathbb{H}_{\mathbf{k}} := \begin{bmatrix} 0 & \mathbb{Q} \\ \mathbb{Q}^\dagger & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbb{Q} := \begin{bmatrix} t + \tau e^{2ak_x i} & t + \tau e^{2ak_y i} \\ t + \tau e^{-2ak_y i} & t + \tau e^{-2ak_x i} \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

Obtener los valores propios de $\mathbb{H}_{\mathbf{k}}$ nos entrega la estructura de bandas:

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{2} \sqrt{-\sqrt{(t^2 + \tau^2 + 2t\tau \cos(2ak_x)) (t^2 + \tau^2 + 2t\tau \cos(2ak_x))} + (t^2 + \tau^2 + t\tau (\cos(2ak_x) \cos(2ak_y)))} \quad (4.17)$$

$$E_{3,4}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{2} \sqrt{\sqrt{(t^2 + \tau^2 + 2t\tau \cos(2ak_x)) (t^2 + \tau^2 + 2t\tau \cos(2ak_x))} + (t^2 + \tau^2 + t\tau (\cos(2ak_x) \cos(2ak_y)))} \quad (4.18)$$

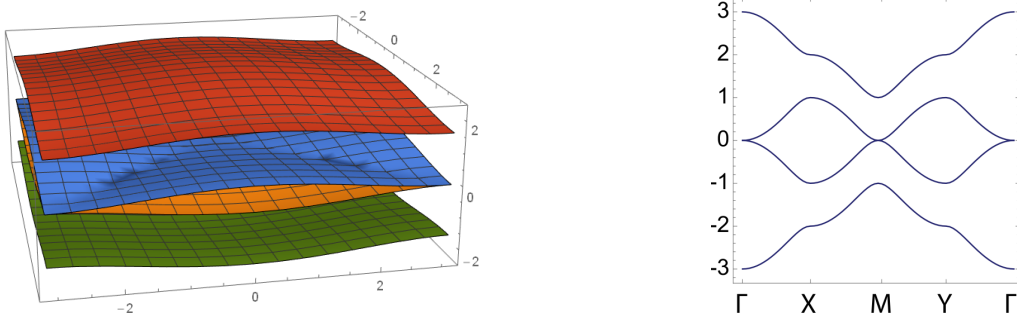


FIGURA 4.4: Estructura de bandas: A la izquierda podemos ver las superficies correspondientes a las bandas y a la derecha las curvas correspondientes a direcciones de alta simetría. Podemos ver que las bandas superiores son reflexiones de las bandas inferiores debido a la simetría quiral. También se observa la existencia de intersección entre las bandas centrales en $E = 0$.

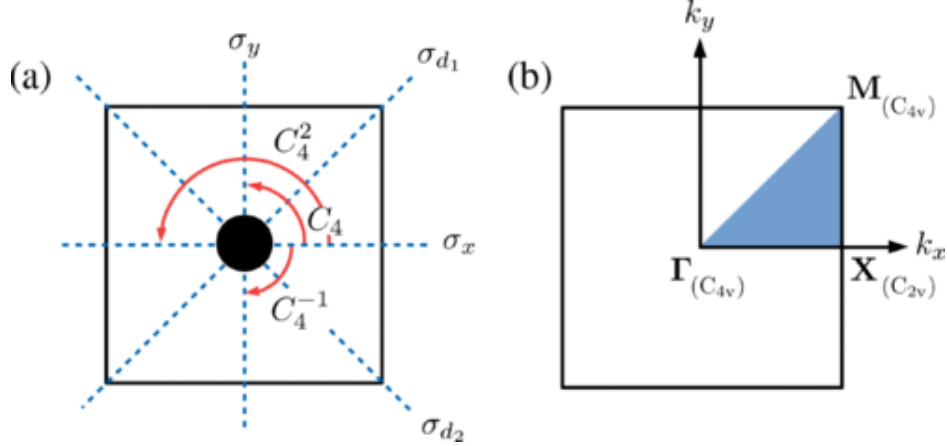


FIGURA 4.5: (a) La celda unitaria de la red SSH bidimensional. Los operadores de simetría del grupo C_{4v} son mostrados. (b) La zona de Brillouin con sus puntos de la simetría alta (PSA) y los pequeños grupos bajo los cuales los PSAs son invariantes. El sólido color consiste en todos los momentos que se encuentran dentro de la irreductible zona de Brillouin (parte de la zona de Brillouin sin puntos equivalentes bajo las operaciones de la simetría). Figura extraída de Ref. [26].

Observaciones

En primer lugar, se puede apreciar que el Hamiltoniano tiene simetría quirál. Esto significa que:

$$\{\hat{\Pi}, \mathbb{H}_{\mathbf{k}}\} = \hat{0} \quad \Bigg/ \quad \hat{\Pi} = \sigma_3 \otimes \mathbb{1}_{2 \times 2} \quad (4.19)$$

Donde $\hat{\Pi}$ corresponde al operador quirál. Consecuencia directa de (4.19) es que:

$$\hat{H} \hat{\Pi} = -\hat{\Pi} \hat{H} \quad (4.20)$$

De esta manera, sea $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ un estado con energía E que satisface:

$$\hat{H} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = E |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (4.21)$$

Podemos ver que existe un estado:

$$|\Psi'_{\mathbf{k}}\rangle = \hat{\Pi} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (4.22)$$

Que debido a (4.20) satisface:

$$\hat{H} |\Psi'_{\mathbf{k}}\rangle = -E |\Psi'_{\mathbf{k}}\rangle \quad (4.23)$$

En otras palabras, para todo estado propio del sistema con energía E debe existir un *compañero quirál* que es también propio y es de energía $-E$. Esto se evidencia en la simetría existente entre las bandas. Notemos en las figuras 4.4 que las dos bandas superiores son reflexiones de las bandas inferiores con respecto al plano de energía nula. Un caso especial es el de aquellos puntos en que hay estados de energía cero como lo son Γ y M . En estos puntos, por los argumentos dados anteriormente, cada estado del espacio degenerado de energía cero (Llamemoslo $\Xi_{E=0}$) debe satisfacer que:

$$\hat{H} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \mathbf{0} \quad \wedge \quad \hat{H} \hat{\Pi} |\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \mathbf{0} \quad (4.24)$$

Esto ocurre si una de las dos condiciones es cierta:

- Al igual que el resto de estados cada estado cuenta con un compañero quiral que habita en el mismo espacio $\Xi_{E=0}$.
- El estado $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ corresponde a un estado propio de $\hat{\Pi}$ con valor propio 0.

Sabemos que la segunda no puede ser cierta porque $\det(\hat{\Pi}) = 1 \neq 0$ (es de hecho unitario). Sigue entonces que $\Xi_{E=0}$ es un espacio doblemente degenerado. Esto significa que todos los puntos en que las bandas se tocan (lo que ocurre siempre en $E = 0$) corresponden a un pares de compañeros quirales.

Una segunda observación nace de como cada estado se comporta bajo operaciones del grupo C_{4v} , ver la Figura 4.5. De ser la red cuadrada ($N_x = N_y$) no es difícil ver que, como la red es simetría ante rotaciones en $\pi/2$, entonces la estructura de bandas también es simétrica bajo este tipo de rotaciones. Sin embargo, existe ambigüedad al aplicar rotaciones a estados de energía cero ya que ambos compañeros quirales pertenecen al mismo espacio de degeneración $\Xi_{E=0}$. Esto es equivalente a decir que los estados de $\Xi_{E=0}$ pueden ser escritos como el producto tensorial:

$$|\Psi\rangle = |\mathbf{k}\rangle \otimes |i\rangle \quad / \quad i = 1, 2 \quad (4.25)$$

Donde $|\mathbf{k}\rangle \in \varepsilon_{\mathbf{k}}$ especifica el vector de onda, $|i\rangle \in \varepsilon_{\Pi}$ especifica el compañero quiral de manera que $\Xi_{E=0} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \otimes \varepsilon_{\Pi}$. Para este caso, las acciones del operador \hat{C}_4 sobre $|\Psi\rangle$ son entendidas observando como el operador de rotaciones actúa en el espacio ε_{Π} generado por el par quiral para un dado vector de onda \mathbf{k} . Debido a que ε_{Π} es espacio bidimensional generado por el par quiral (el cual es un conjunto ortogonal), el operador de rotaciones \hat{C}_4 debe resultar en rotaciones del tipo dadas por:

$$\hat{C}_4|1\rangle = |2\rangle \quad \wedge \quad \hat{C}_4|2\rangle = -|1\rangle \quad (4.26)$$

Lo que es equivalente a decir que el operador toma la representación irreducible bidimensional E de grupo C_{4v} de este sistema. Dicho de otra manera, al representar los estados de este espacio bidimensional como forma escalar en \mathbb{C} ($|1\rangle = 1$ y $|2\rangle = i$) se tiene que que \hat{C}_4 queda representado por la operación:

$$\hat{C}_4 : x \rightarrow i \cdot x \quad / \quad x \in \mathbb{C} \quad (4.27)$$

Cabe mencionar que estas propiedades serán fundamentales para la aparición de BICs, por lo que solo podemos garantizar la aparición de estos en redes cuadradas. Esto debido a que, de ser la red rectangular ($N_x \neq N_y$) entonces la red no cuenta con simetría C_4 y los argumentos con respecto a las representaciones irreducibles de este grupo no son validos.

4.2. Red finita: ruptura de simetría en x e y

Para poder estudiar las consecuencias del carácter topológico de una red SSH bidimensional rectangular (finita) debemos tratar el hamiltoniano en el espacio real con el fin de considerar

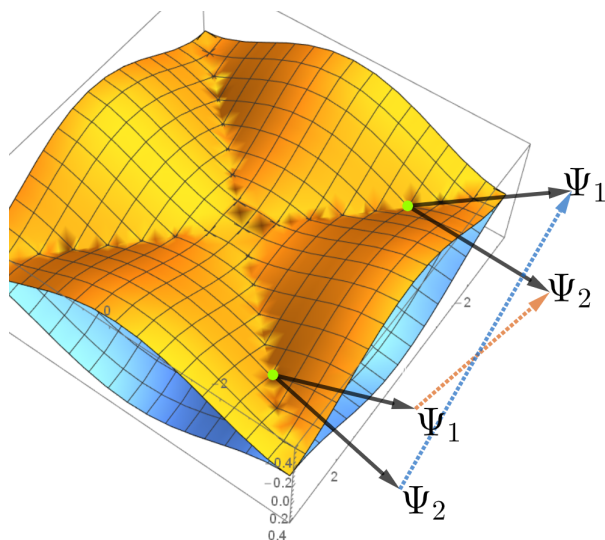


FIGURA 4.6: Visualización de la alternancia que existe al aplicar el operador de rotación sobre ambas partes de un par quiral de estados estado $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \in \Xi_{E=0}$.

la existencia de límites en las conexiones posibles para los operadores creación y destrucción situados en el borde de la red. Para esto procederemos a reescribir el Hamiltoniano (4.15) en el espacio real, esta vez de una manera sugerente que nos permita construir de forma sistemática una representación matricial \mathbb{H}_r . Diagonalizar esta matriz nos permitirá obtener el conjunto de valores propios de energía, así como los estados propios escritos en el espacio real (funciones de onda discretas).

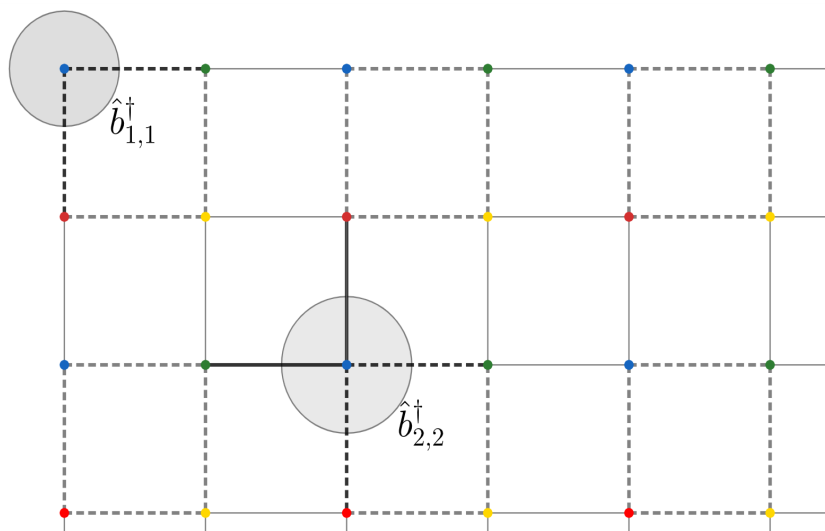


FIGURA 4.7: Notemos que, mientras el sitio azul en la celda (2,2) tiene sus los cuatro vecinos cercanos, el sitio azul en la celda (1,1) (equina) solo tiene dos.

4.2.1. Reescritura de la matriz $\mathbb{H}_{\mathbf{k}}$

En primer lugar, consideremos la siguiente transformación de fase para los operadores:

$$\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} = e^{\alpha \cdot \mathbf{k}i} \hat{\alpha}'_{\mathbf{k}} \quad (4.28)$$

Donde α corresponde al vector de la base asociado al operador de color α . Se puede demostrar (Para más detalle ver Apéndice A) que esta transformación corresponde a un cambio en la forma en que se indexan los sitios de la red en el espacio real. Por ahora, simplemente notemos que al usar (4.1) se tiene:

$$\hat{r}_{\mathbf{k}} = \hat{r}'_{\mathbf{k}} \wedge \hat{g}_{\mathbf{k}} = e^{a(k_x+k_y)i} \hat{g}'_{\mathbf{k}} \wedge \hat{b}_{\mathbf{k}} = e^{ak_y i} \hat{b}'_{\mathbf{k}} \wedge \hat{y}_{\mathbf{k}} = e^{ak_x i} \hat{y}'_{\mathbf{k}} \quad (4.29)$$

Por lo que reescribimos (4.15):

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Phi}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbb{H}_{\mathbf{k}} \hat{\Phi}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} \hat{g}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{r}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{b}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{y}'_{\mathbf{k}} \end{bmatrix}^\dagger \odot \begin{bmatrix} e^{a(k_x+k_y)i} \\ 1 \\ e^{ak_y i} \\ e^{ak_x i} \end{bmatrix}^\dagger \mathbb{H}_{\mathbf{k}} \begin{bmatrix} e^{a(k_x+k_y)i} \\ 1 \\ e^{ak_y i} \\ e^{ak_x i} \end{bmatrix} \odot \begin{bmatrix} \hat{g}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{r}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{b}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{y}'_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

Obteniendo la nueva forma del Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} \tilde{\mathbb{H}}_{\mathbf{k}} \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} \quad (4.31)$$

Similar a (4.32) tendremos que:

$$\hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} := \begin{bmatrix} \hat{g}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{r}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{b}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{y}'_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \wedge \tilde{\mathbb{H}}_{\mathbf{k}} := \begin{bmatrix} 0 & \tilde{\mathbb{Q}} \\ \tilde{\mathbb{Q}}^\dagger & 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbb{Q}} := \begin{bmatrix} te^{-ak_x i} + \tau e^{ak_x i} & te^{-ak_y i} + \tau e^{ak_y i} \\ te^{ak_y i} + \tau e^{-ak_y i} & te^{ak_x i} + \tau e^{-2ak_x i} \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

Teniendo esta forma procederemos a reescribir $\tilde{\mathbb{Q}}$:

$$\tilde{\mathbb{Q}} = \begin{bmatrix} (t+\tau) \cos(ak_x) + i(\tau-t) \sin(ak_x) & (t+\tau) \cos(ak_y) + i(\tau-t) \sin(ak_y) \\ (t+\tau) \cos(ak_y) - i(\tau-t) \sin(ak_y) & (t+\tau) \cos(ak_x) - i(\tau-t) \sin(ak_x) \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

Esto nos permite descomponer $\tilde{\mathbb{H}}_{\mathbf{k}}$ en términos de una suma de matrices donde los coeficientes son las funciones sinusoidales:

$$\tilde{\mathbb{H}}_{\mathbf{k}} = \mathbb{A}_x \cos(ak_x) + \mathbb{B}_x \sin(ak_x) + \mathbb{A}_y \cos(ak_y) + \mathbb{B}_y \sin(ak_y) \quad (4.34)$$

Donde podemos verificar que:

$$\mathbb{A}_x = (t+\tau)(\sigma_1 \otimes \mathbb{1}) \wedge \mathbb{B}_x = (t-\tau)(\sigma_2 \otimes \sigma_3) \wedge \mathbb{A}_y = (t+\tau)(\sigma_1 \otimes \sigma_1) \wedge \mathbb{B}_y = (t-\tau)(\sigma_1 \otimes \sigma_2) \quad (4.35)$$

Con $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ matrices de Pauli. Considerando esto (4.31) se puede escribir:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{t+\tau}{2} \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_x i} + e^{-ak_x i}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}}^\dagger (\sigma_1 \otimes \mathbb{1}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} + \frac{t-\tau}{2i} \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_x i} - e^{-ak_x i}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}}^\dagger (\sigma_2 \otimes \sigma_3) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} \\ &+ \frac{t+\tau}{2} \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_y i} + e^{-ak_y i}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}}^\dagger (\sigma_1 \otimes \sigma_1) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} + \frac{t-\tau}{2i} \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_y i} - e^{-ak_y i}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}}^\dagger (\sigma_1 \otimes \sigma_2) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.36)$$

4.3. Transición al espacio real

En este punto procederemos a expandir el primer término de (4.36) (el resto es símil y el desarrollo extenso):

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_x i} + e^{-ak_x i}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} (\sigma_1 \otimes \mathbb{1}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_x i} + e^{-ak_x i}) \begin{bmatrix} \hat{g}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{r}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{b}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{y}'_{\mathbf{k}} \end{bmatrix}^{\dagger} (\sigma_1 \otimes \mathbb{1}) \begin{bmatrix} \hat{g}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{r}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{b}'_{\mathbf{k}} \\ \hat{y}'_{\mathbf{k}} \end{bmatrix} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_x i} + e^{-ak_x i}) (\hat{r}'_{\mathbf{k}} \hat{y}'_{\mathbf{k}} + \hat{g}'_{\mathbf{k}} \hat{b}'_{\mathbf{k}} + \hat{b}'_{\mathbf{k}} \hat{g}'_{\mathbf{k}} + \hat{y}'_{\mathbf{k}} \hat{r}'_{\mathbf{k}}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_x i} + e^{-ak_x i}) (e^{ak_x i} \hat{r}'_{\mathbf{k}} \hat{y}'_{\mathbf{k}} + e^{-ak_x i} \hat{g}'_{\mathbf{k}} \hat{b}'_{\mathbf{k}} + e^{ak_x i} \hat{b}'_{\mathbf{k}} \hat{g}'_{\mathbf{k}} + e^{-ak_x i} \hat{y}'_{\mathbf{k}} \hat{r}'_{\mathbf{k}}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} (e^{2ak_x i} \hat{r}'_{\mathbf{k}} \hat{y}'_{\mathbf{k}} + \hat{g}'_{\mathbf{k}} \hat{b}'_{\mathbf{k}} + e^{2ak_x i} \hat{b}'_{\mathbf{k}} \hat{g}'_{\mathbf{k}} + \hat{y}'_{\mathbf{k}} \hat{r}'_{\mathbf{k}} + \hat{r}'_{\mathbf{k}} \hat{y}'_{\mathbf{k}} + e^{-2ak_x i} \hat{g}'_{\mathbf{k}} \hat{b}'_{\mathbf{k}} + \hat{b}'_{\mathbf{k}} \hat{g}'_{\mathbf{k}} + e^{-2ak_x i} \hat{y}'_{\mathbf{k}} \hat{r}'_{\mathbf{k}}) \\
&= \sum_{n_x, n_y} (\hat{r}'_{n_x, n_y} \hat{y}'_{n_x+1, n_y} + \hat{g}'_{n_x, n_y} \hat{b}'_{n_x, n_y} + \hat{b}'_{n_x, n_y} \hat{g}'_{n_x+1, n_y} + \hat{y}'_{n_x, n_y} \hat{r}'_{n_x, n_y} + \\
&+ \hat{r}'_{n_x, n_y} \hat{y}'_{n_x, n_y} + \hat{g}'_{n_x+1, n_y} \hat{b}'_{n_x, n_y} + \hat{b}'_{n_x, n_y} \hat{g}'_{n_x, n_y} + \hat{y}'_{n_x+1, n_y} \hat{r}'_{n_x, n_y})
\end{aligned} \tag{4.37}$$

Donde hemos utilizado la propiedad (B.1) demostrada en el Apéndice B:

$$\sum_{\mathbf{k}} e^{\pm 2ak_x i} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}} = \sum_{n_x, n_y} \hat{\alpha}_{n_x, n_y} \hat{\beta}_{n_x \pm 1, n_y} = \sum_{n_x, n_y} \hat{\alpha}_{n_x \mp 1, n_y} \hat{\beta}_{n_x, n_y} \tag{4.38}$$

Luego, bajo el cambio de indexación $n = n_x + (n_y - 1)N_x$, donde $n = 1$ corresponde con la celda a la esquina superior izquierda de la red, tenemos:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mathbf{k}} (e^{ak_x i} + e^{-ak_x i}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} (\sigma_1 \otimes \mathbb{1}) \hat{\Phi}'_{\mathbf{k}} = \sum_n (\hat{r}'_n \hat{y}'_{n+1} + \hat{g}'_n \hat{b}'_n + \hat{b}'_n \hat{g}'_{n+1} + \hat{y}'_n \hat{r}'_n + \hat{r}'_n \hat{y}'_n + \hat{g}'_{n+1} \hat{b}'_n + \hat{b}'_n \hat{g}'_n + \hat{y}'_{n+1} \hat{r}'_n) \\
&= \begin{bmatrix} \hat{g}'_1 \\ \hat{r}'_1 \\ \hat{b}'_1 \\ \hat{y}'_1 \\ \hat{g}'_2 \\ \hat{r}'_2 \\ \hat{b}'_2 \\ \hat{y}'_2 \\ \vdots \end{bmatrix}^{\dagger} \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{4 \times 4} & \sigma_1 \otimes \mathbb{1} & \mathbf{0}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} & \cdots \\ \sigma_1 \otimes \mathbb{1} & \mathbf{0}_{4 \times 4} & \sigma_1 \otimes \mathbb{1} & \mathbf{0}_{4 \times 4} & \cdots \\ \mathbf{0}_{4 \times 4} & \sigma_1 \otimes \mathbb{1} & \mathbf{0}_{4 \times 4} & \sigma_1 \otimes \mathbb{1} & \cdots \\ \mathbf{0}_{4 \times 4} & \mathbf{0}_{4 \times 4} & \sigma_1 \otimes \mathbb{1} & \mathbf{0}_{4 \times 4} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{g}'_1 \\ \hat{r}'_1 \\ \hat{b}'_1 \\ \hat{y}'_1 \\ \hat{g}'_2 \\ \hat{r}'_2 \\ \hat{b}'_2 \\ \hat{y}'_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \\
&\equiv \hat{\Phi}'_{\mathbf{r}} [\mathbf{CX2D} \otimes (\sigma_1 \otimes \mathbb{1})] \hat{\Phi}'_{\mathbf{r}}
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Donde hemos denominados **CX2D** a la matriz:

$$\mathbf{CX2D} = \mathbb{1}_{N_y \times N_y} \otimes \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}}_{N_x \times N_x} \quad (4.40)$$

Como el procedimiento para el resto de términos será homologo procedemos a escribir directamente el Hamiltoniano en el espacio real:

$$\hat{H} = \hat{\Phi}_r^\dagger \mathbb{H}_r \hat{\Phi}_r \quad (4.41)$$

Con:

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_r = & \frac{t+\tau}{2} \mathbf{CX2D} \otimes [\sigma_1 \otimes \mathbb{1}] + \frac{t-\tau}{2i} \mathbf{SX2D} \otimes [\sigma_2 \otimes \sigma_3] \\ & + \frac{t+\tau}{2} \mathbf{CY2D} \otimes [\sigma_1 \otimes \sigma_1] + \frac{t-\tau}{2i} \mathbf{SY2D} \otimes [\sigma_1 \otimes \sigma_2] \end{aligned} \quad (4.42)$$

Donde:

$$\mathbf{SX2D} = \mathbb{1}_{N_y \times N_y} \otimes \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}}_{N_x \times N_x} \quad (4.43)$$

$$\mathbf{CY2D} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}}_{N_y \times N_y} \otimes \mathbb{1}_{N_x \times N_x} \quad (4.44)$$

$$\mathbf{SY2D} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}}_{N_y \times N_y} \otimes \mathbb{1}_{N_x \times N_x} \quad (4.45)$$

Corresponden a matrices $N \times N$ para N el numero de celdas. A estas matrices las llamaremos *Matrices paternas* ya que describen las conexiones posibles entre las celdas de la red (Ver Apéndice C). Poder entender esto ayudará a poder introducir dislocaciones al sistema más adelante.

Teniendo la forma (4.42) para el Hamiltoniano, basta especificar N_x, N_y (número de celdas a lo largo del eje x e y respectivamente) para poder determinar $N = N_x N_y$ y, en consecuencia, la longitud de las matrices. Definido el número de celdas, basta diagonalizar \mathbb{H}_r escrito en la forma (4.42) para obtener el espectro de energía (valores propios) y las funciones de onda correspondientes (vectores propios).

4.3.1. Resultados numéricos

Sea \mathbb{H}_r construida a partir de una red cuadrada ($N_x = N_y$) de 40×40 celdas unitarias (6400 sitios) y $\tau = 1$ y $t = 0,5$ (de modo que la energía este en unidades de τ), se proceden a ordenar los valores propios en forma creciente para obtener el espectro de energías 4.8.

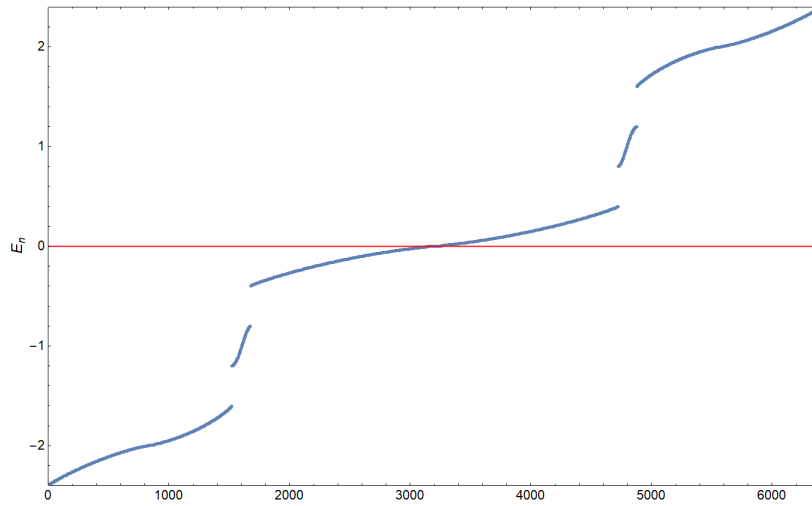


FIGURA 4.8: Energías propias de \mathbb{H}_r ordenadas en forma creciente. Se puede verificar numéricamente que las ramas separadas del continuo de estados corresponden a estados topológicos de borde que solo aparecen cuando $\tau > t$.

Lo primero que podemos ver es que, debido a la simetría quiral, el espectro de energías es simétrico con respecto a la energía cero. Esto ya que para cada estado con energía E existe un compañero quiral con energía $-E$. Dentro de los estados del espectro encontraremos en su mayoría estados de bulto así como ciertos estados de borde, sin embargo tornaremos nuestra atención a un conjunto acotado de estados que se encuentran dentro de la colección de estados con energía cero.

Procedemos entonces a graficar la función de onda de la red señalando la probabilidad asociada a cada celda unitaria. En la figura 4.9 podemos ver un par de estados localizados en las esquinas encontrados en el conjunto de soluciones de energía cero. Junto a estos se encontraron variados estados de bulto así como estados parcialmente localizados como el ilustrado en 4.10. Encontrar estados parcialmente localizados hace cuestionar si aquellos estados que parecen encontrarse completamente localizados son en realidad BICs o simplemente resonancias. Para poder determinar esto es necesario hacer un estudio de las simetrías que podrían dar origen a estos estados. En la siguiente sección veremos que, dentro del conjunto de estados localizados en las esquinas, pueden existir tanto BICs como resonancias.

4.4. Simetría de los estados localizados en las esquinas

Para este punto hemos evidenciado numéricamente la existencia de estados localizados con energía cero en las esquinas de la red cuadrada. También hemos visto que hay estados parcialmente localizados o que, en otras palabras, son hibridaciones entre estados localizados y estados de bulto. Vale preguntarse entonces si son todos estados localizados son realmente BICs o en realidad son resonancias que, producto de su acoplamiento con estados de bulto, no permanecen localizados en el tiempo o ante la existencia de perturbaciones. Veremos que la respuesta es que existe un conjunto de estados localizados que forman un subespacio ortogonal al resto de $\Xi_{E=0}$ de modo que conforman BICs incapaces de mezclarse con estados de bulto. Sin embargo también veremos que existen estados localizados que no forman un subespacio ortogonal al subespacio de estados de bulto. Estos últimos no corresponderán a BICs y explican la aparición de estados como el visto en la figura 4.10.

Para poder entender la existencia de BICs en este sistema, volveremos a tornar nuestra atención a las representaciones irreducibles que toman los operadores del grupo C_{4v} en los subespacios mencionados anteriormente. Comenzaremos denominando a, b, c, d a las esquinas de la red (superior derecha, inferior izquierda, superior izquierda e inferior izquierda respectivamente) y $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle, |d\rangle$ a los estados de localización correspondientes a cada una; consideraremos a estos cuatro estados como base de todos los posibles estados localizados en las esquinas de modo que podemos escribir dichos estados como:

$$|a\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \wedge |b\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \wedge |c\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \wedge |d\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.46)$$

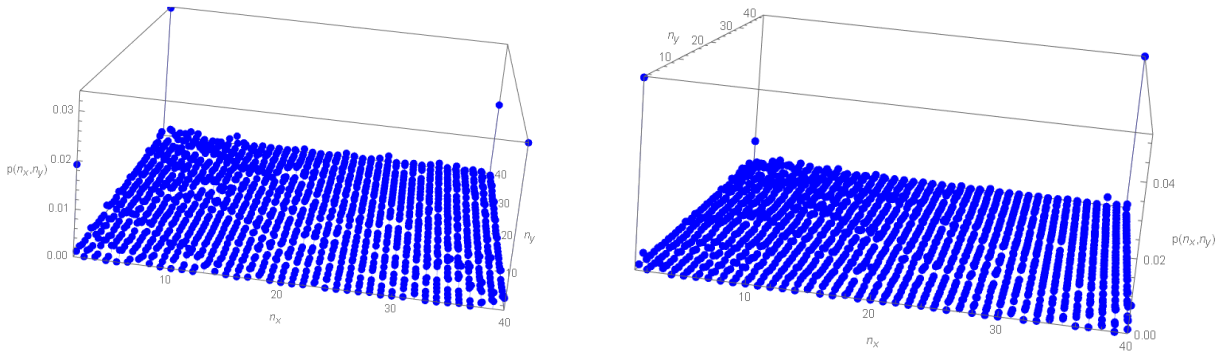


FIGURA 4.9: Estados localizados a energía cero con localización bien definida en las esquinas de la red.

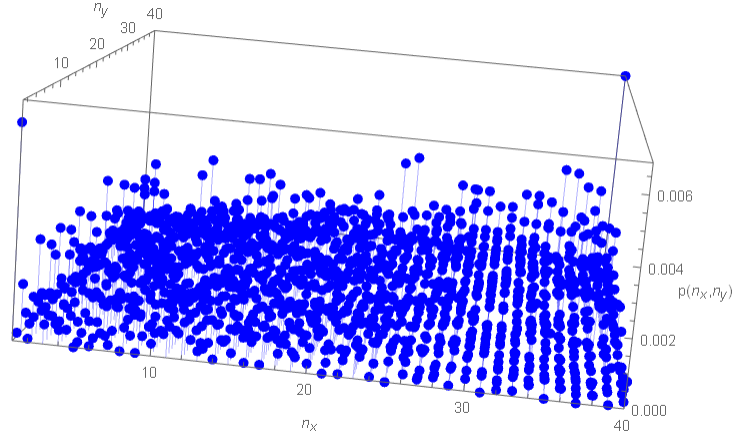


FIGURA 4.10: Estado de bulto a energía cero con parcial localización en dos de las esquinas del sistema. Debido a esta hibridación con estados propagantes, la parcial localización existente solo puede corresponder a una resonancia.

Bajo esta representación podemos escribir el efecto que tiene la operación \hat{C}_4 de la siguiente manera:

$$\hat{C}_4 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \wedge \hat{C}_4 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \wedge \hat{C}_4 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \wedge \hat{C}_4 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.47)$$

Teniendo esto en cuenta, procedamos a identificar tres subespacios del conjunto de estados localizados que a través de suma directa generan dicho conjunto. Veremos que en estos espacios el grupo C_{4v} toma distintas representaciones irreducibles por lo que evidenciará la posible ortogonalidad (o carencia de esta) entre estos espacios y el resto de $\Xi_{E=0}$.

Espacio Λ_1 :

Llamaremos Λ_1 al espacio unidimensional generado por el estado:

$$|\Lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

Utilizando (4.47) se verifica que:

$$\hat{C}_4 |\Lambda_1\rangle = |\Lambda_1\rangle \implies \hat{C}_4 = \mathbb{1} \quad (4.49)$$

Es evidente entonces que:

$$\hat{C}_2 = (\hat{C}_4)^2 = \mathbb{1} \wedge (\hat{C}_4)^3 = \mathbb{1} \quad (4.50)$$

De modo que todos los operadores pueden ser representados por $\mathbb{1}$ en este subespacio. Esto significa que C_4 tiene representación irreducible A_1 en Λ_1 . Habitualmente esta representación

es escrita en forma escalar ya que el espacio Λ_1 y \mathbb{R} son isomorfos, por lo que el estado $|\Lambda_1\rangle$ puede ser representado escalarmente por la unidad:

$$|\Lambda_1\rangle = 1 \quad (4.51)$$

De manera en que C_4 queda representado por la operación:

$$\hat{C}_4 : x \rightarrow x \quad / \quad x \in \mathbb{C} \quad (4.52)$$

Espacio Λ_2 :

Llamaremos Λ_2 al espacio unidimensional generado por el estado:

$$|\Lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.53)$$

Volvemos a utilizar (4.47) para esta vez encontrar que:

$$\hat{C}_4 |\Lambda_2\rangle = -|\Lambda_2\rangle \implies \hat{C}_4 = -\mathbb{1} \quad (4.54)$$

De igual manera se verifican rápidamente:

$$\hat{C}_2 = (\hat{C}_4)^2 = \mathbb{1} \wedge (\hat{C}_4)^3 = -\mathbb{1} \quad (4.55)$$

Lo que significa que C_4 tiene representación irreducible B_2 en Λ_2 . De la misma manera que el espacio Λ_1 , la representación irreducible B_2 puede ser escrita de forma escalar considerando $|\Lambda_2\rangle$ como la unidad:

$$\hat{C}_4 : x \rightarrow -x \quad (4.56)$$

Espacio Λ_3 :

En este caso, llamaremos Λ_3 al espacio generado por el par de estados:

$$|\Lambda_3^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ i \\ -i \end{bmatrix} \wedge |\Lambda_3^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -i \\ i \end{bmatrix} \quad (4.57)$$

Una vez más utilizamos (4.47) para obtener que el operados \hat{C}_4 satisface:

$$\hat{C}_4 |\Lambda_3^{(1)}\rangle = |\Lambda_3^{(2)}\rangle \wedge \hat{C}_4 |\Lambda_3^{(2)}\rangle = -|\Lambda_3^{(1)}\rangle \quad (4.58)$$

Si esta vez cambiamos la representación de los estados por medio de una nueva elección de base para Λ_3 :

$$|\Lambda_3^{(1)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(|a\rangle - |b\rangle + i|c\rangle - i|d\rangle) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \wedge |\Lambda_3^{(2)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(|a\rangle - |b\rangle - i|c\rangle + i|d\rangle) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.59)$$

Entonces las relaciones en (4.58) pueden ser reescritas:

$$\hat{C}_4 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \wedge \hat{C}_4 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.60)$$

De modo que \hat{C}_4 puede ser escrito en esta base como:

$$\hat{C}_4 = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.61)$$

y en consecuencia:

$$\hat{C}_2 = (\hat{C}_4)^2 = - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \wedge (\hat{C}_4)^3 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.62)$$

De modo que, en el espacio Λ_3 , C_4 toma la representación irreducible bidimensional E del grupo C_{4v} . Finalmente al ser Λ_3 un espacio bidimensional, es isomorfo con \mathbb{C} de modo que la representación E suele ser escrita como hemos enunciado en (4.27).

Debido a que la dimensión de $\Lambda_1 \oplus \Lambda_2 \oplus \Lambda_3$ es igual a la cardinalidad de la base dada por los estados $|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle, |d\rangle$ podemos concluir que $\Lambda_1 \oplus \Lambda_2 \oplus \Lambda_3$ corresponde al espacio de todos los posibles estados localizados en las esquinas. Por otro lado, la existencia de distintas representaciones irreducibles de C_{4v} para los espacios $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$ nos dice que estos espacios son ortogonales entre si. Recordando que todos los estados de bulto forman pares quirales que generan espacios bidimensionales en los cuales \hat{C}_{4v} toma representación irreducible E , entonces tendremos que aquellos estados pertenecientes a Λ_1 y Λ_2 son ortogonales a todos los estados de bulto. En contraste, aquellos estados de Λ_3 pueden hibridarse con estos estados. Concluimos entonces que el espacio $\Lambda_1 \oplus \Lambda_2$ corresponde a un espacio formado por BICs como aquellos observados en 4.9.

4.5. Observaciones experimentales en una red fotónica

En una red formada por moléculas o átomos esperamos que la aparición de BICs se traduzca en la existencia de fraccionalización de carga (la carga existente se distribuye en las esquinas). Sabemos también que el formalismo llevado a cabo debe mantenerse válido para redes fotónicas. En estas se espera que exista concentración de luz en una o más esquinas del cristal. Lo anterior ha sido demostrado experimentalmente por otro estudio llevado a cabo por Benalcazar y Cerjan, en conjunto con M. Jürgensen, S. Mukherjee y M. C. Rechtsman [25]. En este estudio se comparan una red SSH bidimensional fotónica con una red topológicamente trivial ($t \geq \tau$) además de otros análisis sobre dicha red SSH que no cubriremos en este escrito.

En estos experimentos se hace uso de la distancia entre de los sitios dentro de la celda unitaria l_{intra} así como la distancia entre celdas unitarias l_{inter} para generar distintos términos de salto t y τ . También se lleva a cabo una división entre un conjunto de celdas aledañas a la esquina del cristal al cual se le denomino *subsistema*, y el resto del cristal al que se le llamó *ambiente*. La Idea tras esta clasificación es medir la potencia asociada al subsistema P_s así como la potencia asociada al ambiente P_e una vez que la luz es inyectada en una de las esquinas del cristal. De

existir un BIC se espera que al introducir la luz esta permanezca confinada en la esquina y que, por consecuencia, la *potencia fraccional* definida $(P_s - P_e)/(P_s + P_e)$ sea cercana a 1. En el caso contrario, de existir considerable discipación de la luz al ambiente, esta potencia fraccionaria tomará valores cercanos a -1 . Los resultados obtenidos para esta comparación entre redes se pueden ver en 4.11

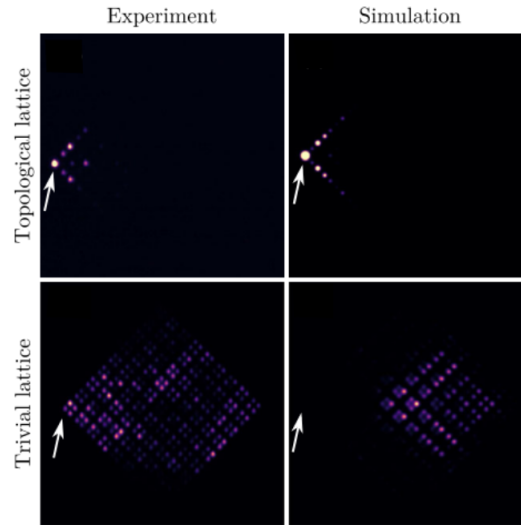


FIGURA 4.11: Comparación entre la Intensidad para una red topológicamente trivial y una SSH al introducir luz de $\lambda = 850[\text{nm}]$ por una esquina (indicada con flecha). Ambas redes son de 9×9 celdas unitarias y cuentan con $l_{inter} = 13[\mu\text{m}]$. Se muestran tanto resultados experimentales como de simulación y en ambos observamos la aparición de estados localizados cuando la red es topológicamente no trivial. Las imágenes superiores cuentan con $l_{intra} = 17[\mu\text{m}]$ mientras las inferiores cuentan con $l_{intra} = 9[\mu\text{m}]$.

Dislocaciones

En esta sección procederemos a hacer un breve estudio del comportamiento de la red SSH bidimensional cuadrada cuando esta presenta una dislocación de borde en su interior. Nos interesa introducir una dislocación, ya que esta permite hacer que características de la topología no trivial del cristal se hagan presentes en el bulto del material además de en los bordes. Por otra parte, estados nacidos de dislocaciones se suelen situar en energía cero cuando existe brecha en el bulto [27–29], por lo que a priori esperamos obtener un estado de dislocación (nuevo BIC) en $\Xi_{E=0}$ también cuando en el bulto no existe la brecha. Sin embargo, veremos que este no es el caso y que estos estados no se encontrarán a energía cero, lo que resulta ser un resultado no observado antes para redes sin brecha en su estructura de bandas. Este análisis a la fecha no se ha llevado a cabo en esta red SSH bidimensional y actualmente lo expuesto en este escrito conforma parte de un trabajo en proceso. En lo que concierne al escrito, observamos que los aislantes topológicos de orden superior, esto es con brecha no nula en el bulto, pueden presentar estados ligados a energía no nula en defectos de dislocación dependiendo de los detalles del vector de Burgers y la estructura de banda correspondiente [30].

Para empezar, se entiende como una dislocación de borde a aquella que se logra cuando una semirecta de sitios desde un punto crítico (llamado *centro de dislocación*) es removida. Luego, aquellos sitios previamente ligados a los removidos son conectados entre si, cerrando la brecha y restaurando la simetría de traslación lejos del centro.

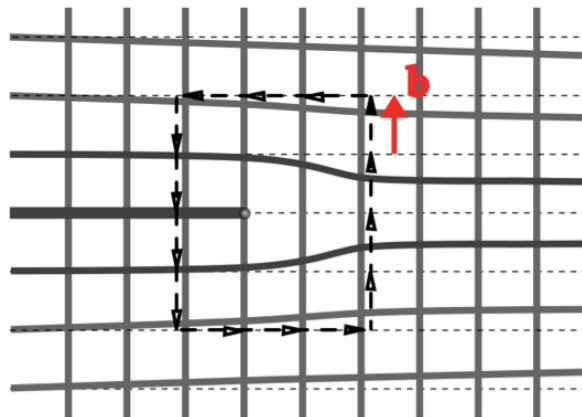


FIGURA 5.1: Red cuadrada con una dislocación de borde. Vemos como el centro de dislocación es rodeado por una trayectoria cerrada. La suma vectorial a lo largo de esta trayectoria es distinta de cero con una diferencia equivalente al vector de Burgers.

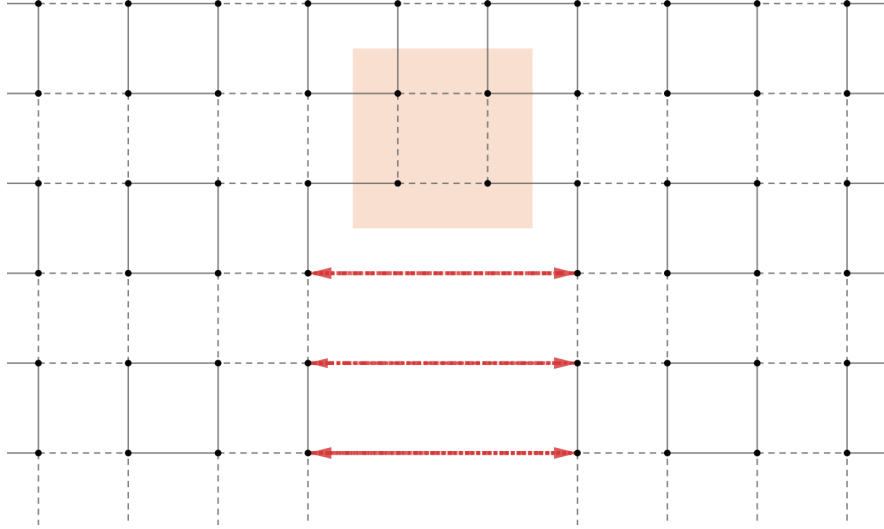


FIGURA 5.2: Ilustración de la dislocación a tratar. El centro de dislocación corresponde a una celda unitaria en el centro de la red. Sitios antes separados por celdas unitarias ahora removidas, son anexados para recuperar la estructura original lejos de la dislocación.

Para poder caracterizar este tipo de dislocaciones topológicamente se introduce el llamado *vector de Burgers*. Este corresponde al vector de traslación faltante para que una suma (o integral) de camino se haga nula una vez llevada a cabo la dislocación (ver figura 5.1). Aunque en las lejanías del centro de dislocación se recupere simetría de traslación, se puede demostrar que las funciones de onda sobre redes con dislocación son discontinuas por una fase a lo largo de la línea de dislocación. Esta fase viene dada por el vector de Burgers:

$$\Psi(x_0^+, y_0^+) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}}\Psi(x_0^-, y_0^-) \quad (5.1)$$

Donde (x_0, y_0) es punto de la línea de discontinuidad y $\Psi(x_0^\pm, y_0^\pm)$ corresponde al límite por los dos distintos lados de la línea de discontinuidad [27, 28]. Si bien un estudio analítico sobre los efectos de la dislocación sobre la red y sus estados se puede llevar a cabo, nos limitaremos a realizar observaciones de resultados numéricos. Para empezar procedemos a construir una matriz como la presentada en (4.42) que considere la existencia de esta discontinuidad en la conexión de los sitios (ver figura 5.2). Para lograr esto se deben modificar las matrices paternas para considerar la irregularidad que existe entre las conexiones de celdas cercanas a la dislocación (Ver la correspondiente discusión en Apéndice C). Una vez tomado esto en cuenta podremos obtener el espectro de energías y las correspondientes distribuciones de probabilidad. En nuestro caso consideraremos una red de 40×41 con una dislocación en su centro (ver figura 5.3). Es necesario aclarar que, si bien esta red no es perfectamente cuadrada en el límite termodinámico se recupera efectivamente la simetría C_{4v} .

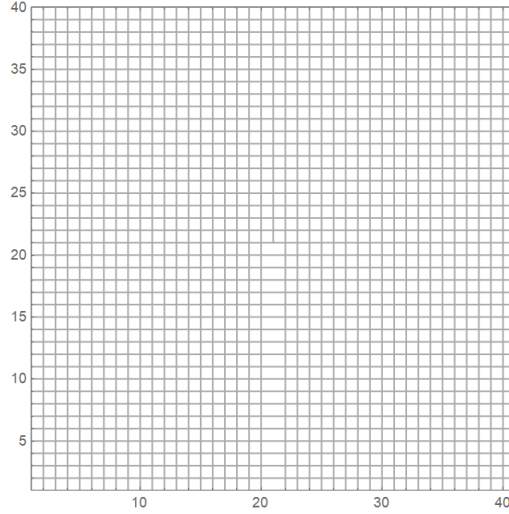


FIGURA 5.3: Red de 40×41 celdas unitarias con un segmento de sitios removido. Los sitios separados son posteriormente juntados para recuperar la estructura periódica lejos de la red.

Como podremos ver en la figura 5.4, en el espectro de energías obtenido aparecen estados aislados del resto del continuo. Resulta que estos estados se corresponden con estados localizados al rededor del centro de dislocación a energía no nula (ver figura 5.5). Esta es la primera observación remarcable ya que no es de esperar que estados de este tipo se encuentren a energía finita cuando no existe brecha en la estructura de bandas. Otra observación recae en que estos estados aparezcan aislados del continuo y aparezcan entre el espectro de estados de bulto y estados de borde. Esto evidencia una correspondencia entre el borde y el defecto asociado a la pequeña abertura que ocurre en el centro de dislocación.

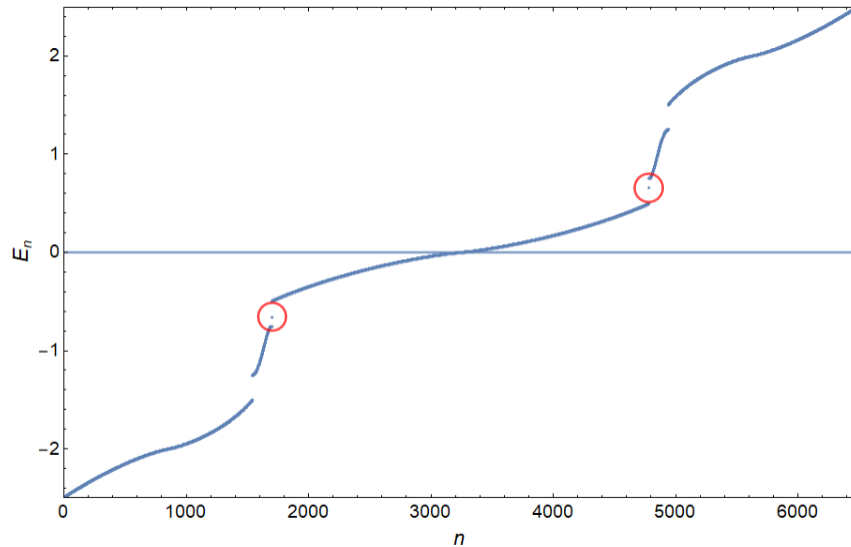


FIGURA 5.4: Espectro de energía para la red con dislocación. A diferencia del espectro sin dislocación, vemos la aparición de estados aislados (encerrados con rojo).

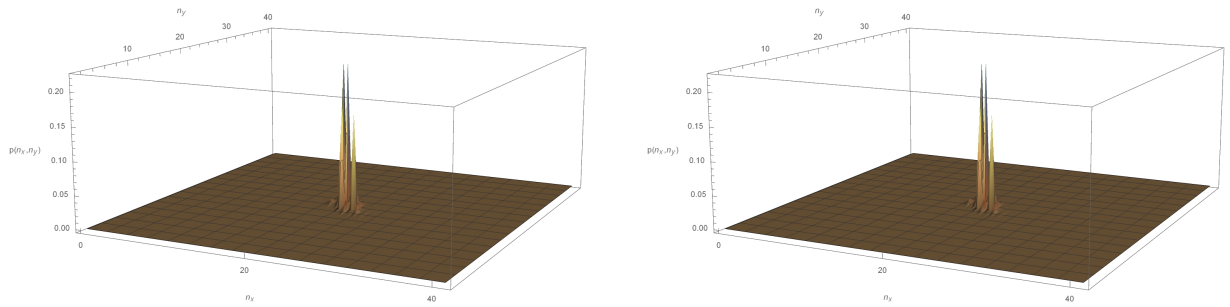


FIGURA 5.5: *Estados de dislocación. Vemos como ambos se encuentran localizados en el centro de la red donde la dislocación se origina.*

En cuanto a los estados localizados en las esquinas refiere, podemos ver en la figura 5.6 que siguen presentes, lo que es de esperar ya que la dislocación conserva efectivamente la simetría C_{4v} . Sin embargo, aunque continúen siendo estados localizados, estos BICs podrían en principio combinarse con los estados de dislocación ya que estos últimos, al corresponder a un par quiral de estados de borde constituyen individualmente espacios unidimensionales con representación irreducible de C_{4v} unidimensional (al igual que los BICs). Sin embargo, la lejanía espacial entre la localización de los estados (Bulto y borde) hace que los estados sean difíciles de excitar simultáneamente de modo que posible hibridación se vuelve despreciable.

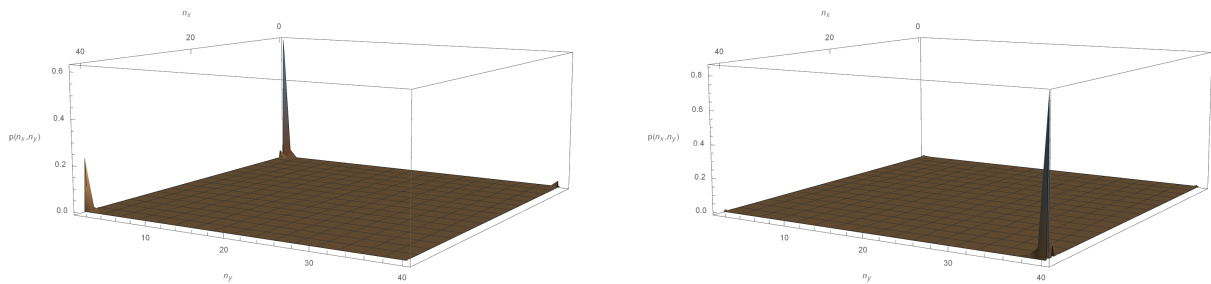


FIGURA 5.6: *Estados de esquina en la red con dislocación.*

Conclusiones

En este escrito hemos hecho una revisión general de ciertos conceptos esenciales para nuestro objetivo como lo son los BICs y el formalismo de enlace fuerte. Hemos visto que este último puede extender su uso a redes fotónicas y posiblemente a otros sistemas que tengan una similar estructura matemática. Gracias a esto pudimos justificar la validez del modelo para redes SSH bidimensionales las cuales conforman un importante y reciente objeto de estudio. Luego, observamos también que sus propiedades son destacables debido a su topología no trivial originada de sus simetrías. A su vez, vimos que estas se traducen en la existencia de BICs en el conjunto de estados de energía cero para redes cuadradas. Por otro lado, hemos discutido que existen observaciones en redes fotónicas de estos estados y visto que cuando la topología es trivial se pierden estos estados. Finalmente hemos discutido el concepto de dislocación de borde y lo hemos aplicado a través de cálculos numéricos a nuestro modelo. Esto tuvo como consecuencia la aparición de estados localizados en el centro de dislocación a energía no nula para una banda sin brecha en el bulto, lo que conforma un resultado novedoso. Por otra parte, vimos que los estados localizados en las esquinas se conservan a pesar de existir el defecto de dislocación.

Teniendo lo observado en cuenta, podemos llegar a la conclusión de que hay mucho trabajo por delante y muchas aristas desde las cuales estos temas pueden transformarse en futura investigación. En primer lugar podríamos preguntarnos qué otros sistemas pueden verse descritos bajo un modelo de enlace fuerte. Podemos preguntarnos también qué estados de borde emergen en una red SSH tridimensional. Otra opción es poder reproducir de forma experimental estos estados por medio de la creación de metamateriales sólidos, materiales topoeléctricos, acústicos, etc. Un campo que queda abierto a raíz de estos resultados es el de las dislocaciones en redes que carezcan de Brecha en el bulto pero presenten topología no trivial ya que, como hemos visto, podemos encontrar estados localizados a energía no nula. Varias proyecciones se pueden llevar a cabo en base a lo estudiado en este texto, lo que evidencia la complejidad del estudio de la topología no trivial de redes las cuales son sujetas a la pérdida de periodicidad de alguna u otra manera.

Notas sobre cambio de índices por transformaciones de operadores

En esta sección procederemos a demostrar que la transformación (4.28) se corresponde con un cambio de indexación en el espacio real. Sabemos que para un operador asociado al color α se cumple que la propiedad (4.5). La forma inversa de esta propiedad es de la forma:

$$\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n_x, n_y} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} \hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger \quad (\text{A.1})$$

Donde n_x, n_y indexan números de celdas. Utilizando la transformación (4.28) se tiene:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}'^\dagger e^{-\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha} i} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n_x, n_y} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{n_x, n_y}} \hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger \\ \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}'^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n_x, n_y} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_{n_x, n_y} + \boldsymbol{\alpha})} \hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Es acá donde definimos el vector:

$$\mathbf{r}_{l_x+1, l_y+1} := \mathbf{r}_{n_x, n_y} + \boldsymbol{\alpha} = \underbrace{a(2n_x + \alpha_x)}_{l_x+1} \mathbf{e}_x + \underbrace{a(2n_y + \alpha_y)}_{l_y+1} \mathbf{e}_y = a(l_x \mathbf{e}_x + l_y \mathbf{e}_y) + a(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \quad (\text{A.3})$$

Bajo esta nueva indexación es necesario tener presente que, debido a la forma de la base (4.1):

$$\alpha_x = 0, 1 \wedge \alpha_y = 0, 1 \quad (\text{A.4})$$

Para los distintos vectores de la base. Notemos que los índices l_x, l_y no indexan celdas si no sitios de la red. Esto se evidencia al ver que los limites superiores de los índices corresponden al número de sitios en los ejes correspondientes:

$$\begin{aligned} 1 \leq n_x \leq N_x &\implies 1 \leq l_x \leq 2N_x \\ 1 \leq n_y \leq N_y &\implies 1 \leq l_y \leq 2N_y \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

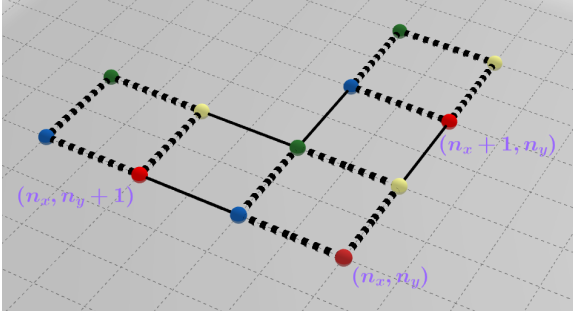


FIGURA A.1: Ilustración de la indexación (n_x, n_y) .

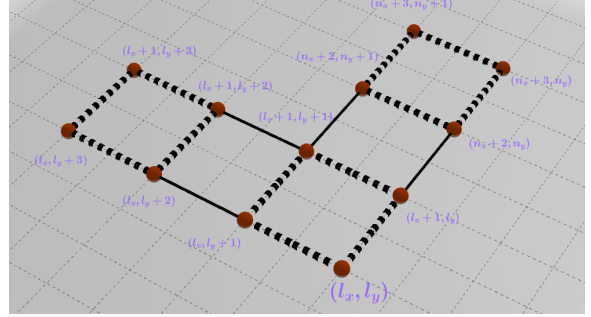


FIGURA A.2: Ilustración de la indexación (l_x, l_y) .

De esta manera, los operadores asociados a distintos colores pueden quedar descritos por un operador genérico mientras los índices satisfagan:

$$\begin{aligned}
\hat{\gamma}_{n_x, n_y} &= \hat{c}_{l_x, l_y} \Big/ (l_x = 2n_x - 1, l_y = 2n_y - 1) = (\text{impar}, \text{impar}) \\
e^{a(k_x + k_y)} \hat{g}_{n_x, n_y} &= \hat{c}_{l_x, l_y} \Big/ (l_x = 2n_x, l_y = 2n_y) = (\text{par}, \text{par}) \\
e^{ak_y} \hat{b}_{n_x, n_y} &= \hat{c}_{l_x, l_y} \Big/ (l_x = 2n_x - 1, l_y = 2n_y) = (\text{impar}, \text{par}) \\
e^{ak_x} \hat{y}_{n_x, n_y} &= \hat{c}_{l_x, l_y} \Big/ (l_x = 2n_x, l_y = 2n_y - 1) = (\text{par}, \text{impar})
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Donde las fases que multiplican los operadores aparecen de reemplazar (A.3) en (A.2). Regresando a esta última ecuación habremos quedado con la forma:

$$\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l_x}^{2N_x} \sum_{l_y}^{2N_y} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{l_x, l_y}} \hat{c}_{l_x, l_y}^\dagger \Big/ \mathbf{r}_{l_x, l_y} := a(l_x \mathbf{e}_x + l_y \mathbf{e}_y) \tag{A.7}$$

Donde en este caso los distintos l_x, l_y de la suma deben satisfacer las condiciones correspondientes al color α establecidas en (A.6).

Propiedad matemática (4.38)

La propiedad a demostrar corresponde a una inversión de los procedimientos llevados a cabo entre la ecuaciones (4.5) y (4.11).

$$\boxed{\sum_{\mathbf{k}} e^{\pm 2ak_x i} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}} = \sum_{n_x, n_y} \hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{\beta}_{n_x \pm 1, n_y} = \sum_{n_x, n_y} \hat{\alpha}_{n_x \mp 1, n_y}^\dagger \hat{\beta}_{n_x, n_y}} \quad (\text{B.1})$$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} e^{\pm 2ak_x i} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k}} e^{\pm 2ak_x i} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} e^{2ai(\mathbf{n}-\mathbf{n}') \cdot \mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}'} \quad / \quad \mathbf{n} := \begin{bmatrix} n_x \\ n_y \end{bmatrix} \\ &= \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \sum_{k_y} \sum_{k_x} e^{2ai(n_x \pm 1 - n'_x)} e^{2ai(n_y - n'_y)k_y} \hat{\alpha}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}'} \\ &= \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \underbrace{\sum_{k_y} e^{2ai(n_y - n'_y)k_y}}_{\delta_{n_y, n'_y}} \underbrace{\sum_{k_x} e^{2ai(n_x \pm 1 - n'_x)k_x}}_{\delta_{n_x \pm 1, n'_x} = \delta_{n_x, n'_x \mp 1}} \hat{\alpha}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}'} \\ &= \sum_{n_x, n_y} \hat{\alpha}_{n_x, n_y}^\dagger \hat{\beta}_{n_x \pm 1, n_y} = \sum_{n_x, n_y} \hat{\alpha}_{n_x \mp 1, n_y}^\dagger \hat{\beta}_{n_x, n_y} \end{aligned}$$

El caso para k_y y n_y es homologo.

Interpretación de las *Matrices paternas*

En esta sección se pretende entregar una breve pero visual interpretación tras la estructura y de las matrices **CX2D**, **SX2D**, **CY2D** y **SY2D** introducidas en la construcción de (4.42). Es fácil ver que en (4.42) las matrices conformadas por productos Kronecker entre matrices de Pauli se heredan de las conexiones existentes entre sitios dentro y fuera de la celda unitaria y son heredados directamente de la forma (4.35). Sin embargo, al hacer la transición al espacio real vemos que aparecen estas matrices paternas.

En primer lugar, notemos que la similitud entre el par de matrices **CX2D** y **SX2D** no es coincidencia y se debe a que estas matrices son originadas por el desarrollo de los términos que contienen la componente del vector de onda en el eje x ($\cos(ak_x)$ y $\sin(ak_x)$, ver (4.34) y (4.36)). Por otra parte, el que una de las matrices sea simétrica y la otra antisimétrica es heredado directamente de la simetría del coseno y antisimetría del seno (ver descomposición del seno y del coseno en números complejos en (4.36)). Lo mismo es verdad para el par **CY2D** y **SY2D** pero esta vez con la componente y del vector de onda.

Veamos el ejemplo de una red $N_x = 3$ y $N_y = 4$. La matriz **CX2D** escrita explícitamente se puede ver en la figura C.1 así como la matriz **CY2D** en la figura C.2. Cada columna y/o fila de una matriz corresponde a una celda unitaria. La existencia de términos no nulos en alguna entrada en particular se traduce en que existe un término mixto en el Hamiltoniano que involucra a los operadores creación y destrucción correspondientes a la fila y columna asociada a esta. Por esta razón veremos que todas las matrices tienen solo ceros en su diagonal.

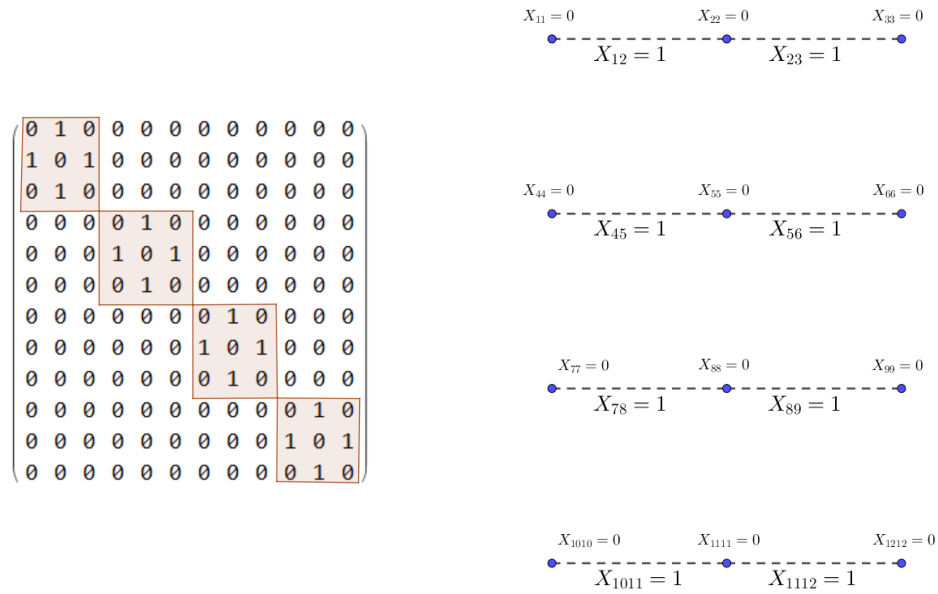


FIGURA C.1: Ilustración de una matriz **CX2D** con X_{ij} sus elementos, y a su lado una ilustración sobre las distintas conexiones a lo largo del eje x (líneas punteadas) que pueden existir entre celdas vecinas (Puntos). Notemos que cada uno de los términos en cada cuadrante café marcado en la matriz se corresponde con las conexiones existentes a lo largo de una fila.

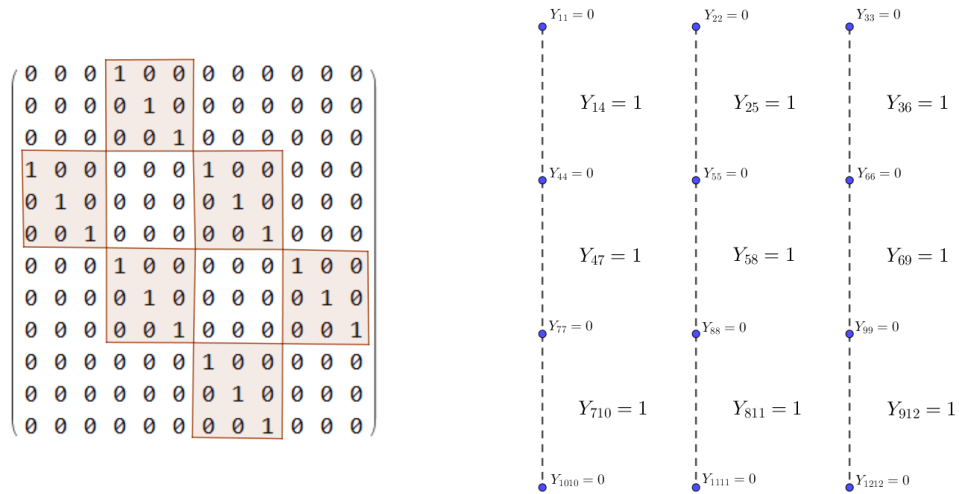


FIGURA C.2: Ilustración de una matriz **CY2D** con Y_{ij} sus elementos, y a su lado una ilustración sobre las distintas conexiones a lo largo del eje y (líneas punteadas) que pueden existir entre celdas vecinas (Puntos). Al igual que el caso modtrado en C.1, cada uno de los términos en cada cuadrante café marcado en la matriz se corresponde con las conexiones existentes, esta vez a medida que descendemos por cada columna.

Implementación de dislocaciones

Para poder crear matrices paternas que consideren la existencia de dislocaciones, se tendrá que tomar en cuenta que existe un cambio en el número de celdas y vecinos cercanos a medida que nos movemos por la red. Esto se traduce en la pérdida de regularidad en los bloques que componen las matrices ya que bloques en la diagonal previos a la dislocación son compuestos por arreglos de $(N_x - 1) \times (N_x - 1)$ mientras que posteriores a la dislocación se tendrán bloques de $N_x \times N_x$. Un ejemplo es el ilustrado en las figuras C.3 y C.4 en las que se ilustra una red de $N = 20$ celdas unitarias y en que, previo a la dislocación se tienen filas de 4 sitios, mientras que posteriormente se tienen filas de 5. En el caso de las columnas, podemos ver que previo a la dislocación tenemos, mientras que al llegar al centro de la columna es removida lo que se traduce en que los bloques asociados a la columna de dislocación dejen de ser cuadrados.

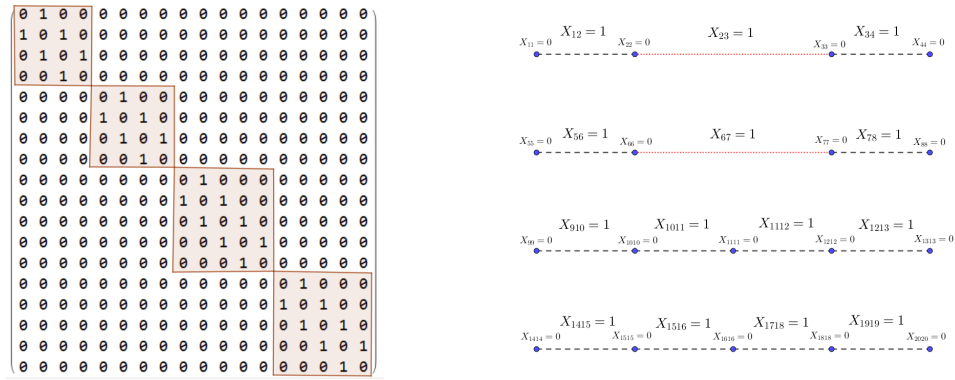


FIGURA C.3: Ilustración de una matriz paterna construida a base de **CX2D** la cual toma en cuenta la existencia de una dislocación en la parte superior de una red con $N = 20$.

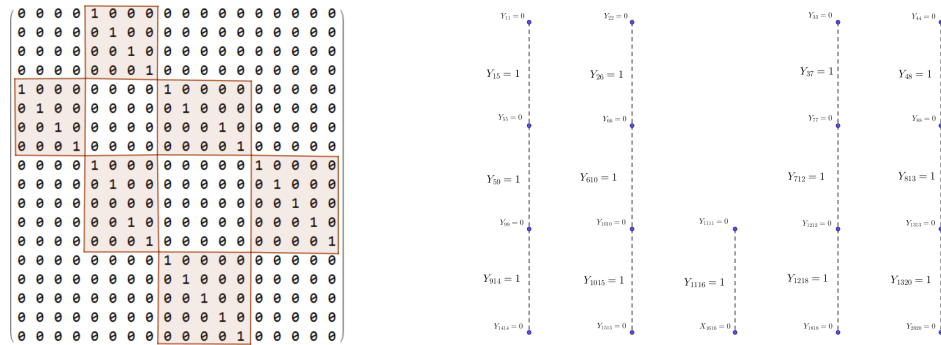


FIGURA C.4: Matriz paterna construida a base de **CY2D** para la misma red considerada en C.3.

Bibliografía

- [1] K. V. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance insulators. *Physical Review Letters*, 45(6):494–497, 1980. DOI: [10.1103/PhysRevLett.45.494](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.494).
- [2] F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015–2018, Oct 1988. doi: [10.1103/PhysRevLett.61.2015](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2015). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2015>.
- [3] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49:405–408, Aug 1982. doi: [10.1103/PhysRevLett.49.405](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.49.405). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.405>.
- [4] C. L. Kane and E. J. Mele. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95:146802, Sep 2005. doi: [10.1103/PhysRevLett.95.146802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.146802). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.146802>.
- [5] Liang Fu. Topological crystalline insulators. *Phys. Rev. Lett.*, 106:106802, Mar 2011. doi: [10.1103/PhysRevLett.106.106802](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.106802). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.106802>.
- [6] Robert-Jan Slager, Andrej Mesaros, Vladimir Juričić, and Jan Zaanen. The space group classification of topological band-insulators. *Nature Physics*, 9(2):98–102, Feb 2013. ISSN 1745-2481. doi: [10.1038/nphys2513](https://doi.org/10.1038/nphys2513).
- [7] Jorrit Kruthoff, Jan de Boer, Jasper van Wezel, Charles L. Kane, and Robert-Jan Slager. Topological classification of crystalline insulators through band structure combinatorics. *Phys. Rev. X*, 7:041069, Dec 2017. doi: [10.1103/PhysRevX.7.041069](https://doi.org/10.1103/PhysRevX.7.041069). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.7.041069>.
- [8] Tiantian Zhang, Yi Jiang, Zhida Song, He Huang, Yuqing He, Zhong Fang, Hongming Weng, and Chen Fang. Catalogue of topological electronic materials. *Nature*, 566(7745): 475–479, Feb 2019. ISSN 1476-4687. doi: [10.1038/s41586-019-0944-6](https://doi.org/10.1038/s41586-019-0944-6). URL <https://doi.org/10.1038/s41586-019-0944-6>.
- [9] M. G. Vergniory, L. Elcoro, Claudia Felser, Nicolas Regnault, B. Andrei Bernevig, and Zhijun Wang. A complete catalogue of high-quality topological materials. *Nature*, 566

- (7745):480–485, Feb 2019. ISSN 1476-4687. doi: 10.1038/s41586-019-0954-4. URL <https://doi.org/10.1038/s41586-019-0954-4>.
- [10] Feng Tang, Hoi Chun Po, Ashvin Vishwanath, and Xiangang Wan. Comprehensive search for topological materials using symmetry indicators. *Nature*, 566(7745):486–489, Feb 2019. ISSN 1476-4687. doi: 10.1038/s41586-019-0937-5. URL <https://doi.org/10.1038/s41586-019-0937-5>.
- [11] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. A topological dirac insulator in a quantum spin hall phase. *Nature*, 452(7190):970–974, Apr 2008. doi: 10.1038/nature06843. URL <https://doi.org/10.1038/nature06843>.
- [12] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface. *Nature Physics*, 5(6):398–402, Jun 2009. ISSN 1745-2481. doi: 10.1038/nphys1274. URL <https://doi.org/10.1038/nphys1274>.
- [13] Y. L. Chen, J. G. Analytis, J.-H. Chu, Z. K. Liu, S.-K. Mo, X. L. Qi, H. J. Zhang, D. H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z.-X. Shen. Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi_2Te_3 . *Science*, 325(5937):178–181, 2009. doi: 10.1126/science.1173034. URL <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1173034>.
- [14] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, 314(5806):1757–1761, 2006. doi: 10.1126/science.1133734. URL <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1133734>.
- [15] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science*, 318(5851):766–770, 2007. doi: 10.1126/science.1148047. URL <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1148047>.
- [16] Wladimir A. Benalcazar and Alexander Cerjan. Bound states in the continuum of higher-order topological insulators. *Phys. Rev. B*, 101:161116, Apr 2020. doi: 10.1103/PhysRevB.101.161116. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.161116>.
- [17] Chia Wei Hsu, Bo Zhen, A. Douglas Stone, John D. Joannopoulos, and Soljačić. Bound states in the continuum. *Nature Reviews Materials*, 16048, Jul 2016. URL <https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.48>.
- [18] J. von Neumann and E. P. Wigner. *Über merkwürdige diskrete Eigenwerte*, pages 291–293. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1993. ISBN 978-3-662-02781-3. doi: 10.1007/978-3-662-02781-3_19. URL https://doi.org/10.1007/978-3-662-02781-3_19.
- [19] Ilya Deriy, Ivan Toftul, Mihail Petrov, and Andrey Bogdanov. Bound states in the continuum in compact acoustic resonators. *Phys. Rev. Lett.*, 128:084301, Feb 2022. doi: 10.1103/PhysRevLett.128.084301. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.128.084301>.

-
- [20] W.P.Lima, F.R.V. Araújo, D.R.da Costa, S.H.R.Sena, and J.M.Pereira Jr. Tight-binding model in first and second quantization for band structure calculations. *Brazilian Journal of Physics*, 52:42, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13538-021-01027-x>.
- [21] Michael P. Marder. *Condensed Matter Physics, Segunda edición*.
- [22] S. Robinson and R. Nakkeeran. *Photonic Crystal Ring Resonator Based Optical Filters*. 2013. <https://www.intechopen.com/chapters/42048>.
- [23] Yang Chen, Xiaoman Chen, Xifeng Ren, Ming Gong, and Guang can Guo. Tight-binding model in optical waveguides: Design principle and transferability for simulation of complex photonics networks. *Physical Review A*, 104, 023501, 2021. DOI: [10.1103/PhysRevA.104.023501](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.104.023501).
- [24] Monika A. M. Marte and Stig Stenholm. Paraxial light and atom optics: The optical schroödinger equation and beyond. *Physical Review A*, 56, 2940, 1997. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.56.2940>.
- [25] Alexander Cerjan, Marius Jürgensen, Wladimir A. Benalcazar, Seabrat Mukherjee, , and Mikael C. Rechtsman. Observation of a higher-order topological bound state in the continuum. *Physical Review Letters*, 125, 213901, 2020. DOI:[10.1103/PhysRevLett.125.213901](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.213901).
- [26] Sachin Vaidya, Wladimir A. Benalcazar, Alexander Cerjan, and Mikael C. Rechtsman. Point-defect-localized bound states in the continuum in photonic crystals and structured fibers. *Phys. Rev. Lett.*, 127:023605, Jul 2021. doi: 10.1103/PhysRevLett.127.023605. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.127.023605>.
- [27] Ying Ran, Yi Zhang, and Ashvin Vishwanath. One-dimensional topologically protected modes in topological insulators with lattice dislocations. *Nature Physics*, 5(4):298–303, Apr 2009.
- [28] Vladimir Juričić, Andrej Mesaros, Robert-Jan Slager, and Jan Zaanen. Universal probes of two-dimensional topological insulators: Dislocation and π flux. *Phys. Rev. Lett.*, 108:106403, Mar 2012. doi: 10.1103/PhysRevLett.108.106403. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.106403>.
- [29] Robert-Jan Slager, Andrej Mesaros, Vladimir Juričić, and Jan Zaanen. Interplay between electronic topology and crystal symmetry: Dislocation-line modes in topological band insulators. *Phys. Rev. B*, 90:241403, Dec 2014. doi: 10.1103/PhysRevB.90.241403. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.241403>.
- [30] Bitan Roy and Vladimir Juričić. Dislocation as a bulk probe of higher-order topological insulators. *Phys. Rev. Res.*, 3:033107, Jul 2021. doi: 10.1103/PhysRevResearch.3.033107. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.3.033107>.