

Nuevos estados topológicos en heteroestructuras basadas en aisladores topológicos

Tesis
entregada a la
Universidad de Chile
en cumplimiento parcial de los requisitos
para optar al grado de
Doctor en Ciencias con mención en Física
Facultad de Ciencias

por

José Daniel Mella Riquelme

Agosto, 2019

Directores de Tesis: **Dr. Francisco Muñoz Sáez**

FACULTAD DE CIENCIAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

INFORME DE APROBACIÓN
TESIS DE DOCTORADO

Se informa a la Escuela de Postgrado de la Facultad de Ciencias que la Tesis de Doctorado presentada por el candidato

José Daniel Mella Riquelme

ha sido aprobada por la Comisión de Evaluación de la Tesis como requisito para optar al grado de Doctor en Ciencias con mención en Física, en el examen de Defensa de Tesis rendido el día 21 de agosto de 2019.

Directores de Tesis

Dr. Francisco Muñoz

Comisión de Evaluación de la Tesis

Dr. Luis Foa

Dra. Carolina Parra

Dr. Carlos Cardenas

A mi familia.

BIOGRAFÍA



Nací en Santiago el 15 de octubre de 1992, cursé mi educación básica en el colegio Los Bosquinos, Maipú, para luego entrar al liceo politécnico Hannover, estudiando la carrera de telecomunicaciones. Luego de la práctica me di cuenta que lo mio no estaba ahí, así que siguiendo lo que me gustaba decidí estudiar Licenciatura en Ciencias con Mención en Física en la Universidad de Chile en 2011. Los próximos años fueron difíciles, pero muy gratificantes con respecto al aprendizaje, aunque a veces existía desconfianza, siempre se lograba salir adelante.

En el año 2015 entré al programa de Doctorado en la misma facultad, comencé a estudiar aisladores topológicos, junto al profesor Francisco Muñoz. Un área relativamente nueva que trae consigo muchas propiedades y aplicaciones muy interesantes y poco intuitivas. A medida que pasaba el tiempo el encanto por esta área crecía y en estos momentos creo que es un nicho que me gustaría seguir desarrollando durante mucho tiempo más.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a la beca CONICYT N°21151207 por haberme entregado financiamiento para la realización de mis estudios de doctorado y a otros proyectos que me permitieron asistir a congresos y estadías cortas en el extranjero, como el proyecto FONDECYT No. 1191353 y el centro para el desarrollo de la nanociencia y la nanotecnología (CEDENNA) y a la infraestructura de supercómputo del NLHPC (ECM-02).

Agradezco especialmente a mi tutor de tesis, el profesor Francisco Muñoz, que mediante su guía, consejos en todos los ambitos y su infinita paciencia a la hora de responder dudas, ayudó de una gran manera a que esta tesis se realizara.

Agradezco a mi madre y a mi padre, que gracias a todo su sacrificio y apoyo incondicional, pude desarrollarme académica y personalmente sin problemas.

Agradezco a mi pareja, Lisa Morales, por su tiempo y apoyo en el desarrollo de la tesis, por aguantarme en mis tiempos de estrés y por toda la ayuda que me brinda en la vida.

Agradezco a todos mis compañeros de la universidad, por escucharme en las prácticas de la defensa de tesis. Agradecimientos especiales a Cesar Jara, Maricarmen Castro y Jaime Clark, con los que llevamos más de 9 años compartiendo el mismo amor y sufrimiento a la ciencia.

Índice

1	Una breve introducción a los aisladores topológicos	1
1.1	Del efecto Hall a la materia topológica	1
1.2	Invariantes topológicos	6
1.3	Evidencia experimental.	7
1.4	Prefacio	10
2	El modelo de Su, Schrieffer y Heeger (SSH)	11
2.1	El modelo de Hückel del poliacetileno	12
2.2	Estados de borde	15
2.3	Simetría Quiral	20
2.4	Bulto	23
3	Una súper red bipartita del modelo SSH	28
3.1	Paredes de dominio y condiciones de borde	28
3.2	Una red periódica de paredes de dominio	31
3.2.1	paredes de dominio periódicas equi-spaceadas	31
3.2.2	Nuevos estados topológicos y una súper red bipartita	33
3.3	Desorden en el modelo BDW	37
4	El modelo de Bernevig, Hughes y Zhang (BHZ)	44

4.1	Aisladores topológicos y el Merón	45
4.2	Modelo BHZ: bulto	48
4.3	Modelo BHZ: superficie	54
4.4	Estados de borde del modelo BHZ	58
5	Un nuevo modelo: BHZ-SSH	63
5.1	Paredes de dominio	63
5.2	Interacción entre estados de borde	66
5.3	Red bipartita a partir de modelo BHZ	68
5.4	Desorden en modelo BHZ-SSH	73
5.4.1	Desorden en el número de capas	73
5.4.2	Impurezas magnético	74

RESUMEN

Los aisladores topológicos a grandes rasgos son aisladores en el bulto y presentan estados de borde metálicos que están protegidos por alguna simetría del sistema, mediciones ARPES han logrado detectar estos estados, mientras que en experimentos de transporte, estos estados son empañados por una contribución debido a los defectos e impurezas del bulto.

El objetivo de esta tesis es proponer un modelo teórico, que sea capaz de entregar una mayor robustez a los estados de superficies de los aisladores topológicos. Para este fin, usaremos una geometría de heteroestructuras o super-redes, ya que dada la gran experiencia experimental en el crecimiento de este tipo de sistema, su realización experimental es factible.

Debido el vertiginoso avance del área de los aisladores topológicos, comenzaremos con una breve reseña histórica de el surgimiento de este tipo de materiales (capítulo 1), para luego explicar la física subyacente de los aisladores topológicos en uno de los modelos de aislador topológico mas sencillos, el modelo SSH (capítulo 2) y un modelo mas interesante, el modelo BHZ (capítulo 4), este último fue comprobado experimentalmente. Luego, pasaremos a implementar la estrategia de super-redes para generar nuevos estados de borde topológicamente protegidos, que tienen como base el modelo SSH (capítulo 3) y el modelo BHZ (capítulo 5).

En esta tesis, mediante el método *tight-binding* y los modelos sencillos anteriormente mencionados, logramos diseñar exitosamente nuevos estados de borde topológicos, los que son mucho más resistentes al desorden atómico que sus estructuras base (SSH o BHZ), incluso cuando este desorden destruye la simetría que permite la existencia del orden topológico.

Capítulo 1

Una breve introducción a los aisladores topológicos

La física de la materia condensada se ocupa del comportamiento de las partículas a densidad finita y a bajas temperaturas, donde, dependiendo de factores como la presión aplicada, el dopaje, el espín de las partículas, etc., la materia puede reorganizarse en diferentes fases. Una fase descubierta en los años 70 es la fase topológica, los materiales que la presentan son aislantes en el bulto y presentan una superficie conductora protegida por alguna simetría del sistema [1, 2]. Esa propiedad es muy atractiva para realizar transmisiones de alta movilidad y no disipativas. A continuación mencionaremos un poco de los hitos relevantes que dieron origen a los aisladores topológicos y alguna de sus propiedades (Sección 1.1), luego explicaremos que son los ‘invariantes topológicos’ (Sección 1.2) y mencionaremos algunas técnicas experimentales para la medición de sus propiedades (Sección 1.3).

1.1 Del efecto Hall a la materia topológica

A diferencia de las transiciones topológicas, las transiciones de fase convencionales, como cuando el agua se convierte en hielo, no pueden suceder en dos dimensiones

debido a que el teorema de Mermin y Wagner las prohíbe [3]. Sin embargo, existía evidencia experimental de que algún cambio abrupto podía ocurrir en dos dimensiones, por ejemplo, ciertas láminas de fluido exhibían super-fluidéz por debajo de una temperatura crítica. [4]

En el año 1972, Kosterlitz y Thouless, propusieron un nuevo tipo de transición de fase, basada en la formación de vórtices en una lámina magnética [5]. Estos vórtices, pueden surgir a partir de los espines atómicos, los cuales se orientan circularmente formando un patrón en forma de tornado. Un objeto que también está relacionado es el anti-vórtice: cuando el anti-vórtice se une a un vórtice, ambos se cancelan, dejando a los espines alineados en una sola dirección. Para altas temperaturas, existen una gran cantidad de vórtices y anti-vórtices, lo que implica una distribución de espín desordenada. Por otro lado, a bajas temperaturas los vórtices se ordenan con los anti-vórtices, lo que resulta en un alineamiento de espines a un cierto ángulo. A este alineamiento se le llamo *orden topológico*. Esta transición fue llamada transición Kosterlitz-Thouless (TK) y explica la aparición de superfluidéz y superconductividad en dos dimensiones. [5]

En el año 1980 se descubre un extraño fenómeno, cuando un de gas de electrones bidimensional es sujeto a fuertes campos magnéticos, la conductividad de Hall presentaba saltos discretos proporcionales a e^2/h [6], que contradecía lo esperado (efecto Hall clásico, crecimiento continuo con las variaciones de campo). Aún mas intrigante, fue encontrar que este fenómeno era robusto frente a la presencia de defectos o impurezas. Este efecto fue nombrado efecto Hall cuántico.

Para explicar este extraño efecto, Thouless, Kohmoto, Nightingale y den Nijs (TKNN) [7] dejan de lado la energía del sistema y consideran la función de onda de un gas de electrones bidimensional. Esta función que fué clasificada por un número

llamado invariante topológico, que presenta alguna estabilidad, tal como los vórtices en la transición KT. Demostraron que este invariante topológico tiene que ser un entero y que está directamente relacionado con los *plateau* de la conductancia de Hall y es robusto frente a pequeños cambios en el material (Una demostración análoga de la cuantización de la conductancia puede verse también en [8]).

Para clarificar un poco el concepto de topología, consideraremos distintos cuerpos, como por ejemplo una pelota, una dona y un símbolo infinito (∞). Si ignoramos la forma de estos objetos y solo contabilizamos los agujeros, podemos deformar un poco cada cuerpo manteniendo el número de agujeros. En este caso, la invariante topológica es el número de agujeros y como este número no cambia frente a pequeñas deformaciones de estos objetos, se puede decir que el invariante topológico es robusto frente a deformaciones. Esta misma idea puede extrapolarse al efecto Hall cuántico y explica la robustez frente a pequeñas perturbaciones de la estructura electrónica.

Posteriormente Haldane [9] propuso un modelo teórico de una red hexagonal (red similar a un panal de abeja, un importante material que posee esta estructura es el grafeno), frente a un campo magnético periódico que localmente rompe simetría de inversión temporal, manteniendo un campo magnético nulo globalmente. Se muestra que este estado del grafeno presenta el efecto Hall cuántico con conductividad $\sigma_{xy} = e^2/h$.

Luego del descubrimiento experimental del grafeno [10], Kane y Meele, en el año 2005 [11], basados en el modelo propuesto por Haldane [9], propusieron sustituir el campo magnético periódico por una interacción intrínseca que tiene cada elemento y que no destruye la simetría de inversión temporal, la interacción spin-órbita (SOC). Al igual que el campo magnético en el modelo de Haldane, el acoplamiento spin-órbita abre un *band-gap* en la lámina de grafeno, provocando la aparición de estados

de borde metálicos topológicamente protegidos. La implicancia fenomenológica de preservar la simetría de inversión temporal es la aparición de dos conductividades de Hall cuántico, una para cada dirección del spin, pero con sentido opuesto (en el espacio real), lo que significa que la corriente de Hall total es nula (esta es la razón por lo que es necesario romper la simetría de inversión temporal para observar el efecto Hall cuántico). A este efecto se le puede asociar una conductividad de espín proporcional a $\sigma_{xy}^s = e/2\pi$, muy similar al efecto Hall cuántico. A esta propiedad se le denomina efecto Hall de espín cuántico (QSHE). Dada la presencia de la simetría de inversión temporal, estos estados son robustos debido al teorema de Kramers (ambos estados son pares de Kramers y deben estar degenerados) y fueron llamados helicoidales [12]. A los materiales que presentan QSHE se les denomina aisladores topológicos \mathbb{Z}_2 .

Debido a que la interacción SOC de los átomos de carbono es muy pequeña [13,14], al integrarla a un modelo de grafeno produce un *band-gap* del orden de 10^{-4} meV, lo que lo hace frágil ante cualquier pequeña perturbación, como por ejemplo la temperatura, presentando muchas dificultades a la hora de su realización experimental. Sin embargo, con la idea de que el espín-órbita abre un *band-gap* (provocando una transición de fase topológica), se encuentra un mecanismo a la hora de buscar materiales que presenten QSHE, ya que basta con considerar elementos mas pesados. En el año 2006, Bernevig, Hughes y Zhang (BHZ) proponen un modelo de bajas energías de un sistema formado por la estructura tipo sándwich CdTe/HgTe/CdTe [15]. Dependiendo de la cantidad de capas de HgTe, la heteroestructura puede presentar QSHE, es decir, presenta una fase topológicamente no trivial y una fase aisladora común. Otros modelos del tipo *tight-binding*, confirman la aparición de estados topológicos helicoidales en los bordes del pozo de potencial de HgTe [16]. A diferencia del modelo

Kane y Mele, el modelo de BHZ da pie a una posible realización experimental, la que fue realizada por König *et al* al medir el transporte de carga a muy bajas temperaturas, logrando observar evidencias de los estados de borde metálicos originados por QSHE [17]. Posteriormente los estados metálicos localizados en los bordes fueron descritos analíticamente para una geometría cuadrada en bordes cuadrados [18, 19] y terminaciones como la zig-zag [19]. Otros sistemas que presentan efecto hall de espín cuántico pueden encontrarse en [20].

En general, el efecto Hall cuántico de espín se da en dos dimensiones, trabajos posteriores muestran generalizaciones a más dimensiones. En la literatura comienza a emplearse el término aislador topológico \mathbb{Z}_2 [21], para sistemas análogos en tres dimensiones. A diferencia de lo que ocurre en dos dimensiones, en tres dimensiones los invariantes topológicos son cuatro [22, 23] y están asociados a la presencia de estados conductores en la superficie [24]. De estas cuatro invariantes topológicas $(\nu_0; \nu_1\nu_2\nu_3)$, se definen aisladores topológicos débiles a aquellos asociados a los números (ν_1, ν_2, ν_3) , dado que son débiles frente al desorden, esto ocurre, por ejemplo, al apilar un arreglo de materiales 2D que presentan QSHE. En cambio, los materiales llamados aisladores topológicos fuertes, asociados al número topológico ν_0 , son robustos y presentan estados de borde metálicos. Estos estados metálicos tienen la forma de conos de Dirac en el espacio de *momentum* 2D, lo que en el espacio real corresponde a un gas de electrones libres en una superficie de un material 3D. Diferentes aisladores topológicos fueron predichos teóricamente como el $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, el HgTe con tensión y el $\alpha\text{-Sn}$ [25]. El primer aislador topológico 3D reportado fue la aleación $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ [26] seguido de reportes teóricos del semiconductor Bi_2Se_3 [27, 28] y su realización experimental [27].

1.2 Invariantes topológicos

En general, la fase topológica puede ser descrita por un invariante topológico, diferenciando un aislador topológico a un aislador común. Thouless, Kohmoto, Nightingale y den Nijs (TKNN, [7]), que mediante la formula de Kubo logran identificar una invariante topológica para el efecto hall cuántico llamado entero TKNN ($n \in \mathbb{N}$), obteniendo una conductividad de Hall cuantizada de $\sigma_{xy} = ne^2/h$. Por otro lado, el año 1984 Berry demuestra la existencia de una fase cuántica de origen puramente geométrico cuando el estado cuántico depende de parámetros cíclicos [29], la fase geométrica adquirida en un ciclo de evolución de los parámetros es una realización física de la llamada ‘invariante de Chern’ asociada a la topología de un sistema. En el caso de un sólido, las funciones de onda son funciones de Blöch, $|u_m(\vec{k})\rangle$, las que tienen como parámetro periódico al quasi-momentum \vec{k} . Sobre estas funciones se define una fase de Berry (similar a un potencial vector) $A_m = i \langle u_m | \nabla_k | u_m \rangle$ y un flujo de Berry $F_m = \nabla \times A_m$ (análogo a un campo magnético), encontrando una invariante o número de Chern n_m que depende del flujo total de Berry en toda la zona de Brillouin. Este número tiene la misma forma que el invariante TKNN n y además es poco sensitivo a cambios pequeños en el Hamiltoniano, lo que ayuda a explicar por que la cuantización de la conductividad σ_{xy} es robusta. De una manera más simple, un número topológico distinto de cero está relacionado con el número de vórtices en la zona Brillouin asociada a las funciones de onda de Blöch. Una consecuencia de que un material tenga un número topológico distinto de cero es la presencia de estados de borde metálicos [30]. Por ejemplo, si tenemos una interfaz entre un aislador común ($n_m = 0$) y un aislador que presenta efecto Hall cuántico ($n_m = 1$), se presenta una discontinuidad en la interfaz. Como n_m , en caso de existir, solo puede tomar valores

enteros, en la transición (interfaz) este valor debe indefinirse, que es lo que ocurre en una banda de Blöch metálica. Este efecto también explica la aparición de solitones en una cadena de poliacetileno [31].

El descubrimiento del efecto Hall cuántico de espín trajo consigo un nuevo número topológico, llamado el índice topológico \mathbb{Z}_2 [21]. La existencia de la simetría de inversión temporal en estos sistemas es necesaria para que este número este definido y además puede ser generalizado a más de dos dimensiones. El procedimiento general para calcular este número es bastante complejo [21, 32] y rara vez se emplea. Sin embargo, el cálculo de este número n_ν se simplifica cuando los materiales presentan ciertas simetrías, por ejemplo, si un sistema bidimensional conserva su espín perpendicular S_z , entonces las componentes de espín *up* y *down* tienen números de Chern independientes n_\uparrow, n_\downarrow [11], lo que hace que $n_\uparrow + n_\downarrow = 0$, pero $(n_\uparrow - n_\downarrow)/2 = n_\sigma$, tal como se espera de la conductividad de Hall cuántica de espín [33]. Por otro lado, otra simplificación aparece si el sistema posee simetría de inversión [34], ya que se puede calcular el invariante topológico mediante la fórmula $\delta_a = \Pi_m^N \xi_{2m}(\Lambda_a)$, en donde $\xi_{2m}(\Lambda_a)$ es la paridad de cada banda de energía ocupada en cada punto invariante ante simetría de inversión y de inversión temporal en la primera zona de Brillouin (puntos de Kramer).

1.3 Evidencia experimental.

Si bien, el objetivo de esta tesis es una descripción teórica de un nuevo sistema de aislador topológico, es necesario darle un sustento experimental para una posible futura realización y sus posibles problemáticas, como por ejemplo, las mediciones de conductancia, que nuestra propuesta podría ayudar a resolver.

Poco después de que el modelo de Kane y Mele fuera propuesto, el pequeño valor

del acoplamiento espín-órbita en grafeno significó la búsqueda de estos fenómenos y otros similares en materiales con elementos mas pesados (es decir con un acoplamiento espín-órbita mayor). El año 2006 se predijo el efecto Hall cuántico de espín en un sistema experimentalmente factible, tanto en su construcción, así como la medición experimental de las corrientes de Hall. Este sistema era un pozo cuántico de semiconductores formados por CdTe/HgTe/CdTe [15]. Esta vez el acoplamiento espín-órbita era mucho mayor que en el grafeno [35]. Rápidamente, apareció la primera evidencia experimental del efecto Hall cuántico de espín [17], medido a temperaturas cercanas a 30 mK. Posteriormente, luego de la predicción teórica de aisladores topológicos \mathbb{Z}_2 tridimensionales, Hsieh *et al.* reporta la realización experimental del primer aislador topológico 3D en compuestos de $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ [26]. Esta vez, la estructura de bandas de energía se mide directamente mediante la técnica denominada *angle-resolved-photoemission-spectroscopy* (ARPES).

Esta técnica, ARPES, es la herramienta ideal para probar la existencia y características de estados de superficie, y que en consecuencia, determinar si un sistema es un aislador topológico. El funcionamiento de esta técnica se basa en hacer incidir fotones sobre un cristal, eyectando electrones. Mediante el análisis del momentum de los electrones eyectados, se puede determinar la estructura electrónica de la superficie y el bulto del material. Las mediciones de ARPES de alta resolución permiten una separación clara de los estados de superficie y los de bulto, ya que los estados de superficie no se dispersan a lo largo de la dirección perpendicular a la superficie, en cambio en el bulto si lo hacen. Mediciones ARPES del compuesto $\text{Bi}_{0.09}\text{Sb}_{0.91}$ muestran como diferenciar estados de superficie y de bulto [26].

Una importante propiedad de los estados de borde de los aisladores topológicos es la correlación entre el espín y el momentum, que subyace en el fuerte acoplamiento

spín-órbita asociado a la superficie de Fermi. Mediciones de ARPES con resolución de spín pueden ser usadas para encontrar este tipo de efectos [36], evidenciando la fuerte polarización de spín de los estados de superficie topológicamente protegidos. La textura de spín de la superficie de Fermi de estos materiales, muestra que la polarización de spín rota 360° en torno del centro del cono de Dirac [37]. Mediciones de propiedades a diferentes aisladores topológicos mediante ARPES pueden ser encontrados en [27, 38–44].

La técnica de ARPES parece indicar un completo acuerdo entre los experimentos y la teoría. Sin embargo, ese acuerdo no es tan evidente al momento de hacer mediciones de transporte eléctrico en materiales 3D, ya que la contribución a la conductividad asociada a los estados de superficie topológicos es del mismo orden que contribución de los estados de bulto debido a impurezas o defectos. Por otro lado, otras interesantes propiedades predichas en aisladores topológicos, como el efecto magnetoelectrico cuantizado [45, 46] y los fermiones de majorana en la superficie [47] podrían observarse solo si los portadores de carga del bulto son pequeños en comparación a los estados de superficie. Entre las propuestas para mejorar las mediciones de conductividad esta el reemplazar los materiales originales (como los compuestos Bi_2Se_3 y Bi_2Te_3) por otros de mayor resistividad en el bulto (tal como ternario $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ [48]). Otra forma de evitar el problema es el uso de láminas muy delgadas [49, 50] y nanocintas [51], modificando la contribución de bulto en la conductividad al disminuir el espesor de la lámina delgada y la nanocinta. En resumen, este problema ha sido tratado de diferentes maneras [52], pero las contribuciones en la conductividad del bulto y de la superficie varía de material en material. Finalmente, es relevante recordar que las posibles aplicaciones de este tipo de materiales suelen basarse en el transporte eléctrico, no en mediciones de ARPES.

1.4 Prefacio

Aún con una mención a la evidencia experimental de los aisladores topológicos, el trabajo realizado en esta tesis estará enfocado en una descripción teórica de algunos modelos de aisladores topológicos. En el capítulo 2 introduciremos el modelo mas sencillo de aislador topológico que existe, el modelo de Su, Schrieffer y Heeger(SSH), sus estados de borde y la importancia de la simetría quirial que tiene sobre estos. Luego, en el capítulo 3, se construirá una heteroestructura usando los estados de borde y la hibridización que estos poseen cuando la cadena es finita, haciendo emerger nuevos estados de borde topológicamente protegidos. Para acercarnos más a sistemas mas realistas, en el capítulo 4, tomaremos el modelo de Bernevig, Hughes y Zhang (BHZ) de aislador topológico basado en el sistema CdTe/HgTe/CdTe y describiremos sus estados de borde, de bulto y las simetrías relevantes para este sistema, para luego, en el capítulo 5, pasar a la construcción de la misma heteroestructura que en el capítulo 3 pero con la diferencia de que los estados de borde tendrán otra protección topológica. Finalmente se concluirá en el capítulo 5.4.2.

Capítulo 2

El modelo de Su, Schrieffer y Heeger (SSH)

La teoría detrás de los aisladores topológicos \mathbb{Z}_2 no es fácil de introducir, es relativamente reciente y requiere un amplio conocimiento de mecánica cuántica y de física de la materia condensada. Además de la poca abundancia de libros introductorios a la teoría de fases topológicas de la materia. Sin embargo, existe un modelo muy sencillo de un material topológicamente no trivial, protegido por una simetría de la red cristalina. Este modelo es particularmente práctico para introducir la teoría de aisladores topológicos a una audiencia general, como por ejemplo, estudiantes que pudieran llegar a leer esta tesis.

En la Sección 2.1 introduciremos el modelo de poliacetileno en el formalismo de Hückel o *tight-binding*. Luego, en la Sección 2.2 nos enfocaremos en los estados de borde de este modelo. En la Sección 2.3 explicaremos un tipo de simetría particular de este modelo que da origen a una fase topológica. Finalmente, en la Sección 2.4, explicitaremos el invariante topológico asociado al modelo de poliacetileno.

2.1 El modelo de Hückel del poliacetileno

La molécula de poliacetileno es un polímero conjugado simple con formula química $(\text{CH})_{2N}$. Está formado por bloques, alternando grupos -CH- acoplados por un enlace simple, seguido por uno doble, tal como muestra la Figura 1a. A pesar de ser un aislador de un gran *band gap*, el poliacetileno puede ser un buen conductor eléctrico [53]. Para explicar esta conductividad, Su, Schrieffer and Heeger (SSH) introdujeron una muy simple caracterización del poliacetileno mediante el uso de modelos *tight-binding*, en el que se describen fermiones sin espín en una red unidimensional [54]. En el trabajo original, los autores notaron que debido a la secuencia de enlaces simple-doble, se originan solitones (estados localizados en los bordes), responsables de la conductividad del poliacetileno. En los artículos originales de SSH, no se estableció ninguna relación entre estos solitones y topología.

A continuación adaptaremos la formulación de Hückel (análoga a los modelos *tight binding*) para la cadena de poliacetileno, así como una mirada química y física de este sistema.

En el formalismo de Hückel, es usual ignorar los átomos de hidrógeno en los sistemas conjugados, también se considera un solo orbital, ψ_i (un electrón por sitio) por átomo de carbono, este corresponde al orbital p_π . Para interacciones entre primeros vecinos, el Hamiltoniano efectivo mono-electrónico tiene elementos de matriz

$$\alpha = \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle \quad (2.1)$$

$$\beta = \langle \psi_i | H | \psi_{i+1} \rangle \quad (2.2)$$

En donde α corresponde a la energía de sitio del i -ésimo orbital y β el *hopping* o solapamiento entre dos sitios contiguos, es necesario mencionar que si todos los

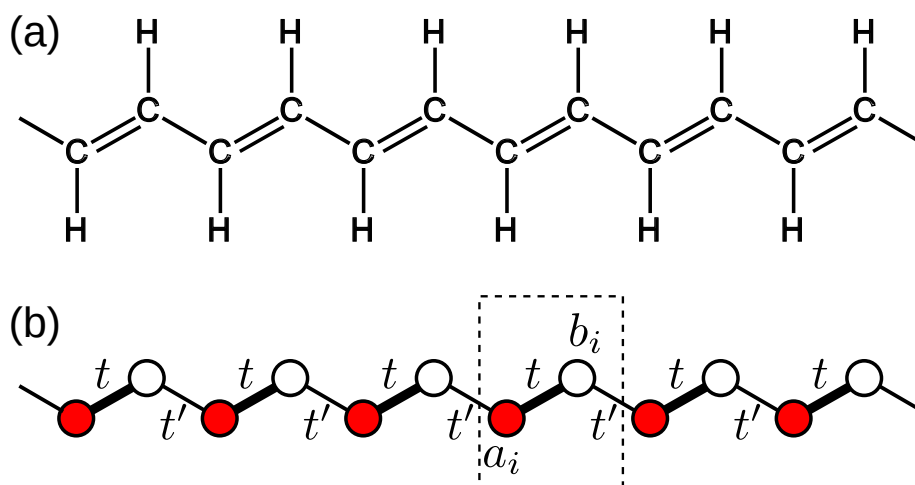


Fig. 1: (a) Representación estructural del poliacetileno. (b) Modelo *tight binding* del poliacetileno, el recuadro contiene una celda de unidad, cada celda de unidad contiene dos átomos idénticos pero inequivalentes (a_i, b_i). El acoplamiento t, t' son para átomos en la misma celda o adyacente, respectivamente. En este caso, t es el enlace doble y t' el enlace simple.

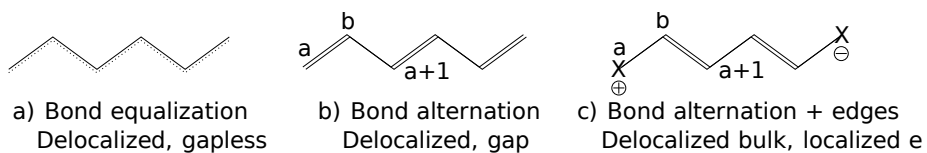


Fig. 2: Representación química de estructuras estables de interés en hexatrieno

sitios de la cadena son iguales, la energía de sitio puede considerarse como cero. Este modelo mínimo provee una buena descripción de moléculas aromáticas, como el benceno, en donde todos los enlaces de la estructura estable son idénticos (fig. 2a). En el caso de nuestro interés, la cadena de poliacetileno, los enlaces alternan (fig. 2b). Para poder describir esta situación, es necesario cambiar la notación, ahora tenemos dos átomos de carbono inequivalentes (pero idénticos) en la i -ésima celda de unidad, que llamaremos a_i, b_i (fig. 1b y fig. 2b), los orbitales asociados a los electrones p_π de estos sitios corresponden a $\psi_{i,a}, \psi_{i,b}$, por lo que las interacciones a primeros vecinos son

$$t = \langle \psi_{i,a} | H | \psi_{i,b} \rangle \quad (2.3)$$

$$t' = \langle \psi_{i,b} | H | \psi_{i+1,a} \rangle \quad (2.4)$$

En donde t, t' representan al enlace doble y simple, respectivamente. Los subíndices a, b dan indicios de la existencia de una simetría extra en el sistema, la llamada simetría quiral, de la que hablaremos más adelante. En efecto, debido a la alternación de los enlaces, la celda de unidad se duplica. Bajo este escenario, podemos observar dos posiciones de carbono inequivalentes: una que tiene un doble enlace a su derecha y otra que lo tiene en su izquierda. Por lo tanto, en la i -ésima celda de unidad hay dos átomos de carbono, etiquetados con a_i, b_i , que constituyen enlaces alternados en el Hamiltoniano de Hückel con orbitales $\psi_{i,a}, \psi_{i,b}$. Empleando la misma notación que en la Figura 1, t representa la interacción entre un enlace doble (interacción entre a_i, b_i), mientras que t' es la interacción entre b_i, a_{i+1} , que representa un enlace simple. Recordemos que hemos ignorado la energía de sitio ($\alpha = 0$). Con esto en mente, el Hamiltoniano de Hückel del poliacetileno puede ser escrito, en la

base $(\dots, \psi_{i,a}, \psi_{i,b}, \dots)$ como

$$H_{SSH} = - \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 & \dots \\ t & 0 & t' & 0 & \dots \\ 0 & t' & 0 & t & \dots \\ 0 & 0 & t & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

Análogamente, en segunda cuantización, el Hamiltoniano puede escribirse como:

$$H_{SSH} = t \sum_{j=0}^{N-1} a_j^\dagger b_j + t' \sum_{j=0}^{N-2} a_{j+1}^\dagger b_j + h.c., \quad (2.6)$$

2.2 Estados de borde

Las soluciones de H_{SSH} , ecn. (2.6), se obtienen directamente al diagonalizarlo. Nuestras condiciones de borde representan una molécula finita (no periódica). Aparecen tres casos de interés, el primero es conocido como el caso normal o trivial, $t > t'$, que corresponde a una típica molécula conjugada. En este régimen, hay un claro *band gap* entre la última banda ocupada (HOMO) y la primera banda desocupada (LUMO). Las funciones de onda del HOMO y LUMO (al igual que todas las otras funciones de onda del sistema) tienen un comportamiento deslocalizado (fig. 3a). En el caso de que el largo de esta cadena tienda a infinito, este *band gap* esta dado por $2|t - t'|$.

Si $t \rightarrow t'$, la distinción entre el orbital simple y el doble desaparece ($t = t'$). Para cadenas muy largas, el sistema se convierte en metálico, ya que el *band gap* se cierra.

El caso más importante y físicamente más profundo se da cuando $t < t'$. Al igual que en el caso $t' < t$, se abre un *band gap* en el sistema pero hay diferencias importantes a considerar. La más notoria es que dos estados aparecen en los bordes,

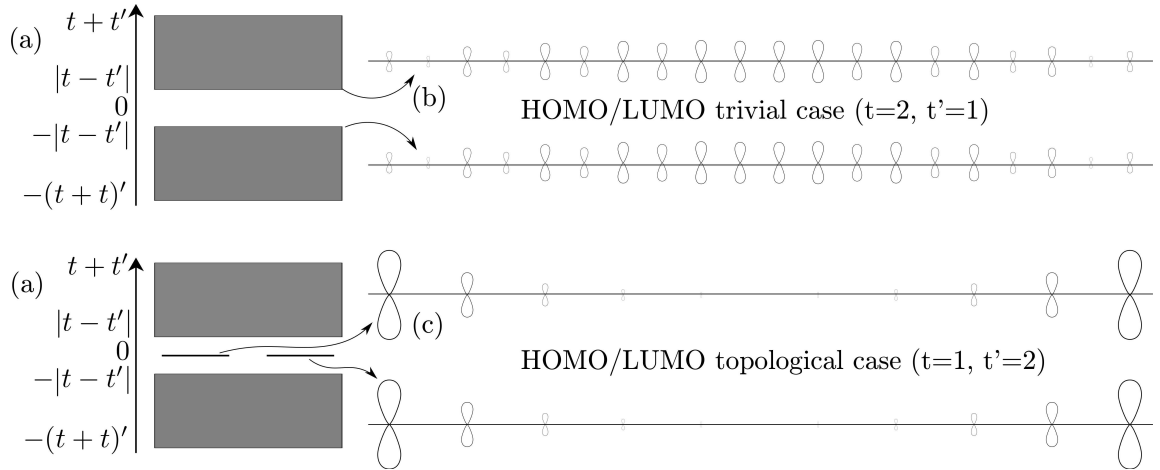


Fig. 3: (a) Esquema de las energías obtenidas de un Hamiltoniano de 20 sitios, la banda de valencia y de conducción están separadas en energía siempre que $t < t'$. En el panel de la derecha se muestra el HOMO y LUMO de este caso. (b) Si $t > t'$ las bandas de valencia y conducción tienen el mismo comportamiento, salvo un par de estados de energía cero. En el panel de la derecha se muestra la función de onda de estos estados de energía cero.

ubicándose en medio del *band gap* y poseyendo energía prácticamente cero. La Figura 3b muestra los orbitales correspondientes, se puede ver que, diferente a los orbitales del resto de la cadena, los dos nuevos estados están localizados en los bordes y penetrarán en el bulto decayendo exponencialmente. Además ellos forman, desde ambos estados de borde, un par *bonding* y *anti-bonding* debido a una pequeña interacción debido al solapamiento de estos estados, ver Figura 4. Aunque es usual ignorar esta interacción residual, esta tesis se centra en considerarla como un nuevo grado de libertad.

Para entender de mejor manera estos peculiares estados de borde, pasaremos a una descripción analítica. Tomaremos una cadena de N celdas de unidad (o bien $2N$ átomos). El Hamiltoniano a emplear es H_{SSH} , ecn. (2.6), además de un vector

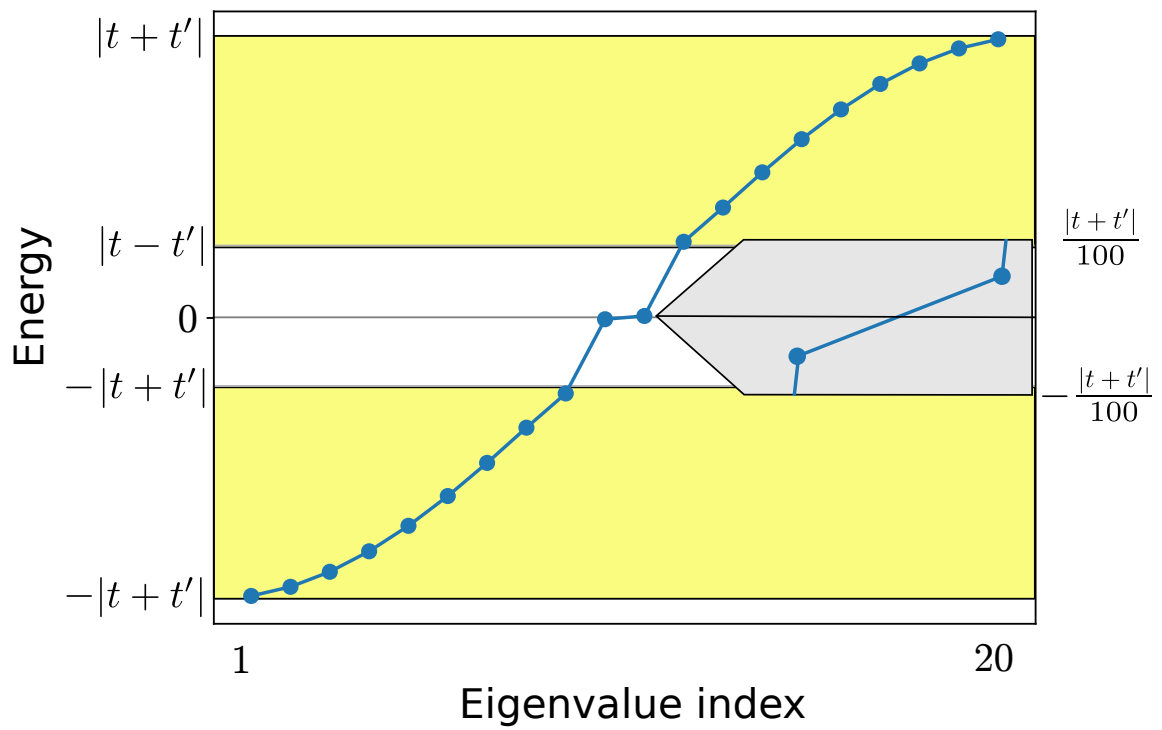


Fig. 4: Niveles de energía y estados de borde para una red bipartita finita en la fase topológica ($t < t'$). $N = 10$ celdas (20 sitios) con $t = 1, t' = \frac{3}{2}$. Un acercamiento a las energías cercanas a cero puede observarse en la parte derecha del recuadro (la escala de esta esta en el borde derecho)

de onda general de la forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_{1,a} \\ \psi_{1,b} \\ \psi_{2,a} \\ \psi_{2,b} \\ \vdots \\ \psi_{N,a} \\ \psi_{N,b} \end{pmatrix}$$

, donde a y b corresponden a los sitios no equivalentes de la cadena SSH. Aplicando este vector al Hamiltoniano, $H\Psi = E\Psi$, obtenemos dos ecuaciones de recurrencia para las funciones de onda de cada sitio

$$t\psi_{j,a} + t'\psi_{j+1,a} = E\psi_{j,b} \quad (2.7)$$

$$t'\psi_{j-1,b} + t\psi_{j,b} = E\psi_{j,a}. \quad (2.8)$$

Para saber si el sistema admite estados de energía cero en sus bordes superficie, supondremos $E = 0$ y tomaremos como condiciones de borde $\psi_{-1,b} = \psi_{N+1,a} = 0$. Es importante mencionar que ambas relaciones de recurrencia dependen solo de un sitio, a o b . Emplearemos un *ansatz* de tal manera que cumpla que la amplitud de la función de onda en los sitios extremos de la izquierda y derecha sea $\psi_{0,a}$ y $\psi_{N,b}$ constantes

$$\psi_{j,a} = \rho_a^j \psi_{0,a} \quad (2.9)$$

$$\psi_{j,b} = \rho_b^j \psi_{0,b}, \quad (2.10)$$

donde $\rho_{a,b}$ son constantes a determinar y están asociados a los sitios a y b .

Reemplazando lo anterior en la relación de recurrencia, ecn. (2.8), y después de un poco de álgebra, obtenemos:

$$\rho_a = -\frac{t}{t'} \quad (2.11)$$

$$\rho_b = -\frac{t'}{t}. \quad (2.12)$$

Al reemplazar (2.12) en (2.10), obtendremos la función de onda para cada sitio.

$$\psi_{j,A} = (-1)^j e^{-j/\xi} \psi_{0,a} \quad (2.13)$$

$$\psi_{j,B} = (-1)^j e^{j/\xi} \psi_{0,b}, \quad (2.14)$$

en donde $\xi = \ln^{-1}(t'/t)$.

Ambas ecuaciones son exponenciales que decaen con una misma constante ξ . Para una referencia futura, la función de onda de los estados de borde en segunda cuantización queda de la forma

$$\begin{aligned} \Psi_L^\dagger &= \alpha \sum_{j=0}^{N-1} (-1)^j e^{-\frac{j}{\xi}} a_j^\dagger \\ \Psi_R^\dagger &= \beta \sum_{j=0}^{N-1} (-1)^j e^{-\frac{N-j}{\xi}} b_j^\dagger \end{aligned} \quad (2.15)$$

Estos estados corresponden a los estados con energía cero del sistema SSH, que decaen exponencialmente. Otro aspecto interesante, es que el estado de la izquierda, Ψ_L , solo tiene componentes en el sitio a y el estado de la derecha, Ψ_R , solo posee amplitud en la sub-red b .

Además, estos estados de borde tienen una característica peculiar: su existencia es independiente de los valores actuales de t y t' (manteniendo $t' > t$). Esta propiedades radica en una simetría particular de la red bipartita, que profundizaremos en la siguiente sección.

2.3 Simetría Quiral

El modelo SSH de poliacetileno muestra estados de borde de energía cero resistentes antes ciertos defectos, desorden, impurezas, etc. La explicación detrás de estas propiedades reside en la red bipartita (alternación de enlaces). El sistema consiste en dos sitios equivalentes por celda de unidad, pero que no están conectados por un vector de red. La red bipartita posee una simetría especial, conocida como simetría *quiral*.

En orden de describir la simetría quiral en el modelo SSH, retornaremos a la matriz Hamiltoniana H_{SSH} mostrada en eq. (2.5). Debido a que el Hamiltoniano es simétrico bajo permutaciones de electrones, se puede hacer un reordenamiento de las etiquetas atómicas, dejando a los orbitales que pertenecen a la sub red a primero que los orbitales pertenecientes a la sub red b . Es decir, la nueva base tendrá el siguiente orden $\Psi = (\psi_{0,a}, \psi_{1,a}, \psi_{2,a} \dots \psi_{N-2,b}, \psi_{N-1,b})$. En consecuencia, la matriz Hamiltoniana quedará diagonal por bloques de la forma

$$H = \begin{pmatrix} 0 & H_{ab} \\ H_{ab}^T & 0 \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

La submatriz H_{ab} contiene todas las interacciones del sistema ya que los términos de la diagonal corresponden a interacciones entre orbitales pertenecientes a la misma sub red, pero $\langle \psi_{i,a} | H | \psi_{j,a} \rangle = \langle \psi_{i,a} | H | \psi_{j,b} \rangle = 0$. El valor exacto de H_{ab} es irrelevante para la discusión posterior.

Definiremos el operador quiral de la forma

$$\Gamma = \begin{pmatrix} I_n & 0 \\ 0 & -I_n \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

En donde I_n es la matriz identidad de $N \times N$. Este operador Γ anti-conmuta con

el Hamiltoniano

$$\{H, \Gamma\} = H\Gamma + \Gamma H = 0 \quad (2.18)$$

Esta relación define a Γ como un operador quirral asociado al modelo SSH. Este operador puede ser escrito con los operadores de proyección sobre cada sub red, P_a y P_b , que satisfacen $P_a + P_b = 1$ y $P_a P_b = 0$. El operador quirral Γ se puede representar en función de estos operadores de proyección:

$$\Gamma = P_a - P_b = \sum_{m=1}^N |m, A\rangle \langle n, A| - \sum_{m=1}^N |m, B\rangle \langle n, B| \quad (2.19)$$

concluyendo que

$$P_{a/b} = \frac{1}{2}(I_{2N} \pm \Gamma) \quad (2.20)$$

El significado físico de Γ esta relacionado con un grado de libertad en la fase de la función de onda. Por ejemplo, si es que cambiamos un signo en la sub red, $\psi'_{i,b} \rightarrow -\psi_{i,b}$, entonces el Hamiltoniano cambia de signo. Por lo que el operador Γ representa un cambio de signo en la energía. Por ejemplo, si Ψ es una solución de la ecuación de Schrodinger para un electrón, $H\Psi = E\Psi$, tiene que existir otra solución con un autovalor opuesto, $-E$,

$$\begin{aligned} H\Gamma |\Psi\rangle &= -\Gamma H |\Psi\rangle \\ &= -\Gamma E |\Psi\rangle \\ &= -E\Gamma |\Psi\rangle, \end{aligned}$$

por lo que, debido a la presencia de una simetría quirral, $\Gamma|\Psi\rangle$ también es un autoestado de H con autovalor $-E$. A los estados Ψ y $\Gamma\Psi$, con energías E y $-E$, respectivamente, se les llama parejas quirales.

Para aterrizar un poco la discusión, veremos un ejemplo muy conocido, la descripción de Hückel para el butadieno, $\text{H}-(\text{CH})_4-\text{H}$. Las energías, E_n y los orbitales moleculares, π_n , de los cuatro estados monoeléctricos están dados por

$$E_1 = +1.6t, \pi_1 = 0.37\psi_1 + 0.6\psi_2 + 0.6\psi_3 + 0.37\psi_4$$

$$E_2 = +0.6t, \pi_2 = 0.6\psi_1 + 0.37\psi_2 - 0.37\psi_3 - 0.6\psi_4$$

$$E_3 = -0.6t, \pi_3 = 0.6\psi_1 - 0.37\psi_2 - 0.37\psi_3 + 0.6\psi_4$$

$$E_4 = -1.6t, \pi_4 = 0.37\psi_1 - 0.6\psi_2 + 0.6\psi_3 - 0.37\psi_4$$

Puede observarse que $E_1 = -E_4$ y $E_2 = -E_3$, ambos casos corresponden a pares quirales. Ellos están relacionados por un cambio de signo en la subred b (ψ_2, ψ_4), que transforma los pares quirales: π_1 en π_4 y π_2 en π_3 .

Cuando $E = 0$, algo especial ocurre con la simetría quirral, en este caso $E = -E$, por lo tanto cada estado en su propia pareja quirral. Además de anticonmutar con H , cuando $E = 0$, Γ trivialmente conmuta con H . Esto implica que los estados de borde están completamente proyectados sobre una de las sub-redes.

Ahora estamos preparados para argumentar la relación entre la simetría quirral y la robustez de los estados de borde en el modelo SSH. En una cadena muy larga, consideremos una solución de H tal que tenga dos estados de borde, uno a cada extremo. Dado que la cadena es muy larga, estos estados no interactúan entre sí y cada uno, por separado, es su propio compañero quirral. Adiabáticamente modifiquemos los parámetros del Hamiltoniano, por ejemplo mediante desorden en los enlaces

t, t' . A pesar del desorden, la energía del estado de borde de la derecha (o izquierda) no puede tener otro valor que cero, ya que la simetría quirál exige que si un estado tiene energía E , es necesario que exista otro con energía $-E$. Pero como el estado con energía $E = 0$ se encuentra solo, la simetría quirál protege a ese estado del desorden.

Siguiendo el argumento anterior, solo existen dos formas que un estado de borde localizado pueda cambiar su energía mediante modificaciones paramétricas del Hamiltoniano. La primera sería deslocalizar los estados de borde, para que puedan formar una pareja quirál entre ellos. Este se logra cuando el sistema se vuelve metálico, $t \rightarrow t'$. La segunda forma de cambiar la energía de un estado de borde protegido por la simetría quirál es, simplemente destruir la simetría quirál. Por ejemplo, al introducir desorden de las energías de sitio, los términos diagonales del Hamiltoniano H hacen que $\{\Gamma, H\} \neq 0$.

2.4 Bulto

La existencia de quiralidad en el modelo SSH encierra la posibilidad de tener diferentes fases, cada una caracterizada por alguna propiedad del sistema y que dentro de los cuales los cambios pueden ocurrir de manera continua. Para visualizar de una mejor manera esta propiedad, observando la molécula de hexatrieno en la figura 2a, podríamos progresivamente estirar el sistema de tal manera que lleguemos a un límite en que $t \rightarrow 0$, formándose tres dímeros. Todos los sistemas que cumplen $t > t'$ corresponden a la misma fase topológica.

El otro caso de interés corresponde a $t < t'$. Por ejemplo la figura 2c, en donde tenemos otra conformación de una red bipartita, en el que si alargamos el enlace simple (reducir t'), terminaríamos con dos dímeros y dos sitios libres en los bordes, que correspondería a la fase topológica. El enlace entre las dos fases ocurre cuando

$t = t'$.

Para una descripción mas formal de estas tres fases, usaremos el Hamiltoniano H_{SSH} , eq. (2.6). Esta vez consideraremos condiciones de borde periódicas $a_0 = a_{N-1}$ y la simetría traslacional de la red cristalina (teorema de Bloch). Tras aplicar la transformada de Fourier para pasar al espacio recíproco, obtenemos un (kernel) Hamiltoniano asociado a H_{SSH} , dependiente del quasi-momentum k ,

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & t + t'e^{-ik} \\ t + t'e^{ik} & 1 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

Una manera más representativa y compacta de escribir este Hamiltoniano se obtiene usando la base de las matrices de Pauli, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$:

$$H(k) = \vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma}, \quad (2.22)$$

donde $\vec{d} = (t + t' \cos(k), t' \sin(k), 0)$. Es importante mencionar que la simetría quiral mostrada en eq. (2.17) es $\Gamma = \sigma_z$ (una de las matrices de Pauli). Diagonalizando obtenemos los estados de energía del bulto

$$E = |\vec{d}| = \pm \sqrt{t^2 + t'^2 + 2tt' \cos(k)} \quad (2.23)$$

El mínimo y máximo de las energías ocurre cuando $k = \pm\pi$, tomando las energías en este punto tenemos $E_{\pm} = \pm|t - t'|$, y el *band gap* es de $\Delta = 2|t - t'|$.

Pero, por qué $t < t'$ posee soluciones llamadas topológicas? La topología es la rama de las matemáticas que estudia el espacio y sus transformaciones continuas. Por ejemplo, una naranja es un cuerpo sin agujeros y se puede proponer una transformación desde una naranja a un plato mediante una transformación continua. Esto

significa que son topológicamente equivalentes y su equivalencia puede ser identificada como el hecho de que ninguno de ellos tiene agujeros. Una dona tiene un agujero, como una taza de café, por lo que son topológicamente equivalentes. Comparando la naranja y la taza de café, la diferencia se encuentra en la cantidad de agujeros que posee, haciendolos topológicamente inequivalentes. Esta equivalencia es representada por un número, que en este caso, es el número de agujeros. El hecho de que existan diferentes números de agujeros, permite la existencia de la clasificación de fases topológicas.

Asociando estos conceptos al modelo SSH, el vector \vec{d} forma un círculo, en el plano xy , de radio t' y centrado a una distancia t del origen. Se puede contar el número de veces que \vec{d} encierra al origen del sistema de coordenadas, a este número, γ , lo llamaremos número de enrollamiento o *winding number*, el cual solo puede tomar valores enteros. Este valor es $\gamma = 0$ cuando $t > t'$ y $\gamma = 1$ cuando $t < t'$ (ver fig. 5). Sin embargo, cuando esta curva pasa sobre el origen, el valor de γ pasa a estar indefinido. Si se hacen variaciones a los valores de t y t' , el *winding number* se mantendría constante, excepto en el caso de $t = t'$, que corresponde a un sistema metálico. Extendiendo los argumentos previos en orden de permitir otros tipos de cambios en el Hamiltoniano (por ejemplo algún acoplamiento entre n-vecinos) el *winding number* se mantendría constante a menos que:

- El sistema se convierta en metálico (\vec{d} toque el origen), que indefina el *winding number*
- La simetría quiral se rompa, por ejemplo un término proporcional a σ_z , haciendo a la curva \vec{d} una curva tridimensional e imposibilitando la definición el número de vueltas alrededor del origen, que en consecuencia significa que no

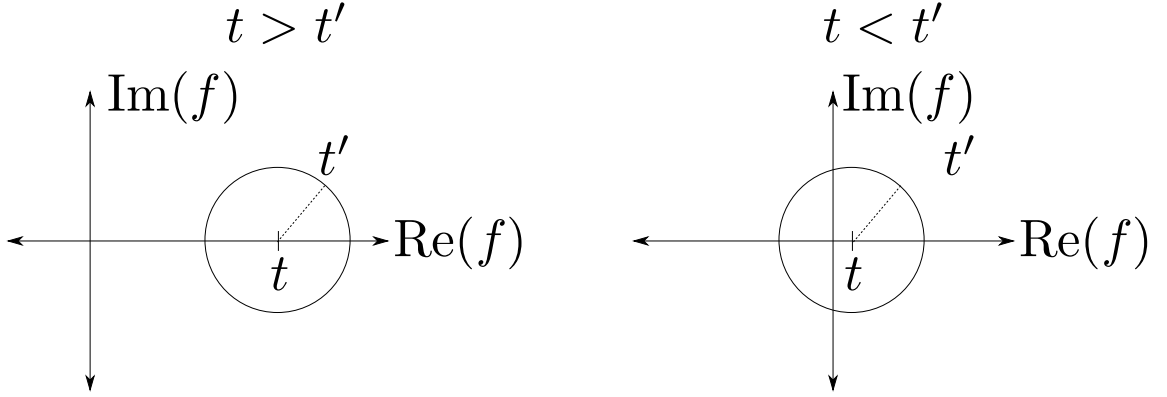


Fig. 5: Curva del vector $\vec{d}(k)$ asociado al Hamiltoniano SSH en el espacio recíproco, los círculos formados por las curvas tienen radio t' y están centrados en t . El panel izquierdo corresponde a una fase aisladora en el que el centro no está encerrado por la curva $\vec{d}(k)$, en cambio el panel derecho muestra una fase topológica en el que se encierra el origen.

se puede definir el *winding number*.

De forma general, el winding number γ , para una banda completamente ocupada, puede ser calculado por

$$\gamma = \frac{1}{2\pi} \oint \left(\hat{d} \times \frac{\partial \hat{d}}{\partial k} \right) \cdot \hat{z}, \quad (2.24)$$

donde $\hat{d} = \frac{\vec{d}}{|\vec{d}|}$. Para un estado electrónico parcialmente ocupado γ esta indefinida. Este número topológico se asocia a una fase de Zak [55], que corresponde a la fase de Berry [29] en el contexto de sólidos unidimensionales.

Hasta ahora hemos sido laxos con la relación entre fases topológicas y estados de borde de energía cero. Desde un punto de vista formal, en el modelo SSH la fase trivial ($\gamma = 0$) y la topológica ($\gamma = 1$) describen la misma física y ninguna de ellas tiene asociada estados de borde por si misma. Los estados de borde topológicamente protegidos ocurren en la interfaz entre dos fases topológicas. Como el invariante

topológico debe cambiar de valor en la interfaz y además sólo puede tomar valores enteros, la única posibilidad es que γ se indefina. Esto suele ocurrir para sistemas metálicos (o de energía $E = 0$ en una dimensión). En general, se habla que los sistemas topológicos *tienen* estados de borde, dado que comúnmente están en interfaz con materiales triviales, tales como el vacío. A la relación entre números topológicos no-triviales y la existencia de estados de borde se le denomina correspondencia bulto-borde (*bulk-boundary correspondence*).

Experimentalmente, en una cadena de poliacetileno, nunca se observa que la cadena esta en la fase topológica, pues es de mayor energía que la trivial. Sin embargo, en la misma cadena se producen defectos en la secuencia de los enlaces simples y dobles, por ejemplo $t - t' - t' - t$. Estos defectos, crean la interfaz entre la fase trivial y topológica, denominandolas paredes de dominio, tema que trataremos en el siguiente capítulo.

Este capítulo dió origen a un *preprint* que puede ser encontrado en [56], en este momento, se encuentra en referato en la revista *chemical communications*.

Capítulo 3

Una súper red bipartita del modelo SSH

Ya teniendo descrito lo fundamental del modelo SSH, sus estados de bulto y de borde, pasaremos a introducir un nuevo modelo, que consiste en N copias interactuantes del modelo SSH, originando un red de paredes de dominio. En la Sección 3.1, expondremos en detalle la física que emerge en las paredes de dominio. Y luego en la Sección 3.2 trataremos el caso de tener redes de paredes de dominio. En particular, si la red de paredes de dominio se dimeriza, en forma de red bipartita, se recupera el comportamiento tipo SSH usando la hibridización de los estados generados por esas paredes de dominio. Naturalmente, este modelo tendrá una fase no trivial asociada a estados de borde. Los efectos del desorden en este nuevo modelo será estudiados en la sección 3.3, demostrando que estos nuevos estados de borde son resistentes incluso en ausencia de la simetría quiral, comparado al modelo SSH original.

3.1 Paredes de dominio y condiciones de borde

El primer paso para la construcción de este modelo es definir una pared de dominio. Para mostrar gráficamente una pared de dominio, nos dirigiremos a los dos casos

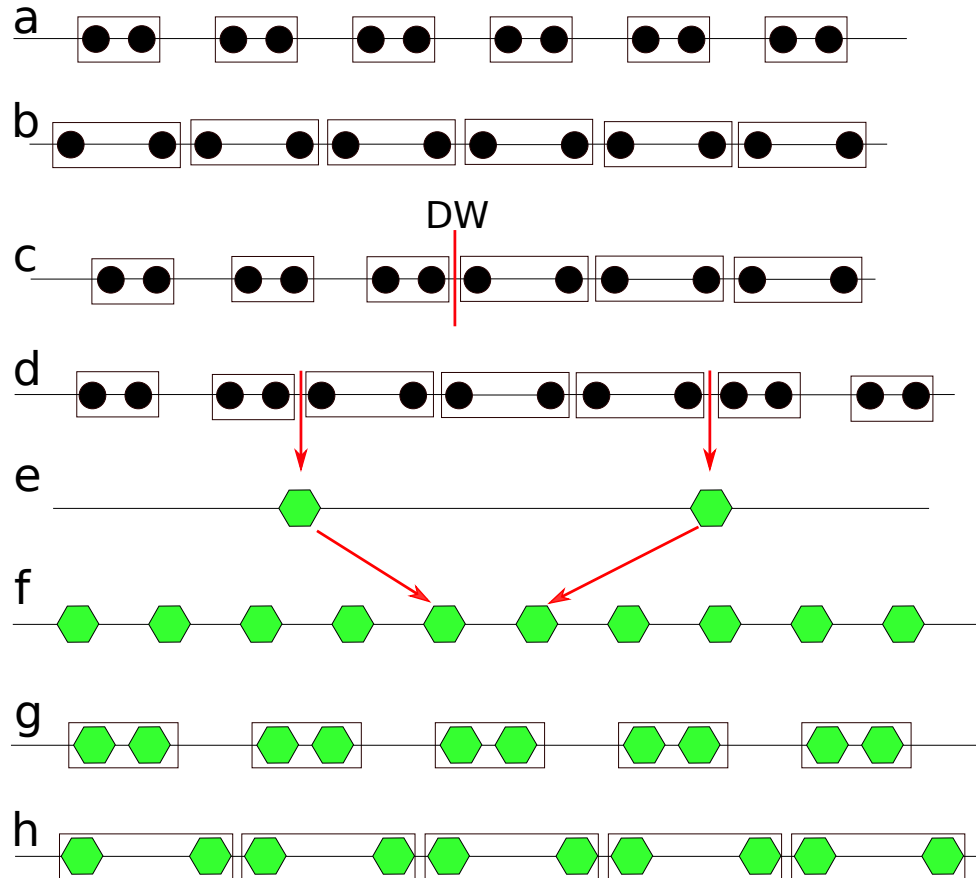


Fig. 6: (a,b) Esquema de una red bipartita donde cada celda, encerrada por un cuadro, tiene dos sitios idénticos. Existen dos casos: el acoplamiento intracelda es mucho mas fuerte que el acoplamiento intercelda o lo contrario. (c) El modelo SSH: en torno a un defecto tipo pared de dominio (DW) aparece un estado localizado en el centro del *band gap*. (d,e) Dos DW, la longitud de cada segmento esta exagero para una fácil visualización. El hexágono verde denota el estado asociado al DW (estado de baja energía). (f) Una red periódica de DWs. Aquí, la descripción efectiva de bajas energías es una cadena mono-atómica. (g,h) El modelo de paredes de dominio para una red bipartita (BDW): Dimerización de los DWs. Ahora, el comportamiento de bajas energías es una red bipartita, similar a (a,b). La introducción y el estudio del modelo BDW será tratado posteriormente.

de la red bipartita del modelo SSH, en fig. 6a,b se muestran las dos posibles fases (aislador trivial y aislador topológico) de este modelo. Ambas fases se encuentran, una después de la otra, separadas por un defecto de la secuencia de enlaces débiles y fuertes. A este defecto se le llama pared de dominio (DW), ver fig. 6c. Si cada subsistema (fase trivial y topológica) consiste en N celdas de unidad (en total $2N$ sitios), luego de imponer condiciones de borde periódicas ($a_N^\dagger = a_0^\dagger$), se conforma una red con dos paredes de dominio, cada una con un estado localizado en ella. El Hamiltoniano asociado corresponde a

$$H'_{SSH} = \sum_{j=0}^{N-1} \left(t a_j^\dagger b_j + \nu a_{j+1}^\dagger \right) + \sum_{j=N}^{2N-1} \left(\nu a_j^\dagger b_j + t a_{j+1}^\dagger b_j \right) + h.c. \quad (3.1)$$

Usando las soluciones encontradas en el capítulo anterior, ec. 2.15, Ψ_L y Ψ_R , podemos usarlas como *ansatz* para las paredes de dominio en $j = 0$ y $j = N - \frac{1}{2}$

$$\Psi_a^\dagger = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} (-1)^j e^{-\frac{j}{\epsilon}} a_j^\dagger + \alpha \sum_{j=N}^{2N-1} (-1)^j e^{-\frac{2N-j}{\epsilon}} a_j^\dagger \quad (3.2)$$

$$\Psi_b^\dagger = \beta \sum_{j=0}^{N-1} (-1)^j e^{-\frac{N-1-j}{\epsilon}} b_j^\dagger + \beta \sum_{j=N}^{2N-1} (-1)^j e^{-\frac{j-N}{\epsilon}} b_j^\dagger \quad (3.3)$$

donde α, β son constantes de normalización. Estas soluciones son válidas para cualquier valor de los *hoppings*, tal que $t \neq \nu$. Si $\nu > t$ ($\epsilon > 0$), Ψ_a está centrado en $j = 0$ y Ψ_b está centrado en $j = N + \frac{1}{2}$. El valor opuesto de los *hoppings*, Si $\nu < t$, implica un valor negativo de ϵ y solo invierte las posiciones del centro de las paredes de dominio.

3.2 Una red periódica de paredes de dominio

3.2.1 paredes de dominio periódicas equi-espacedas

Una red bipartita con M paredes de dominio equidistantes, ver fig. 6f, tiene el siguiente Hamiltoniano

$$H_{PDW} = \sum_{m=0}^{M-1} (h_N(m) + h'_N(m)) \quad (3.4)$$

$$h_N(m) = \sum_{j=2mN}^{(2m+1)N-1} (ta_j^\dagger b_j + \nu a_{j+1}^\dagger b_j) + h.c. \quad (3.5)$$

$$h'_N(m) = \sum_{j=(2m+1)N}^{(2m+2)N} (\nu a_j^\dagger b_j + ta_{j+1}^\dagger b_j) + h.c. \quad (3.6)$$

donde h_N, h'_N son Hamiltonianos similares al SSH, pero con diferentes fases topológicas. La periodicidad en H_{PDW} son dos paredes de dominio, o $2N$ celdas, pero el espacio entre las paredes de dominio es solo N sitios. Este Hamiltoniano es un poco complicado, pero si nos enfocamos en excitaciones de baja energía, se puede simplificar enormemente, simplemente manteniendo la superposición de los modos Ψ_a, Ψ_b cerca de cada pared de dominio, mirar ecn. (3.2),(3.3). Usando esa base, el Hamiltoniano efectivo corresponde a

$$H_{PDW}^{eff} = \sum_{m=0}^{M-1} t' (\Psi_{a,m}^\dagger \Psi_{b,m} + \Psi_{a,m+1}^\dagger \Psi_{b,m}) + h.c. \quad (3.7)$$

Cada grupo de $2N$ sitios es una celda efectiva con dos subredes por celda (ambas paredes de dominio), al igual que en el modelo de red bipartita estándar, pero con

solo una interacción t' . Por lo tanto, las excitaciones efectivas de bajas energías son como los de una cadena monoatómica con periodo N , mirar fig. 6f y fig. 7a. Las funciones base localizadas en las paredes de dominio, en los sitios $2mN$ y $(2m+1)N$, son

$$\Psi_a^\dagger(m) = \alpha' \sum_{j=(2m-1)N}^{(2m+1)N-1} (-1)^j e^{-\frac{|2mN-j|}{\epsilon}} a_j^\dagger \quad (3.8)$$

$$\Psi_b^\dagger(m) = \beta' \sum_{j=2mN}^{(2m+2)N-1} (-1)^j e^{-\frac{|(2mN-j)N-\frac{1}{2}-j|}{\epsilon}} b_j^\dagger \quad (3.9)$$

Las funciones $\Psi_a^\dagger, \Psi_b^\dagger$ están basadas en las ecuaciones ecn. (3.2), (3.3). Mientras que ecn. (3.2) ya está simétricamente centrada alrededor de $2mN$, se puede multiplicar (3.3) por $e^{-\frac{1}{2}}$ para hacerla simétrica alrededor de la pared de dominio en $(2m+1)N$. Una simple interpretación de este factor $\frac{1}{2}$ es que el centro de simetría está en un sitio b , o sea en la mitad de la celda.

La interacción entre dos estados localizados puede ser descrita aproximadamente por la expresión matemática

$$t' = \langle \Psi_{a,m} | H_{PDW} | \Psi_{b,m} \rangle \quad (3.10)$$

$$t' \approx \alpha' \beta' (N-1) e^{-\frac{N}{\epsilon}} (t e^{\frac{1}{2\epsilon}} - v e^{-\frac{1}{2\epsilon}}) \quad (3.11)$$

donde las constantes de normalización α', β' son prácticamente independientes de N , $\alpha' \approx 0.87 \left(1 + \frac{1}{2} e^{-\frac{2N}{\epsilon}}\right)$. Para valores grandes de N el primer término domina en el paréntesis, pero en algunos contextos, como en óptica, los arreglos mas comunes consisten en un número limitado de guías de onda.

Los estados de baja energía dados por ecn. (3.4) y ecn. (3.7), ya no están topológicamente protegidos, a pesar de que están localmente polarizados por sub-red (en la escala de N sitios), pero en una gran escala (NM sitios) las sub redes se mezclan. También sus energías son genuinamente finitas, formando una banda tipo s , fig. 7a. Nuestros resultados están de acuerdo a estudios anteriores, pero para el límite continuo [57].

3.2.2 Nuevos estados topológicos y una súper red bipartita

En esta sección introduciremos una red bipartita de paredes de dominio, comenzando por su Hamiltoniano atómico, para luego derivar un Hamiltoniano efectivo de bajas energías, que es una nueva versión del modelo SSH, pero a otra escala tanto de energías como de extensión espacial. Al igual que en el modelo SSH, este nuevo modelo tiene estados de borde topológicamente protegidos.

Consideremos la red periódica de paredes de dominio de la sección anterior. La distancia entre paredes dominio sucesivas puede dimerizarse, es decir, el espacio de entre paredes de dominio alterna entre N y N' . Esto cambia ligeramente el Hamiltoniano de una red periódica de paredes de dominio, desde H_{PWD} , ecn. (3.4) a un Hamiltoniano de una red bipartita de paredes de dominio (BDW de aquí en adelante):

$$H_{BDW} = \sum_{m=0}^{M-1} (h_N(m) + h'_{N'}(m)), \quad (3.12)$$

donde el límite de la suma de $h_N, h'_{N'}$ se ajustará acorde al tamaño de cada dominio. Esto produce dos diferentes interacciones entre las paredes de dominio.

El Hamiltoniano efectivo de bajas energías es una copia de uno describiendo la red bipartita, pero a mayor escala espacial y a pequeñas energías, mirar fig. 7c,d:

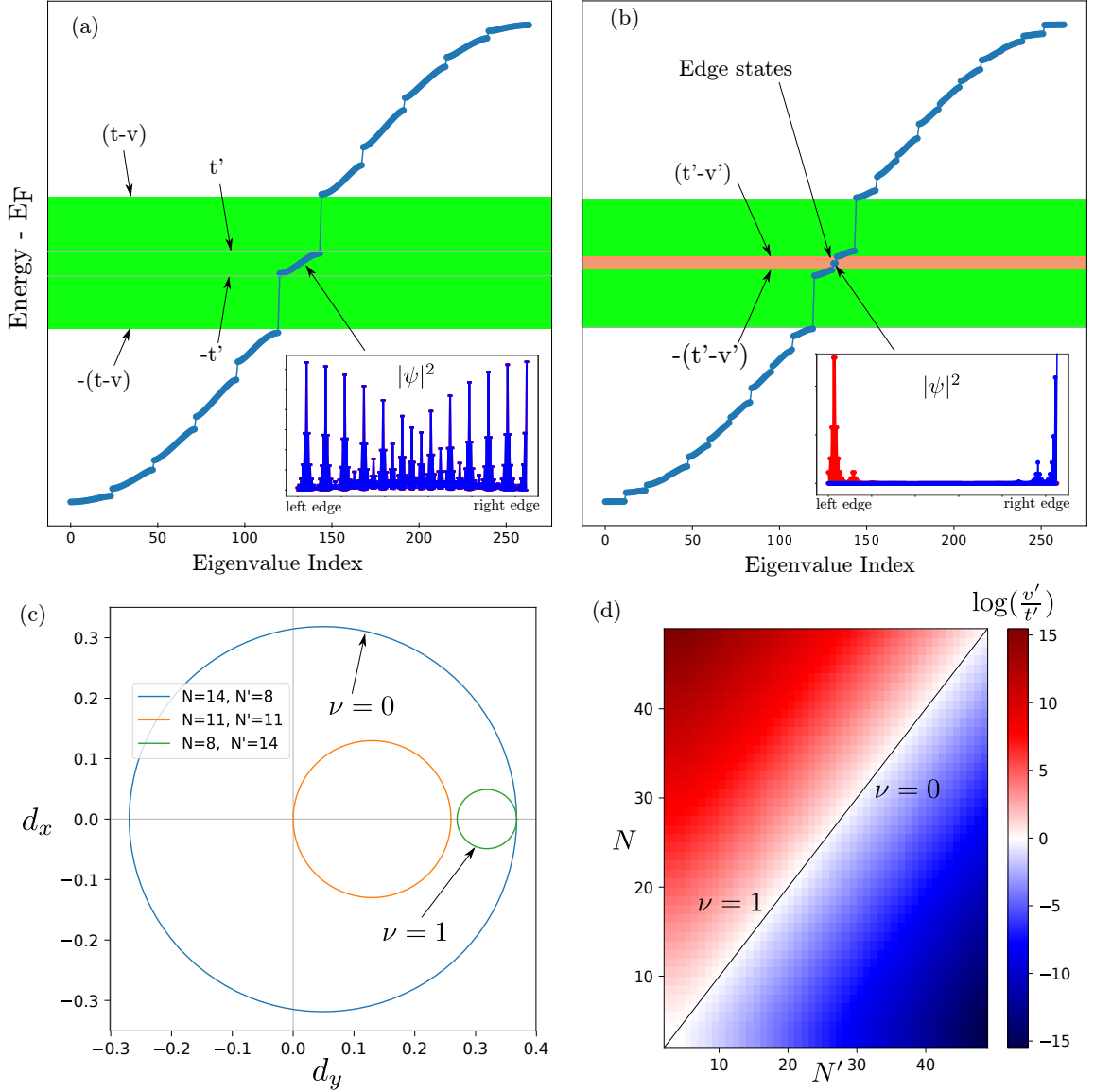


Fig. 7: (a) Niveles de energía de una cadena de $M = 12$ paredes de dominio, con un espaciamento de $N = 11$ celdas. Los auto estados de baja energía, dentro de la región verde, están formados por la interacción entre los estados de pared de dominio. (b) Niveles de energía de una red de paredes de dominio, pero alternando el ancho, $N = 14, N' = 8$, entre las sucesivas paredes de dominio (fueron utilizadas $M = 12$ replicas). Un nuevo *band gap* se abre con estados de borde topológicamente protegidos en el medio, mirar la región rojiza en el recuadro. (c) Representación del Hamiltoniano efectivo, para unos cuantos valores de N, N' . (d) Dependencia de t', ν' , y el diagrama de fases del *winding number*, n_c , en función de N, N' . En todos los paneles $t = 1.0, \nu = 1.5$

$$H_{BDW}^{eff} = \sum_{m=0}^{M-1} (t' \Psi_{a,m}^\dagger \Psi_{b,m} + \nu' \Psi_{a,m+1}^\dagger \Psi_{b,m}) + h.c. \quad (3.13)$$

De mismo modo, los *hoppings* efectivos son fuertemente dependientes de la distancia entre las paredes de dominio, fig. 7d.

$$t' = \langle \Psi_{a,m} | H_{BDW} | \Psi_{b,m} \rangle \propto N e^{-\frac{N}{\epsilon}} \left(t e^{\frac{1}{2\epsilon}} - v e^{-\frac{1}{2\epsilon}} \right) \quad (3.14)$$

$$\nu' = \langle \Psi_{a,m} | H_{BDW} | \Psi_{b,m+1} \rangle \propto N' e^{-\frac{N'}{\epsilon}} \left(t e^{\frac{1}{2\epsilon}} - v e^{-\frac{1}{2\epsilon}} \right), \quad (3.15)$$

donde, por simplicidad, ignoramos el último término de ecn. (3.11), esta aproximación es válida si $N, N' \gg 1$ (ver fig. 7d).

La validez de la aproximación a bajas energías fue confirmada al compararla con la diagonalización directa del Hamiltoniano completo fig. 7b.

La figura 7b muestra el espectro de energías del Hamiltoniano H_{BDW} . Dentro del *band gap* fundamental, aparecen bandas correspondientes a los estados originados en las paredes de dominio y un nuevo *gap* se abre dentro de estas bandas (región rojiza). En medio de este pequeño *gap* en el medio, aparecen dos estados con energía igual a cero. Estos estados surgen a partir de los estados de las paredes de dominio, están localizados en los extremos del sistema y están completamente polarizados en cada respectiva sub-red (ahora los sitios a, b pasan a ser paredes de dominio), ver recuadro dentro de fig. 7b.

La analogía con el modelo SSH regular en el caso periódico está casi completa, para el caso límite de una cadena muy larga, $M \rightarrow \infty$, al Hamiltoniano de ecn. (3.12) se le puede aplicar la transformada de Fourier, dando

$$h(k) = \begin{pmatrix} 0 & t' + v'e^{ik} \\ t' + v'e^{-ik} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

donde $h(k)$ es el kernel del Hamiltoniano H_{BDW}^{eff} . Que es el mismo Hamiltoniano del modelo SSH original, ver 2.4. Por completitud, repetiremos parte de esa discusión. El Hamiltoniano $h(k)$ se puede escribir de una forma mucho mas compacta, $h(k) = \vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma}$, con $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ el vector formado por las matrices de Pauli, y $\vec{d} = (t' + v' \cos(k), v' \sin(k), 0)$. La figura 7c muestra el lugar geométrico formado por el vector \vec{d} para algunos valores de N, N' , sin modificar el valor de los *hopping* entre sitios. Existe un invariante topológico asociado a $h(k)$, llamado *winding number* o *Chern number*:

$$n_c = \frac{1}{2\pi} \oint dk \frac{d_x d'_y - d_y d'_x}{d_x^2 + d_y^2} \quad (3.17)$$

La interpretación geométrica de n_c es simple, cuenta cuantas veces la curva $\vec{d}(k)$ encierra el origen. Los dos posibles valores que puede tomar son $n_c = \{0, 1\}$, definiendo el diagrama de fases del sistema, mirar fig. 7c,d. Si $N > N'$ el sistema se encuentra en una fase topológica, que es $n_c = 1$, a la inversa, si $N < N'$ nos encontraremos frente a una fase trivial con $n_c = 0$. En el caso restante, $N = N'$, la curva \vec{d} toca el origen y número topológico se indefine: el sistema se convierte en un metal. Solo en el caso con $n_c = 1$ tiene estados de borde protegidos topológicamente.

Mientras H_{BDW}^{eff} es útil para visualizar la conexión entre el modelo BDW y el modelo SSH, no logra capturar otros interesantes fenómenos complejos, como el desorden. Para explorar esto, emplearemos el Hamiltoniano completo, ecn. (3.12).

3.3 Desorden en el modelo BDW

Para introducir el desorden en los modelos SSH y BDW, se añade una cantidad aleatoria a los términos del Hamiltoniano de la diagonal o fuera de esta. Este valor aleatorio es tomado de una distribución aleatoria de tamaño δ .

La resistencia de los estados topológicamente protegidos del modelo SSH en el caso del desorden fuera de la diagonal es bien conocido. En cadenas pequeñas el desorden fuera de la diagonal puede cerrar el *gap*, en otras palabras, el desorden contribuye a disminuir la longitud de penetración de cada estado de borde, pero las cadenas consideradas en nuestro estudio, ver fig. 8, son muy largas como para que este efecto pueda ser visto (ya que no existe hibridización entre estados de borde).

Para el modelo BDW, el efecto del desorden fuera de la diagonal, es decir en los *hoppings*, se encuentra debajo de 10^{-4} para una amplitud de desorden de $\delta = [0, 2t]$. Lo cual, a pesar de superar al caso SSH, sigue siendo muy pequeño para ser de interés, por lo que omitiremos este caso.

En cambio, la no uniformidad del desorden de sitio directamente rompe a la simetría quiral, destruyendo la protección topológica. La figura 8 muestra un *gap* casi lineal para los estados de superficie del modelo SSH, como también se muestra en [58].

Los estados de borde del modelo BDW son similares a los estados topológicos del modelo SSH, y por la misma razón, son frágiles al desorden de sitio. Sin embargo, la magnitud del *gap* debido al desorden de sitio es mucho mas pequeño para los estados de borde del modelo BDW, mirar fig. 8a. Esto puede ser explicado, parcialmente, por lo siguiente: Mientras los estados de superficie del modelo SSH están directamente afectados por el desorden diagonal, los estados del modelo BDW estan afectados tan

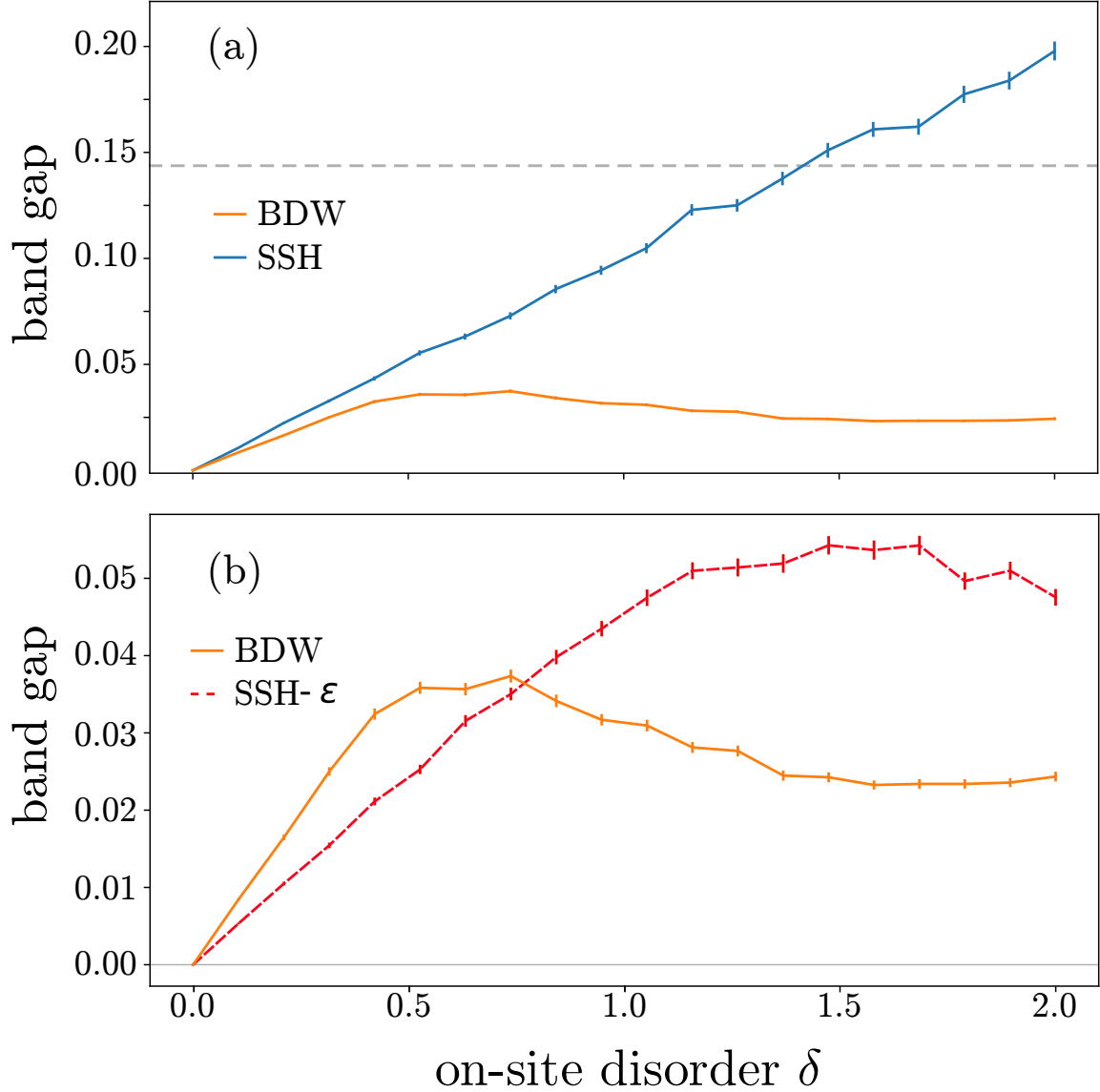


Fig. 8: Promedio del *gap* entre los estados de borde de los modelos SSH y BDW, en función del tamaño del desorden de sitio. Las amplitudes de *hopping* de las curvas del SSH y BDW son $t = 1.0$, $\nu = 1.5$ y $N = 8$, $N' = 14$ para el modelo BDW (mismo número total de sitios fueron usados para el modelo SSH). La curva SSH- ϵ tiene como parámetros $t = 1$, $\nu = 1.1$. La línea punteada horizontal corresponde al *gap* de los estados de paredes de dominio (el *band gap* del modelo SSH es 1.0).

solo por el desorden promedio sobre su longitud característica ϵ_{BDW} , que promedia cero para valores grandes de ϵ_{BDW} . Con los parámetros $t = 1, \nu = 1.5$, la longitud característica del modelo SSH es $\epsilon_{SSH} \sim 2.5$ celdas, o alrededor de 5 sitios. En cambio, para el mismo valor de t, ν (pero $N = 8, N' = 14$), la longitud característica en el modelo BDW es de $\epsilon_{BDW} \sim 1.9$ super celdas o 42 sitios.

Para testear la relación entre el *gap* y ϵ , uno podría comparar una cadena SSH y una BDW tal que la longitud de penetración de los estados de superficie ϵ , sea la misma. Esto se logra mediante el uso de diferentes *hoppings* t, ν en cada cadena. Pero, esta comparación falla debido a que mientras que los estados de superficie del SSH están polarizados por sub red, los estados del BDW también están polarizados por sub red en la super-red de paredes de dominio. Por lo tanto, uno podría esperar un comportamiento similar para una cadena SSH y BDW cuando $\epsilon_{BDW} \sim 2\epsilon_{SSH}$. Esto se consigue cuando $t = 1, \nu = 1.1$ en la cadena SSH y $t' = 1, \nu' = 1.5$ en el modelo BDW. La figura 8b muestra un comportamiento similar en ambos modelos cuando se satisface la condición anterior.

Para entender el comportamiento de la cadena BDW bajo desorden de sitio, mostramos en la figura 9 el promedio del *gap* cuando una de las amplitudes de *hopping*, por ejemplo, ν , varía, manteniendo los otros parámetros fijos (t, δ).

A desorden moderado (es decir, la región donde el modelo BDW aumenta linealmente con el desorden, fig. 9), para $\delta = 0.5$, el modelo BDW y SSH tienen similar comportamiento: el *gap* aumenta con ν , que es esperable ya que la longitud de localización de los estados de borde decrece con ν y mientras más pequeña es esta longitud, mas grande es el efecto de un defecto sobre el *gap*. Para cada valor de ν el *gap* de los estados del modelo BDW son mas pequeños que el *gap* proveniente del modelo SSH, ya que el modelo BDW tiene un *gap* similar al del SSH para pequeñas

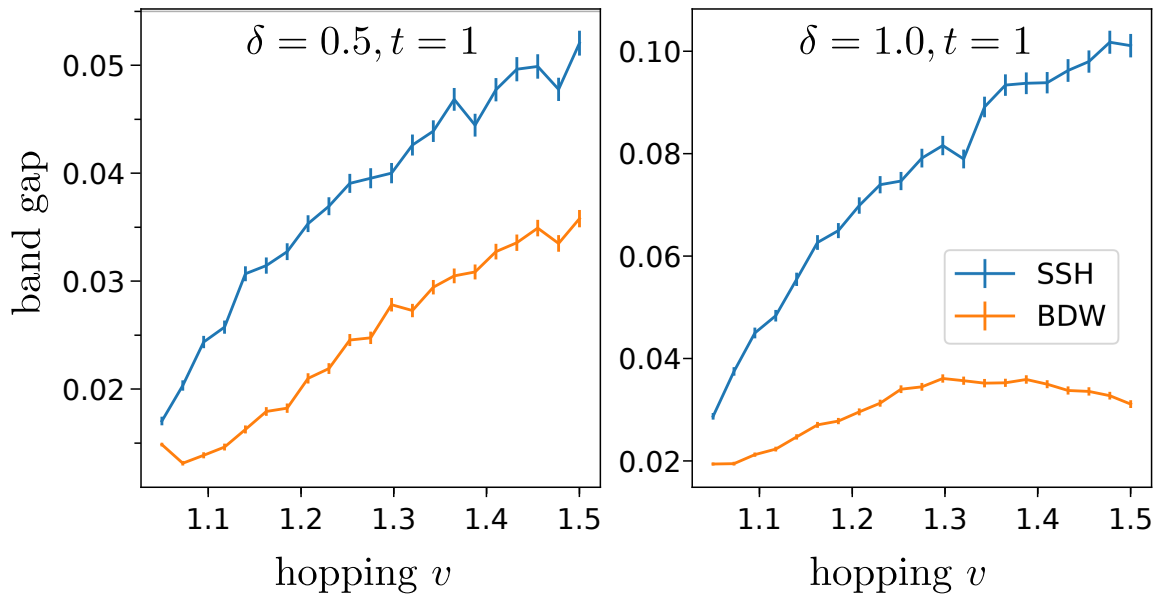


Fig. 9: *Gap* promedio entre los estados de borde del modelo SSH y el BDW, en función del *hopping* v . Los diferentes paneles tienen una amplitud de desorden de sitio de δ . El *hopping* $t = 1$ para ambos paneles, y $N = 8, N' = 14$ para el modelo BDW (mismo número total de sitios fue usado para el modelo SSH)

diferencias en las interacciones t y ν . Incrementando al doble la amplitud del desorden de sitio, $\delta = 1.0$, fig. 9, el *gap* del SSH prácticamente se duplica para todo valor de ν . Pero en el *gap* del modelo BDW no aumenta apreciablemente.

En resumen, la resistencia de los estados de borde del modelo BDW frente al desorden de sitio -es decir al rompimiento de la simetría quirál- es una característica bastante general y depende débilmente de las amplitudes de *hopping* originales del sistema t, ν . En contraste, el modelo SSH es frágil frente al desorden, especialmente cuando sus interacciones son muy diferentes, es decir, cuando ϵ_{SSH} comprende pocos sitios.

Para obtener una visión mas profunda de los efectos del desorden en ambos, el modelo SSH y BDW, introduciremos la razón de participación inversa (IPR) [59]:

$$IPR = \frac{\sum_n |c_n|^4}{(\sum_n |c_n|^2)^2} \quad (3.18)$$

donde c_n son las amplitudes de las funciones de onda en el sitio n . Un estado completamente localizado tiene $IPR = 1$ y una onda totalmente deslocalizada tiene $IPR = 1/N$, siendo N el largo de la cadena. La figura 10 muestra el valor de IPR para ambos, desorden diagonal y no diagonal (considerando solo primeros vecinos). Para el bulto, los estados de Blöch de la red SSH se localizan con el desorden, independientemente si es un desorden de sitio o fuera de la diagonal. Los estados de Blöch de la cadena BDW tiene un comportamiento muy similar, ya que también son estados de Blöch, pero están ligeramente mas localizados para un valor finito de δ . En el modelo BDW hay otro tipo de estados de Blöch, que están formados por la interacción entre paredes de dominio, formando un paquete de ondas (fig. 7a,b). La IPR de esos estados es muy similar a los estados de Blöch regulares, y por mayor

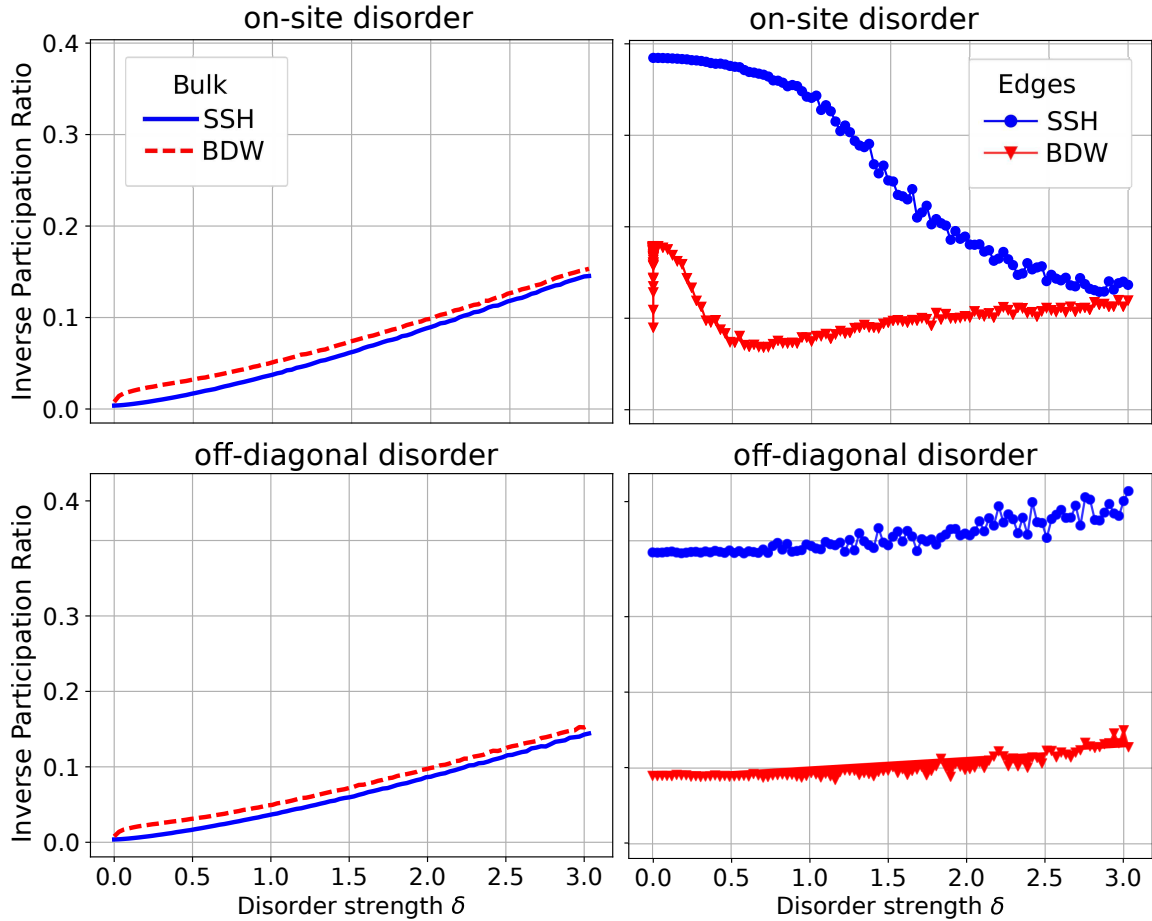


Fig. 10: Promedio de la razón de participación en función de la amplitud del desorden, para el desorden de sitio (paneles superiores) y desorden fuera de la diagonal (paneles inferiores). Los estados de bulk y los de borde están en los paneles de la derecha e izquierda, respectivamente. Los parámetros usados son los mismos que fig. 8

claridad de ellos no son incluidos en la figura 10.

Los estados de borde del modelo BDW (panel derecho de fig. 10) muestran un salto repentino del IPR, duplicando su valor para pequeñas cantidades de desorden de sitio. Cuando δ es del orden de la interacción entre los estados de borde (un valor sumamente pequeño), dejan de formarse los pares *bonding anti-bonding*, $\frac{1}{2}(\Psi_L \pm \Psi_R)$, pero en lugar de esto, ellos se localizan en el borde derecho e izquierdo. Debido a las pequeñas energías envueltas en este proceso, uno puede pensar en un dispositivo electrónico (por ejemplo, la *IPR* podría ser ~ 0.18 sin desorden), pero esto muestra que incluso valor del desorden de sitio muy pequeño puede prevenir la ocurrencia de fraccionalización de la carga en el modelo [60].

Después de alcanzar un valor de $\delta |t - \nu|$ (en el gráfico $|t - \nu| = 0.5$), los estados de borde del BDW prácticamente mantiene su *IPR*, casi independiente de la amplitud del desorden de sitio δ . A pesar de estar localizados, debido a la simetría quiral, el modelo permite una longitud de localización de varios sitios, previniendo una deslocalización debido al desorden de sitio. En contraste, los estados de borde del modelo SSH tienen una importante deslocalización debido al desorden de sitio, debido a que, la simetría quiral ya los localizó en algunos sitios, y el rompimiento de esta simetría superará la localización debido al desorden, por lo que el *IPR* decrece. Este comportamiento, marcadamente diferente en ambos modelos, es consistente con la apertura de un *gap* debido al desorden de sitio, figs. 8,9.

Finalmente, en lo que respecta al desorden fuera de la diagonal, aumenta el *IPR* de los estados de bulto en ambos modelos. También incrementa ligeramente el *IPR* de los estados de borde de ambos. Esto es consistente con la ausencia de un *gap* debido al desorden fuera de la diagonal.

Este capítulo originó una publicación que puede ser encontrada en [61]

Capítulo 4

El modelo de Bernevig, Hughes y Zhang (BHZ)

A pesar de que el modelo SSH es una excelente introducción a las fases topológicas de la materia, su utilidad es bastante limitada. Esto se debe principalmente a dos razones: (i) la simetría quiral es destruida con facilidad, por ejemplo, mediante contaminación o impurezas y (ii) los estados de borde de un sistema unidimensional son estáticos, es decir, no transportan carga (al menos no como una banda de energía).

En este capítulo trataremos otro modelo, propuesto por Bernevig, Hughes y Zhang [15], ampliamente conocido como BHZ. Este modelo tiene una gran relevancia en la historia de los aisladores topológicos, dado que se basa en sistemas realistas -desde un punto de vista experimental-, proponiendo nuevas fases exóticas de la materia y que sus posibles aplicaciones podrían tener grandes implicancias tecnológicas. Eventualmente, el desarrollo del área de las fases topológicas de la materia ha tomado otros rumbos, sin embargo, el modelo BHZ permanece como una de sus piedras angulares.

Comenzaremos con una pequeña discusión de las fases topológicas del modelo de Jackiw-Rebbi (sección 4.1), basado en la ecuación de Dirac. Luego, en la sección 4.2, introduciremos el modelo BHZ. En la sección 4.3 estudiaremos los estados de

superficie -topológicamente protegidos- del modelo BHZ. Finalizaremos tratando las funciones de onda asociadas a este modelo, sección 4.4. Como el objetivo de este capítulo es introducir el modelo BHZ, su notación y parte del álgebra necesaria para el capítulo 5, no nos detendremos en la evidencia experimental asociada a este modelo, tampoco en sus posibles aplicaciones.

4.1 Aisladores topológicos y el Merón

La primera versión para un Hamiltoniano relativista asociada a una partícula elemental de spin 1/2 fue escrita por Paul Dirac en el año 1928 [62]. Para una masa m , velocidad de la luz c y las matrices de Pauli $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, la ecuación de Dirac es

$$H = c\vec{p} \cdot \vec{\alpha} + mc^2\beta, \quad (4.1)$$

donde α, β son matrices de 4×4 , que se pueden escribir en función de las matrices de Pauli y satisfacen las mismas relaciones de anti-conmutación que estas. Las energías asociadas a este Hamiltoniano son $E_{\pm} = \pm\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$, que corresponde a un electrón ($E > 0$) y a un positrón ($E < 0$). Bajo la transformación $m \rightarrow -m$ la ecn. (4.1) permanece invariante si $\beta \rightarrow -\beta$, esto dice que no hay distinción -a nivel de la ecn. de Dirac- entre las partículas con masa positiva o negativa.

Jackiw y Rebbi presentaron una posible solución de la ecuación de Dirac en una dimensión [63], construyendo una interfaz entre dos sistemas de Dirac con masas de distinto signo

$$m(x) = \begin{cases} m_1 & x < 0 \\ m_2 & x > 0 \end{cases},$$

con $m_1, m_2 > 0$. Ellos encontraron una solución con energía exactamente cero localizada en interfaz ($x = 0$). Esta solución es robusta frente a variaciones en la distribución de masa $m(x)$. La función de onda asociada a este estado de borde tiene la forma

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{\nu}{\hbar} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{-|m(x)v x|/\hbar} \quad (4.2)$$

Esta función de onda presenta un decaimiento exponencial al alejarse de la interfaz. Lo anterior se puede generalizar fácilmente para más de una dimensión: siempre existen estados de borde en la interfaz entre un valor de masa positivo y negativo. Debido a que la ecuación de Dirac es simétrica frente a cambios en el signo de la masa, no se puede hacer una distinción topológica entre los sistemas con masa positiva y negativa, en resumen, no se puede decir cual sistema es topológicamente trivial o no. Por lo tanto, la ecuación de Dirac, ecn. (4.1), no es un buen candidato para describir la topología en los materiales.

Sin embargo, una manera en el que se puede explorar una posible fase (y protección) topológica es la inclusión de un término cuadrático en la ecuación de Dirac [64].

$$H = v\vec{p}\vec{\alpha} + (mv^2 - Bp^2)\beta \quad (4.3)$$

El término cuadrático $-Bp^2$ rompe la simetría entre la masa m y $-m$, haciendolo un sistema distinto a (4.1)

La dirección del espín para $p \rightarrow 0$ está dado por el valor de m , mientras que para $p^2 \rightarrow \infty$ el valor del espín está dado por B . Esto significa que en el caso $mB > 0$ la dirección de spin es antiparalelo en $\vec{p} = 0$ y $\vec{p} = \infty$. El caso $mB < 0$

implica que el espín es paralelo para $\vec{p} = 0$ y $\vec{p} = \infty$. Es decir, tenemos dos fases claramente distintas, dadas por el signo del término mB , lo que sugiere existencia de algún invariante topológico en este tipo de sistemas. A las soluciones, para $mB > 0$, se les denomina merón (en el espacio de momentum).

La ecn. 4.3 tiene un invariante topológico asociado, para que este sea explícito, nos restringiremos a dos dimensiones. En este caso, en vez de las matrices α y β , nos bastan las matrices de Pauli para expresar el Hamiltoniano:

$$H = vp_x\sigma_x + vp_y\sigma_y + (mv^2 - Bp^2)\sigma_z, \quad (4.4)$$

es decir podemos escribir $H = \vec{d} \cdot \sigma$ y emplear una generalización del *winding number*, ecn. 2.24 para definir el llamado número de Chern [7]:

$$n_c = -\frac{1}{4\pi} \int d\vec{p} \frac{\vec{d} \cdot \left(\frac{\partial \vec{d}}{\partial p_x} \times \frac{\partial \vec{d}}{\partial p_y} \right)}{d^3}, \quad (4.5)$$

con $2n_c = \text{sgn}(m) + \text{sgn}(B)$, es decir n_c puede tomar valores 0 o 1 dependiendo de su fase topológica. En la interfaz entre ambas fases topológicas (es decir, cuando m cambia de signo) existe un estado de energía localizado y de energía cero, la forma exacta de este estado no es relevante para esta discusión, pues es muy similar al encontrado en ecn. 4.2.

Entre los modelos simplificados que describen ciertos materiales, está el modelo BHZ para el pozo de potencial HgTe, en el que mediante un modelo efectivo en el espacio de momentum se obtiene una ecuación análoga a la ecuación de Dirac con el parámetro cuadrático extra, obteniendo merones y los solitones localizados en la interfaz. A continuación, pararemos a describir con mas detalles el modelo BHZ.

4.2 Modelo BHZ: bulto

El modelo BHZ fue introducido por Bernevig, Hughes y Zhang como una realización concreta del efecto Hall de cuántico de espín, ya que la propuesta inicial de una medición de este efecto en el grafeno [11] resultó ser una opción no muy realista, debido a que la interacción espín-órbita abre un gap extremadamente pequeño (10^{-4}meV) [65, 66]. Este modelo nace de la descripción a bajas energías de las subbandas, asociadas a un pozo cuántico formado por HgTe/(Hg,Cd)Te [15]. El modelo tiene cuatro bandas, con una base del Hamiltoniano correspondiente a dos orbitales s , $|s, \uparrow\rangle, |s, \downarrow\rangle$ y dos orbitales p hibridizados debido a la interacción espín órbita $|p_x + ip_y, \uparrow\rangle, |-(p_x - ip_y), \downarrow\rangle$. El *band gap* en este pozo de potencial se encuentra en $\Gamma = (0, 0)$. Matricialmente, el modelo esta representado por

$$H_{QW}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} H(\vec{k}) & 0 \\ 0 & H^*(-\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

$$H(\vec{k}) = E_0(\vec{k}) + \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma}, \quad (4.7)$$

donde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ denota los grados de libertad de espín en cada orbital, $\vec{d}(\vec{k}) = (Ak_x, Ak_y, \Delta - B(k_x^2 + k_y^2))$, $E_0(\vec{k}) = C - D(k_x^2 + k_y^2)$ con A, B, C, D constantes del modelo y Δ es término de masa que define la topología del sistema. Para semimetales como el grafeno, este término Δ es cero mientras que en semiconductores como GaAs y CdTe, en donde la banda tipo s posee mayor energía que las bandas tipo p , el valor de Δ es positivo. También se puede dar el caso en el que la banda s sea de menor energía que la banda p , estos materiales son llamados aisladores topológicos, un ejemplo icónico es el pozo cuántico formado por HgTe/(Hg,Cd)Te, en el que el valor de Δ varía cambiando el ancho del pozo cuántico, produciendo transiciones de fase topológicas de $\Delta > 0$ hasta $\Delta < 0$ pasando por $\Delta = 0$ para un

ancho crítico. El término $H^*(-\vec{k})$ aparece debido a que el sistema es invariante ante la simetría de inversión temporal (TRI).

Para los siguientes resultados teóricos, por simplicidad, solo consideraremos un componente de espín. Para entender en mayor profundidad el modelo BHZ, escribiremos $H(\vec{k})$ en el espacio real [19]. En nuestro caso, emplearemos en una red cuadrada artificial, por lo que hay que reemplazar los términos k_x, k_y por términos que cumplan con dicha periodicidad, y que cerca de Γ permitan recuperar el modelo BHZ. Nuestra elección corresponde a

$$d_x \rightarrow \frac{A}{a} \sin(k_x a) \quad (4.8)$$

$$d_y \rightarrow \frac{A}{a} \sin(k_y a) \quad (4.9)$$

$$d_z \rightarrow \Delta - \frac{2B}{a^2} [2 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a)], \quad (4.10)$$

los cuales forman

$$\vec{d} = (d_x, d_y, d_z), \quad (4.11)$$

en lo anterior a es la distancia entre sitios. Sin perder generalidad, se tomaron los valores de $C = D = 0$. También podemos elegir $a = 1$. Reemplazando en ecn. (4.7) el modelo BHZ para una red cuadrada infinita (fig. 11a) obtenemos el siguiente Hamiltoniano:

$$H_{sq}(\vec{k}) = A \sin(k_x) \sigma_x + A \sin(k_y) \sigma_y + (\Delta - 2B[2 - \cos(k_x) - \cos(k_y)]) \sigma_z \quad (4.12)$$

Este Hamiltoniano corresponde a una matriz de 2x2 de la forma

$$H_{sq}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \Delta - (2B)[2 - \cos(k_x) - \cos(k_y)] & (A)(\sin(k_x) - i \sin(k_y)) \\ A(\sin(k_x) + i \sin(k_y)) & -\Delta + 2B[2 - \cos(k_x) - \cos(k_y)] \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

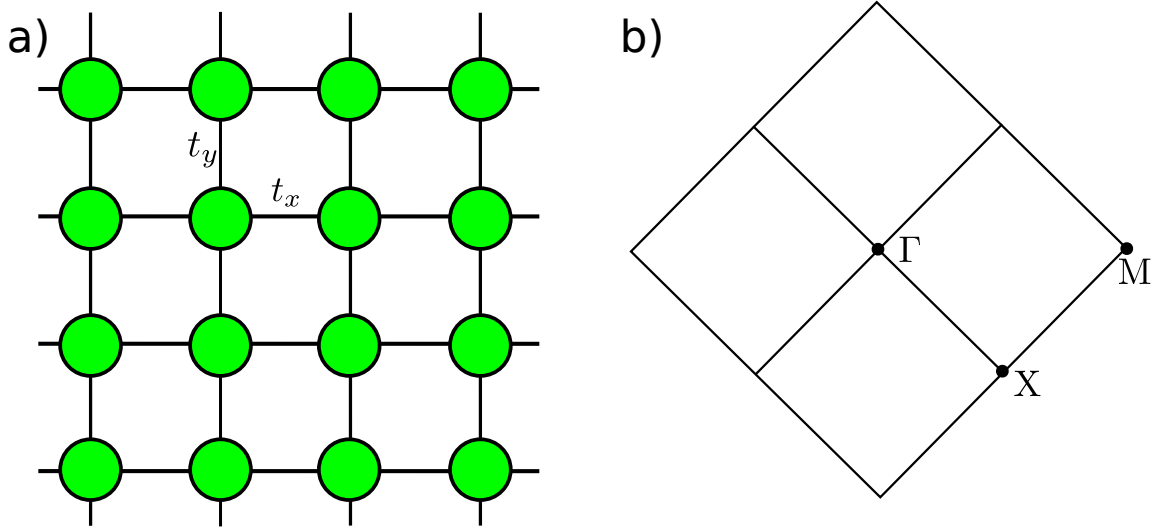


Fig. 11: a) Modelo BHZ llevado a una red cuadrada, el *hopping* es solo a primeros vecinos y esta representado por t_x, t_y en la dirección x e y respectivamente b) Primera zona de Brillouin asociada a la red cuadrada con sus respectivos puntos de alta simetría

diagonalizado la matriz obtenemos los estados de energía asociado al bulto:

$$E(\vec{k}) = \sqrt{A^2 (\sin^2(k_x) + \sin^2(k_y)) + (\Delta - 2B[2 - \cos(k_x) - \cos(k_y)])^2} \quad (4.14)$$

La zona de Brillouin asociada a la red cuadrada se encuentra en la fig. 11b. Al igual que ocurre en el modelo SSH, el modelo BHZ posee tres fases distintas, una fase metálica en donde no se puede definir una topología en el sistema y dos diferentes fases aisladoras que presentan un *band gap*, con una fase geométrica trivial y topológica -fig. 12. El *band gap* asociado a esta combinación de parámetros se encuentra en el punto Γ de la zona de Brillouin. En fig. 13 se puede observar una relación lineal entre el gap y el parámetro de masa Δ , con una transición de fase para $\Delta = 0$. Bajo ciertas condiciones, el *gap* puede encontrarse en otros puntos, como en $X_1 = (0, \pi)$, $X_2 = (\pi, 0)$ y $M = (\pi, \pi)$. Una descripción en detalle del comportamiento del modelo BHZ en estos puntos del espacio recíproco se encuentra

en [19]. En esta tesis, por simplicidad nos enfocaremos solamente en el punto Γ , con un *band gap* asociado a este punto es $E_g = 2\Delta$. La manera en que se puede describir la transición topológica en este sistema es la evaluación de la conductancia de Hall de espín obtenida de la formula de TKNN [7] en términos de la curvatura de Berry integrada sobre toda la zona de Brillouin.

$$\sigma_{xy}^s = \frac{e}{8\pi} \int_{BZ} \frac{d^2\vec{k}}{4\pi} \frac{\partial d}{\partial k_x} \times \frac{\partial \vec{d}}{\partial k_x} \cdot \frac{\vec{d}}{d^3} \quad (4.15)$$

Esta conductancia de espín puede evaluarse tomando los valores de $\vec{d} = (d_x, d_y, d_z)$ en eq. (4.11), obteniendo valores de cero cuando el sistema está en una fase trivial ($\Delta < 0$) y $\sigma_{xy}^s = \frac{e^2}{2\pi}$ cuando se encuentra en una fase topológica ($\Delta > 0$). Si recordamos la definición del número de Chern, ecn. 4.5, la ecuación de la conductividad de Hall no es más que el cuanto de conductividad multiplicado por el número de Chern.

Es conveniente recordar que nuestro análisis se ha restringido al Hamiltoniano de solo una componente de spin, $H(\vec{k})$. Como en el modelo BHZ no existen términos de mezcla de espín, basta con aplicar la simetría de inversión temporal a $H(\vec{k})$, para tener la descripción completa del sistema. En particular, la conductividad de Hall, $\sigma_{xy} = \sigma_{xy}^\uparrow + \sigma_{xy}^\downarrow$ se anula. Pero sí existe una corriente de espín que da cuenta de los estados de borde, $\sigma_{xy}^\uparrow - \sigma_{xy}^\downarrow = \frac{e^2 n_c}{\pi}$. Un valor distinto de cero en la conductancia de espín de Hall tiene profundas consecuencias en la superficie, que es lo que veremos a continuación.

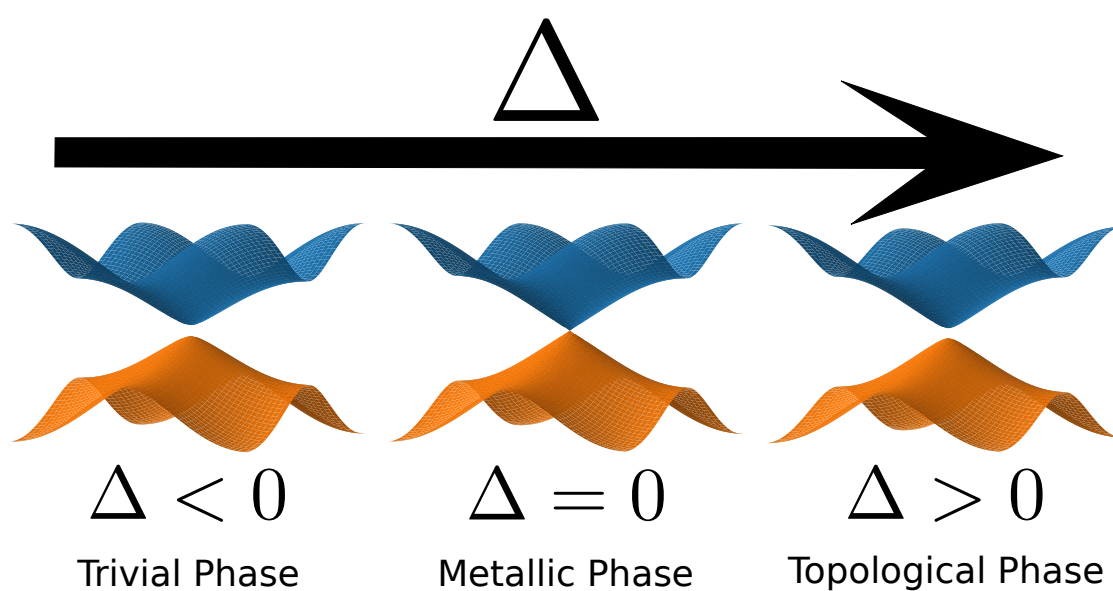


Fig. 12: Diferentes estructuras de bandas del modelo BHZ bulto, los parámetros usados corresponden a $\Delta = 0.2$ para la fase topológica, $\Delta = 0$ para la fase metálica y $\Delta = -0.8$ para la fase trivial. $A = 1, B = 0.5$ son iguales para todos los casos. A medida que Δ crece, se produce una transición de fase en el punto $\Delta = 0$, pasando de una fase trivial a una topológica.

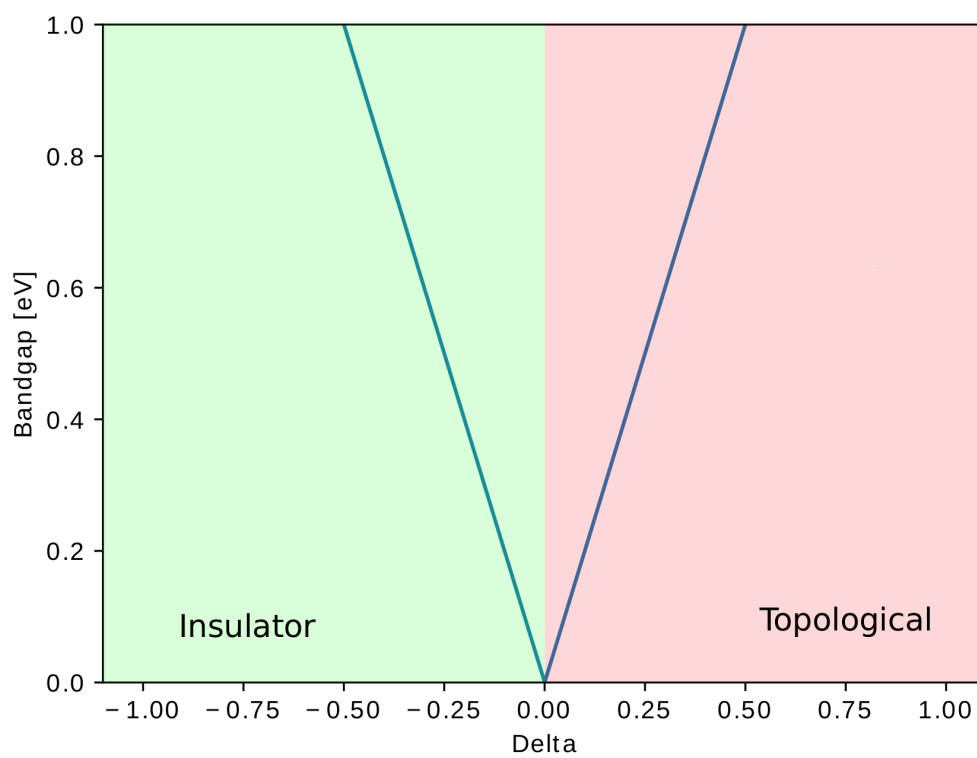


Fig. 13: *Band-gap* para diferentes valores de Δ , en donde se puede diferenciar la fase topológica (zona roja) y la fase trivial (zona verde), los otros parámetros $A = 1$, $B = 0.5$ son comunes a todos los valores de Δ .

4.3 Modelo BHZ: superficie

Al pasar de un sistema bulto a uno con una superficie, aparece una interfaz entre dos sistemas, pudiendo ser entre un sistema trivial (puede ser el vacío) y un aislador topológico. Debido a que los números topológicos asociados a las fases geométricas son discretos, en el borde entre ambos sistemas no es posible definir una fase topológica, llevando a interesantes propiedades. Para poder entender que pasa, modelaremos una interfaz entre un aislador topológico (modelo BHZ en una red cuadrada) y el vacío. El primer paso consiste en obtener una versión del Hamiltoniano para espín up , ecn. (4.12), en el espacio real [19]. En segunda cuantización, la base asociada a este Hamiltoniano en el espacio k se denominará $a_{\vec{k}}^{\dagger} = (a_{1,\vec{k}}^{\dagger}, a_{2,\vec{k}}^{\dagger})$ en donde $\{1, 2\}$ corresponden a los grados de libertad orbitales, entonces,

$$H_{sq} = \sum_{\vec{k}} h_{sq}(\vec{k}) a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + h.c. \quad (4.16)$$

Aplicando la transformada de Fourier inversa

$$a_{\vec{k}} = \sum_{i,j} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_{i,j}} a_{i,j} \quad (4.17)$$

en donde, al igual que en el espacio k , se tiene el espinor $a_{i,j} = (a_{1,i,j}, a_{2,i,j})$. Reemplazando en eq. (4.16), obtenemos una expresión del Hamiltoniano escrito en el espacio real

$$H_{sq} = \sum_{i,j} [(\Delta - 4B)] \sigma_z a_{i,j}^{\dagger} a_{i,j} + \left\{ \left(-i\frac{A}{2}\sigma_x + B\sigma_z \right) a_{i+1,j}^{\dagger} a_{i,j} \right. \quad (4.18)$$

$$\left. + \left(-i\frac{A}{2}\sigma_y + B\sigma_z \right) a_{i,j+a}^{\dagger} a_{i,j} + h.c. \right\}. \quad (4.19)$$

Definiendo $t_x = -i(A/2)\sigma_x + B\sigma_z$, $t_y = -i(A/2)\sigma_y + B\sigma_z$ tenemos una forma

más compacta de H_{sq}

$$H_{sq} = \sum_{i,j} (\Delta - 4B) \sigma_z a_{i,j}^\dagger a_{i,j} + \left\{ t_x a_{i+1,j}^\dagger a_{i,j} \right. \quad (4.20)$$

$$\left. + t_y a_{i,j+a}^\dagger a_{i,j} + h.c. \right\}. \quad (4.21)$$

La red que representa el sistema puede verse en la fig. 11a, en donde cada sitio tiene una energía interna de $(\Delta - 4B)\sigma_z$. La interacción entre primeros vecinos en el eje x es t_x y la interacciones de primeros vecinos en la dirección y es t_y . Vale mencionar que esta red e interacciones no representan a un cristal concreto, solo son una representación matemática para estudiar el modelo en el espacio real.

Para estudiar los estados de borde del modelo, se mantendrá la dirección x como periódica, mientras que consideraremos N sitios en la dirección y , de tal manera que se produzca una interface con el vacío (ver sub panel en fig. 14a). Para representar esto aplicaremos una transformada de Fourier solo en la dirección x ,

$$a_{i,j} = \sum_{k_x} e^{ik_x \cdot r_i} a_{k_x,j}. \quad (4.22)$$

Reemplazando en el Hamiltoniano H_{sq} ,

$$H_{sq} = \sum_{k_x,j} \{ A\sigma_x \sin(k_x) + [\Delta - 2B(2 - \cos(k_x))] \sigma_z \} a_{k_x,j}^\dagger a_{k_x,j} \quad (4.23)$$

$$+ t_y a_{k_x,j+1}^\dagger a_{k_x,j} + h.c. \quad (4.24)$$

Definimos

$$H_0(k_x) = A\sigma_x \sin(k_x) + [\Delta - 2B(2 - \cos(k_x))] \sigma_z \quad (4.25)$$

$$= A\sigma_x \sin(k_x) + \kappa(k_x) \sigma_z \quad (4.26)$$

obteniendo un sistema que consiste en una cadena unidimensional (Fig. 14a) con energía de sitio H_0 y con interacción t_y a primeros vecinos,

$$H_{sq} = \sum_{k_x,j} \left(H_0 a_{k_x,j}^\dagger a_{k_x,j} + [t_y a_{k_x,j+1}^\dagger a_{k_x,j} + h.c.] \right). \quad (4.27)$$

Los estados cuánticos asociados a H_{sq} están graficados en la fig. 14a. El sistema posee dos superficies, las llamaremos superior e inferior. El conjunto de parámetros que se usaron corresponden al sistema en la fase topológica. Existen dos estados que cruzan el nivel de Fermi, cada uno se encuentra en una superficie diferente (fig. 14b).

Para incluir la componente de espín *down*, basta con aplicar la simetría de inversión temporal en H_{sq} . Aparecerán nuevos estados, los pares de Kramer de H_{sq} , los cuales además de un espín opuesto, tendrán un momentum k_x opuesto a los estados de H_{sq} . Esto implica una corriente de espín en la dirección contraria para cada superficie.

La aparición de estos estados conductores en la superficie está directamente relacionada con la fase topológica del bulto. Una manera fácil de ver entender esto es notar que no es posible definir una fase topológica en la interfaz, esto significa que tienen que existir estados -localizados en la interfaz- a los que no se les pueda definir una fase topológica. Los estados que cumplen esta condición corresponden a los metálicos. Los que se pueden observar en diversos aisladores topológicos, como por ejemplo, los conos de Dirac en aisladores topológicos tridimensionales.

Además, el hecho de que los estados de superficie estén protegidos por la simetría de inversión temporal hace que estos sean robustos frente a cualquier tipo de desorden, mientras esta simetría se mantenga.

Si hacemos que nuestra cinta de N celdas de ancho se vuelva muy delgada (es decir N es pequeño), la degeneración en Γ se rompe, abriéndose un *band gap*. Esto se debe a la interacción entre los estados de borde de ambos bordes, hibridizándose de manera similar a lo estudiado en la Sección 3.1. Para estudiar en profundidad esta interacción, escribiremos analíticamente estos estados de borde y como decaen al penetrar en el sistema.

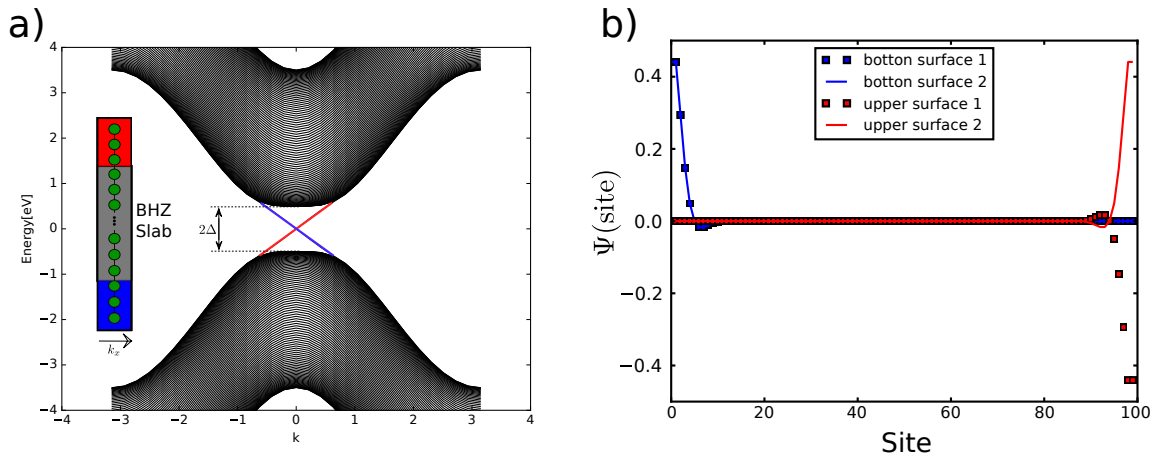


Fig. 14: a) Muestra la estructura de bandas de la superficie para una dirección del espín del modelo BHZ, el esquema de la superficie se encuentra en el sub-panel de a), los parámetros usados corresponden a $A = B = 1$ y $\Delta = 0.5$ y 100 sitios a lo largo de la dirección no periódica, los estados en plomo corresponden a estados de bulto, mientras que los rojos y azules corresponden a estados localizados en las superficies (ver sub-panel). b) Función de onda tomada de puntos muy cercanos a Γ y están asociadas a las bandas del mismo color en a), se observa una localización que decae rápidamente a medida que se penetra en el sistema.

4.4 Estados de borde del modelo BHZ

Para poder obtener las funciones de onda analíticamente [19], consideraremos N sitios y una función de onda general de la forma

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

Usando el Hamiltoniano (4.27) en la ecuación de Schrödinger, obtenemos la siguiente relación de recurrencia:

$$H_0(k_x)\psi_j + t_y\psi_{j+1} + t_y^\dagger\psi_{j-1} = E\psi_j \quad (4.29)$$

De forma general, asumiremos que los estados de borde de este Hamiltoniano decaen a medida que penetran en el material, cumpliendo la siguiente relación

$$\psi_j = \xi^j \psi_0, \quad (4.30)$$

en donde ξ es una constante a determinar. Luego, tomando la ecn. (4.30) y reemplazándola en la ecn. (4.29), obtenemos,

$$\left(H_0(k_x) + t_y\xi + t_y^\dagger \frac{1}{\xi} \right) \psi_0 = E\psi_0. \quad (4.31)$$

Usando las deficiones de H_0 y t_y , usaremos como *ansatz* la siguiente descomposición de la ecuación anterior,

$$A\sigma_x \sin(k_x)\psi_0 = E\psi_0 \quad (4.32)$$

$$\left(\kappa(k_x)\sigma_z + t_y\xi + t_y^\dagger \frac{1}{\xi} \right) \psi_0 = 0 \quad (4.33)$$

La ecuación (4.32) puede resolverse directamente debido a que σ_x tiene autovalores $s = \pm 1$, obteniendo

$$E = \pm A \sin(k_x) \quad (4.34)$$

el *band-gap* entre ambos estados de energía para cada punto k_x es $2A \sin(k_x)$, obteniendo un *band-gap* en el punto $k_x = 0$ de 0, que correspondería a un estado de superficie metálico. Hay que tener en cuenta que las funciones de onda asociadas a estos estados corresponden a los de la matriz de Pauli σ_x y eq. (4.33) debe poder diagonalizarse con esta misma base. Para esto, multiplicaremos (4.33) por σ_z , obteniendo

$$\left(\kappa(k_x) - \frac{A}{2} \left(\frac{1}{\xi} - \xi \right) \sigma_x + B \left(\frac{1}{\xi} + \xi \right) \right) \psi_0 = 0 \quad (4.35)$$

Las auto funciones asociadas a este sistema son

$$|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1) \quad (4.36)$$

$$|x_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, -1) \quad (4.37)$$

Las auto funciones $|x_+\rangle, |x_-\rangle$ están asociados a la matriz σ_x , cuyos autovalores son $s = 1$ y $s = -1$ respectivamente, por lo que la solución encontrada en (4.34) es válida. Ya con esto, podemos encontrar la forma de ξ de (4.35) usando $\sigma_x \psi_0 = s \psi_0$

$$\kappa(k_x) - \frac{A}{2} \left(\frac{1}{\xi} - \xi \right) s + B \left(\frac{1}{\xi} + \xi \right) = 0 \quad (4.38)$$

Si tomamos $s = 1$, la ecuación cuya solución es ξ_1 es

$$\kappa(k_x) - \frac{A}{2} \left(\frac{1}{\xi_1} - \xi_1 \right) + B \left(\frac{1}{\xi_1} + \xi_1 \right) = 0 \quad (4.39)$$

mientras que para $s = -1$, la ecuación cuya solución es ξ_2 es

$$\kappa(k_x) - \frac{A}{2} \left(\frac{1}{\frac{1}{\xi_2}} - \frac{1}{\xi_2} \right) + B \left(\frac{1}{\frac{1}{\xi_2}} + \frac{1}{\xi_2} \right) = 0 \quad (4.40)$$

Si se toma $\xi_2 = 1/\xi_1$ como solución de (4.40) obtendríamos la misma ecuación de (4.39). Despejando ξ_1 de (4.39)

$$\xi_1 = \frac{\kappa(k_x) \pm \sqrt{\kappa(k_x)^2 - 4B^2 + A^2}}{2B + A} \quad (4.41)$$

Para el caso de $k_x = 0$ se tiene

$$\xi_1 = \frac{(\Delta - 4B) \pm \sqrt{(\Delta - 4B)^2 - 4B^2 + A^2}}{2B + A} \quad (4.42)$$

ya con esto se puede construir una solución general tomando en combinación lineal $\xi_{1,2}$ y reemplazando en (4.30)

$$\psi_j = (\alpha \xi_1^j + \beta \xi_2^j) |x_+\rangle + (\alpha' \xi_1^{-j} + \beta' \xi_2^{-j}) |x_-\rangle \quad (4.43)$$

En donde $\alpha, \alpha', \beta, \beta'$ son constantes de normalización del sistema y pueden depender de las condiciones de borde. El valor de ξ puede ser un número complejo con parte real e imaginaria distintos de cero ($a + bi$), esto implica que $\xi_{1,2}^{\pm j}$ es de la forma $|\xi|^j e^{i\theta j}$, en donde $|\xi|^j$ (con $|\xi| = \sqrt{a^2 + b^2}$) representa el decaimiento o crecimiento de la función mientras el término exponencial corresponden a oscilaciones. Además cuando $(\Delta - 4B)^2 \leq (4B^2 - A^2)$, las constantes de decaimiento son iguales

$|\xi_1| = |\xi_2|$, lo que nos permitirá posteriormente trabajar en la interacción entre estados de borde. En [19] se puede ver algunos valores que puede tomar el valor de B para que se cumpla esta condición. Una manera útil para el siguiente capítulo es escribir ec. 4.43 de la forma

$$\psi_j = \left(\alpha e^{\frac{j}{\ln^{-1}(|\xi_1|)} + i\theta_1 j} + \beta e^{\frac{j}{\ln^{-1}(|\xi_2|)} + i\theta_2 j} \right) |x_+\rangle + \quad (4.44)$$

$$+ \left(\alpha' e^{\frac{-j}{\ln^{-1}(|\xi_1|)} - i\theta_1 j} + \beta' e^{\frac{-j}{\ln^{-1}(|\xi_2|)} - i\theta_2 j} \right) |x_-\rangle \quad (4.45)$$

Con θ_1, θ_2 las fases correspondientes cada número complejo $\xi_{1,2}$. Definimos $\epsilon_{1,2}$ como las constantes de decaimiento mayores que uno. Por lo que puede llegar a tomar valores como $\epsilon = \ln^{-1}(|\xi|)$ o $\epsilon = -\ln^{-1}(1/|\xi|)$ dependiendo si $|\xi| > 1$ y $|\xi| < 1$ respectivamente.

Preparando el terreno para el siguiente capítulo, se usarán dos tipos de fases, topológica y trivial, del modelo BHZ, llevándonos a dos posibles casos debido a la combinación de parámetros que usaremos. Para el caso topológico, se cumple $|\xi_1| = |\xi_2| = |\xi|$ y $\theta_1 = -\theta_2 = \theta$, obteniendo

$$\psi_j = \gamma e^{\frac{j}{\ln^{-1}(|\xi|)} + i\theta j} |x_+\rangle + \gamma' e^{\frac{-j}{\ln^{-1}(|\xi|)} - i\theta j} |x_-\rangle \quad (4.46)$$

En cambio, para la fase trivial se da el caso de que ξ es real, por lo que

$$\psi_j = \left(\alpha e^{\frac{j}{\ln^{-1}(\xi_1)}} + \beta e^{\frac{j}{\ln^{-1}(\xi_2)}} \right) |x_+\rangle + \quad (4.47)$$

$$+ \left(\alpha' e^{\frac{-j}{\ln^{-1}(\xi_1)}} + \beta' e^{\frac{-j}{\ln^{-1}(\xi_2)}} \right) |x_-\rangle \quad (4.48)$$

Ya con los cimientos del modelo BHZ descritos, pasaremos a la descripción de la

heteroestructura formada por diferentes fases del modelo BHZ, que posee estados de borde mucha más robustos que el modelo BHZ.

Capítulo 5

Un nuevo modelo: BHZ-SSH

Con una descripción del modelo BHZ en profundidad, podemos pasar a la construcción del modelo BHZ-SSH correspondiente a una red bipartita formada por los estados de borde del modelo BHZ, de manera similar a lo hecho en el capítulo 3. En la sección 5.1 se describirán los efectos de la interfaz entre una fase topológica y trivial del modelo BHZ que tienen sobre los estados de borde topológicamente protegidos. Luego, en la sección 5.2, bajo ciertas aproximaciones se calculará analíticamente la interacción entre los estados de borde cuando el número de sitios es finito. Ya con esto, en la sección 5.3, se construirá una red bipartita a partir de los estados de borde formados por las paredes de dominio para finalmente ver la resistencia de los estados de borde frente a diferentes tipos de desorden e impurezas, en la sección 5.4.

5.1 Paredes de dominio

La existencia de diferentes fases topológicas en el modelo BHZ con solo la variación del parámetro de sitio, permite una fácil construcción de interfaces entre una fase topológica y trivial, formando las llamadas paredes de dominio. Para poder construir esta pared de dominio, tomaremos condiciones de borde periódicas en una dirección (en nuestro caso el eje x) y partir del Hamiltoniano (4.27), proponemos el

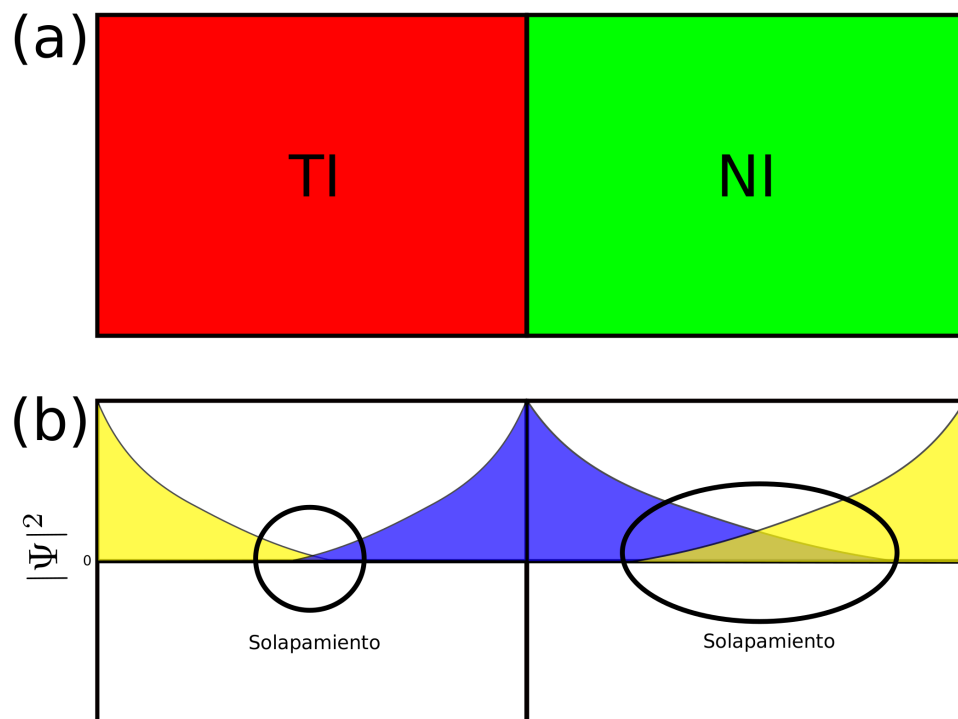


Fig. 15: Esquema de los estados de superficie en presencia de paredes de dominio, en donde el borde izquierdo y derecho es proporcional a $|x_+\rangle$, mientras que en la pared de dominio central la función de onda es proporcional a $|x_-\rangle$.

Hamiltoniano con dos paredes de dominio

$$H_{TI/NI} = \sum_{j=0}^N [H_1 a_j^\dagger a_j + \{t_y a_{j+1}^\dagger a_j + h.c.\}] + \sum_{j=N}^{2N-1} [H_2 a_j^\dagger a_j + \{t_y a_{j+1}^\dagger a_j + h.c.\}]. \quad (5.1)$$

Consideraremos condiciones de borde periódicas, por lo que existe una interacción t_y entre el sitio a_0 y a_{2N-1} . Un esquema de este sistema puede verse en la figura 16a, el recuadro encierra la celda de unidad, que posee dos paredes de dominio. Emergen dos estados de borde que penetran en el material (fig. 15) debido a la transición de fase producida en esos puntos.

Analíticamente, usando como *ansatz* las ecuaciones (4.46) y (4.48), las funciones de onda de las paredes de dominio pueden escribirse como

$$\begin{aligned} \psi_A^\dagger &= \alpha \sum_{j=N}^{2N-1} \alpha e^{-\frac{2N-j}{\epsilon_2^{(1)}}} |x_+\rangle a_j^\dagger \\ &+ \alpha \sum_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{j}{\epsilon_1}} e^{-i\theta_1 j} |x_+\rangle a_j^\dagger \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} \psi_B^\dagger &= \beta \sum_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{N-j}{\epsilon_1}} e^{-i\theta_1 j} |x_-\rangle a_j^\dagger \\ &+ \beta \sum_{j=N}^{2N-1} e^{-\frac{j-N}{\epsilon_2^{(1)}}} |x_-\rangle a_j^\dagger \end{aligned} \quad (5.3)$$

Los subíndices A, B son los índices de las funciones localizados en cada una de las paredes de dominio. Cada suma abarca la parte de la función de onda a la izquierda y derecha de la respectiva pared de dominio. α, β son constantes de normalización. ϵ_1, θ_1 constantes del subsistema topológico y $\epsilon_2^{(1)} > 1$ constantes de decaimiento para el subsistema trivial, no se considero $0 < \epsilon_2^{(2)} < 1$ debido a que no cumple con las condiciones de borde.

Ya con una relación explícita de como son las funciones de onda de una pared de dominio y como penetran en cada sub-sistema, pasaremos a calcular cuantitativamente la interacción de los estados de borde cuando el sistema es lo suficientemente pequeño para que exista solapamiento (en general, si el sistema es finito, siempre existirá solapamiento).

5.2 Interacción entre estados de borde

Para poder construir la red bipartita (infinita, ver figura 15a), hay que considerar que estos estados de borde se pueden solapar, implicando una hibridización entre los estados de borde y abriendo un *gap* en Γ . En principio es posible construir un modelo efectivo de bajas energías con la base mostrada en (5.2). Sin embargo, esta aproximación será válida siempre que las energías de los estados de borde sean mucho más pequeñas que las energías de los estados de bulto asociado al sistema de paredes de dominio, eq. (5.1). Nuestro Hamiltoniano efectivo, $H_{TI/NI}^{eff}$, empleará los estados (5.2) como base. Además, para construir $H_{TI/NI}^{eff}$ nos centraremos explícitamente en las interacciones (solapamientos) en las regiones topológicas y triviales por separado, ver figura 15b, es decir,

$$H_{TI/NI}^{eff} = t_{TI}\psi_A^\dagger\psi_B + t_{NI}\psi_B^\dagger\psi_A + t_{0,A}\psi_A^\dagger\psi_A + t_{0,B}\psi_B^\dagger\psi_B \quad (5.4)$$

En donde

$$t_{0,A} = \sum_{j=0}^{2N-1} \psi_{A,j}^\dagger (H_{TI/NI} \psi_{A,j}) \quad (5.5)$$

$$t_{0,B} = \sum_{j=0}^{2N-1} \psi_{B,j}^\dagger (H_{TI/NI} \psi_{B,j}) \quad (5.6)$$

$$t_{TI} = \sum_{j \in TI} \psi_{A,j}^\dagger (H_{TI/NI} \psi_{B,j}) \quad (5.7)$$

$$t_{NI} = \sum_{j \in NI} \psi_{B,j}^\dagger (H_{TI/NI} \psi_{B,j}) \quad (5.8)$$

Los valores de t_{TI} y t_{NI} pueden calcularse usando (5.2), (5.3) y (5.1), obteniendo para todo k como resultado,

$$\begin{aligned} t_{0,A} &= \alpha^2 \sin(k_x) \left[A e^{-\frac{N-1}{\epsilon_1}} \frac{\sinh(N/\epsilon_1)}{\sinh(1/\epsilon_1)} + A' e^{-\frac{N+1}{\epsilon_2}} \frac{\sinh(N/\epsilon_2)}{\sinh(1/\epsilon_2)} \right] \\ t_{0,B} &= \beta^2 \sin(k_x) \left[A e^{-\frac{N+1}{\epsilon_1}} \frac{\sinh(N/\epsilon_1)}{\sinh(1/\epsilon_1)} + A' e^{-\frac{N-1}{\epsilon_2}} \frac{\sinh(N/\epsilon_2)}{\sinh(1/\epsilon_2)} \right] \\ t_{TI} &= \alpha\beta(N-1)e^{-\frac{N}{\epsilon_1}} \left[\Delta - 2B(2 - \cos(k_x)) + (B + \frac{A}{2})e^{-i\theta_1 - \frac{1}{\epsilon_1}} \right. \\ &\quad \left. + (B - \frac{A}{2})e^{i\theta_1 + \frac{1}{\epsilon_1}} \right] \\ t_{NI} &= \alpha'\beta'(N-1)e^{-\frac{N}{\epsilon_2}} \left[\Delta' - 2B'(2 - \cos(k_x)) + 2B' \cosh(1/\epsilon_2^1) \right. \\ &\quad \left. + A' \sinh(1/\epsilon_2^1) \right] \end{aligned}$$

En donde cada *hopping* t tiene las constantes del sistema topológico o trivial (es decir del modelo BHZ subyacente). Estas interacciones decaen exponencialmente con el tamaño de cada región (N) y dependen de los parámetros de cada región (NI o TI), donde existen los estados de borde. Con este resultados podemos hacer variar las interacciones mediante variaciones de parámetros de cada sub-sistema. Es necesario mencionar que para $k_x = 0$ las interacciones $t_{0,A} = t_{0,B} = 0$, por lo que (5.4) pasa

a tener una forma análoga al modelo SSH, si es que se cumple $t_{TI} < t_{NI}$. Esto implica que es posible construir una red bipartita de paredes de dominio y emular una estructura SSH, replicando sus propiedades, como estados de borde con energía cero protegidos por la simetría quiral.

Vale notar que en el caso de dos paredes de dominio con condiciones de bordes periódicas, nuestra aproximación de restringir t_{TI}, t_{NI} solo a la región TI o NI es bastante cuestionable, dado que una región TI (o NI) esta rodeada por exactamente la misma región NI (o TI) tanto a la izquierda como a la derecha, ver la sección 3.1. Sin embargo, es una excelente aproximación para nuestro objetivo de generalizar el modelo BHZ, ver sección 3.2. Ya definido un Hamiltoniano de un sistema de paredes de dominio con su respectiva interacción, pasaremos a la construcción del modelo BHZ-SSH.

5.3 Red bipartita a partir de modelo BHZ

El modelo BHZ-SSH consistirá en en bloques alternados de modelo BHZ en fase topológica y trivial, tal como lo indica el esquema de la figura 16a. De este modo se forman M paredes de dominio, con un cono de Dirac en cada una de esas paredes de dominio. En este caso, el solapamiento de los estados de pared de dominio (ver fig. 15) conduce al quiebre de la degeneración en Γ . Para crear un modelo SSH creado a partir de la descripción a bajas energías de la súper red expuesta, los sitios corresponderán a cada estado localizado de pared de dominio y los *hoppings* serán el solapamiento de estos estados, formando una red bipartita (fig. 16c).

De manera general, es decir un paso antes de la formulación a bajas energías, tomando (5.1), el Hamiltoniano asociado de M paredes de dominio corresponde a

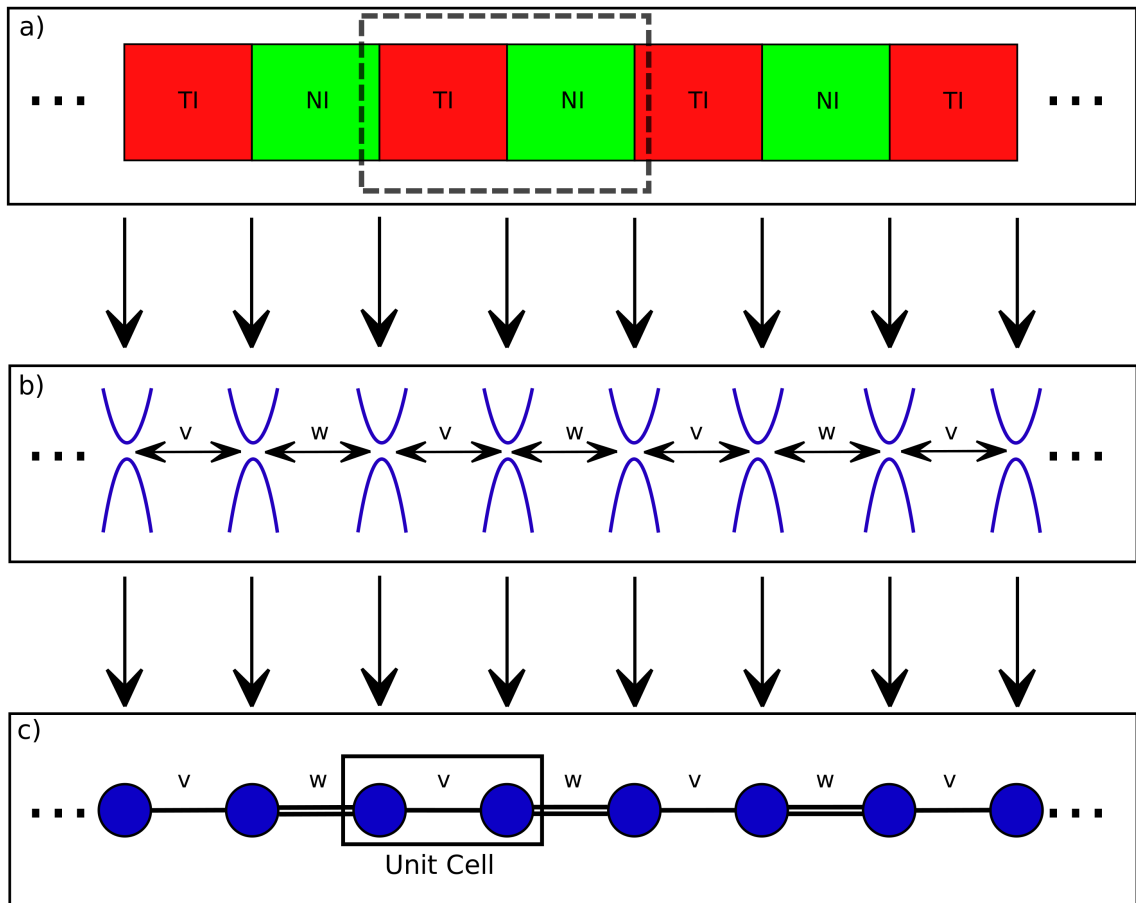


Fig. 16: (a) Esquema del modelo BHZ-SSH, en donde los bloques verdes y rojos corresponden a una fase trivial y topológica del modelo BHZ, respectivamente. El cuadrado que encierra dos bloques corresponde a una celda unidad asociada al modelo BHZ-SSH. (b) Red de estados de bordes (conos de Dirac) que aparecen en las paredes de dominio. Estos estados se hibridizan al interactuar entre ellos. La amplitud de la interacción es v' y w' . (c) Red periódica unidimensional similar al modelo SSH, en el que cada sitio corresponde a un estado de borde BHZ y las interacciones entre primeros vecinos es proporcional a la hibridización entre los estados de borde.

$$H_{BHZ-SSH} = \sum_{m=0}^{M-1} (h_N^{NI}(m) + h_{N'}^{TI}(m)) \quad (5.9)$$

$$h_N^{TI} = \sum_{j=m(N+N')}^{(m+1)N+mN'-1} (H_1 a_j^\dagger a_j + [t_y a_{j+1}^\dagger a_j + h.c.]) \quad (5.10)$$

$$h_{N'}^{NI} = \sum_{j=(m+1)N+mN'}^{(m+1)(N+N')} (H_2 a_j^\dagger a_j + [t_y a_{j+1}^\dagger a_j + h.c.]), \quad (5.11)$$

en donde h_N^{TI} y $h_{N'}^{NI}$ son Hamiltonianos tipo BHZ en su fase topológica (N sitios) y trivial (N' sitios) respectivamente (eq. (4.27)). La celda de unidad de la super-red es un bloque de TI y otro bloque de NI. Para cada valor de m aparecen dos interfaces, por lo que el Hamiltoniano efectivo de bajas energías para $k_x = 0$ es

$$H_{BHZ-SSH}^{eff} = \sum_{m=0}^{M-1} (t' \Psi_{A,m}^\dagger \Psi_{B,m} + v' \Psi_{A,m+1} \Psi_{B,m} + h.c.) \quad (5.12)$$

en donde t', v' tienen la forma mostrada en (5.9). Es relevante mencionar que si $k_x \neq 0$ aparecen energías de sitio en el sistema efectivo que rompe la simetría quirral, abriendo un gap lineal en k_x cerca de $k_x = 0$. El Hamiltoniano efectivo corresponde a uno tipo SSH, que cumple $t' < v'$ y que presenta estados de borde topológicamente protegidos. t', v' pueden ser controlados mediante los parámetros de cada sub sistema (Δ, A, B para la fase topológica y Δ', A', B' para la fase trivial). Las consideraciones que se tomaron para los parámetros son las siguientes: *i*) el sub sistema en fase topológica tiene que tener el mínimo *gap* en Γ , debiéndose cumplir $0 < \Delta < 4B$, *ii*) Para ser consistentes con el cálculo teórico, se consideró $(\Delta - 4B)^2 < 4B^2 - A^2$, teniendo dos longitudes de penetración iguales en la fase topológica (ver eq. (4.45)), *iii*) para la fase trivial, se tienen dos constantes de decaimiento diferentes debido a que $(\Delta' - 4B')^2 > 4B'^2 - A'^2$. La estructura de bandas de un sistema representativo

se encuentra en fig. 17a,b y presenta dos bandas que cruzan el nivel de Fermi, cada una localizada en cada superficie, con dirección y velocidad contraria a la otra (Si se consideran ambas direcciones de espín, estarían degeneradas con dirección de espín contraria), además se logra apreciar las bandas del bulto del sistema de bajas energías $E_g = 2|t' - v'|$. Vale recordar que el *band gap* del modelo BHZ subyacente es Δ , en cada región. Para un punto $k_x = 0$, el módulo cuadrado de las funciones de onda asociadas al modelo BHZ y BHZ-SSH se muestran en fig. 18, ambos con un comportamiento decayente, sin embargo, difieren en el tipo de decaimiento. El modelo BHZ debería tener un decaimiento oscilatorio, pero debido a la combinación de parámetros no se puede apreciar. Por otro lado en el modelo BHZ-SSH se puede apreciar una ligera polarización de sub-red debido al modelo SSH, ya que la función de onda en el borde izquierdo comienza en sitio cero, mientras que en el borde derecho su *peak* se encuentra en la siguiente pared de dominio. Además se observan diferencias en la longitud de penetración, confirmando que los estados del modelo BHZ-SSH penetran mucho mas profundo que en el modelo BHZ pristino (30 vs 5 sitios), lo que tiene gran importancia a la hora de presentar algún tipo de desorden (luego se profundizará en esto). Experimentalmente ya se ha observado este tipo de ordenamiento [67], por lo que este trabajo contribuye a un mayor entendimiento de este tipo de sistemas.

Ya con una descripción de los estados de borde del modelo BHZ-SSH, pasaremos a ver como afecta algunos tipos de desorden e impurezas a estos estados.

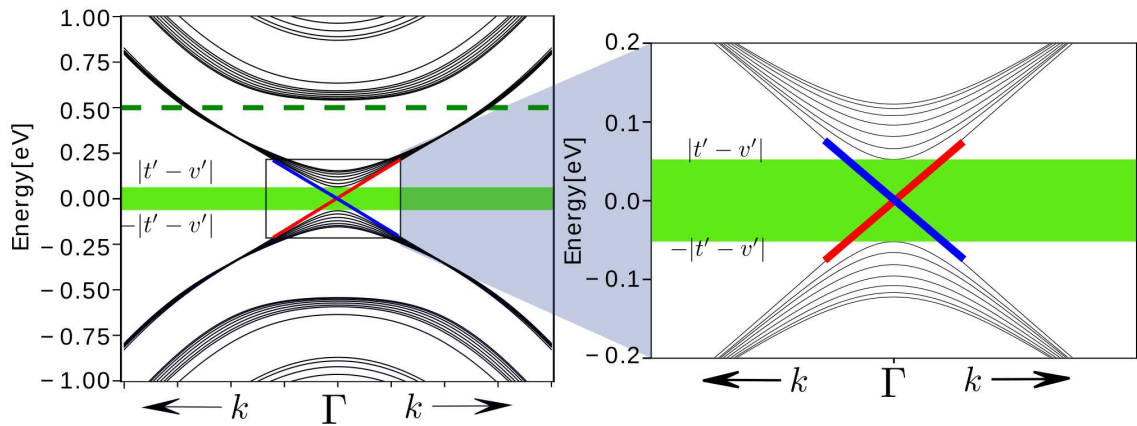


Fig. 17: (a) Estructura de bandas del modelo BHZ-SSH, las bandas en negro muestran bandas tipo bulto mientras que las de colores muestran los estados espín polarizados en cada borde del sistema, la zona verde muestra el *band-gap* del bulto del modelo de bajas energías, que depende de los parámetros t' y v' . Los parámetros usados en el sistema son $A = 0.9, B = 1.25$ para ambos sistemas, $\delta_1 = 0.5$ para la fase topológica y $\delta_2 = -0.5$ para la fase trivial, 80 sitios fueron tomados alternando bloques de 6 sitios para aislador topológico y 4 para aislador trivial, formándose 8 paredes de dominio. La línea punteada en color verde oscuro corresponde al *band-gap* de ambos sub-sistemas por si solo. (b) Estructura de bandas del modelo BHZ-SSH con una resolución mas clara cerca de la energía de fermi. Notar que la escala espacial de ambos sistemas es distinta.

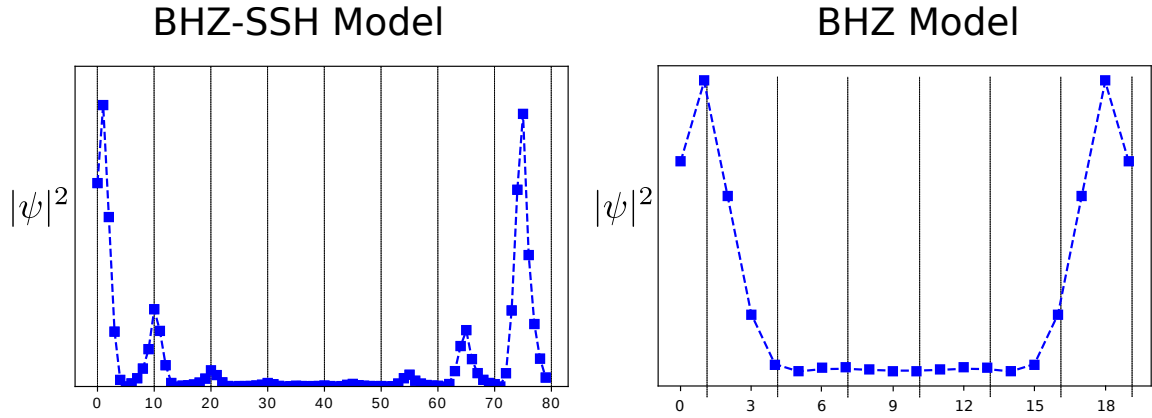


Fig. 18: Comparación entre la función de onda de los estados de borde en Γ ($k = 0.01$) para el modelo BHZ-SSH y el BHZ con las mismas características mostradas en 17, para una dirección de espín (la otra dirección es análoga). Aproximadamente se observa una penetración de 30 sitios para el BHZ-SSH y 5 sitios para el modelo BHZ.

5.4 Desorden en modelo BHZ-SSH

5.4.1 Desorden en el número de capas

La posibilidad de la realización experimental del modelo BHZ-SSH viene de la mano con la precisión con la que se puede hacer crecer la heteroestructura. La posible resistencia de los estados de borde topológicamente protegidos frente al desorden en el tamaño de cada sub sistema puede sugerir la independencia de técnicas muy precisas al momento de construir este sistema.

Para entender como afecta el número de capas de cada sub sistema, tomaremos eq. (5.4) correspondiente al Hamiltoniano efectivo de bajas energías del modelo BHZ-SSH. Los parámetros t_{TI}, t_{NI} son dependientes del número de sitios en la dirección no periódica del modelo BHZ (eq. (5.9)). Aplicar desorden en el número de capas está directamente relacionado con un desorden en t_{TI}, t_{NI} , sin embargo, que como bien se sabe del capítulo 2 y 3 de esta tesis, los estados de borde tipo SSH son resistentes frente a desorden fuera de la diagonal y no debería afectarlo de forma significativa.

Para demostrar esta afirmación numéricamente, usaremos eq. (5.9), en donde cada sub sistema es dependiente del número de capas (N, N'). Los valores de N, N' variaran aleatoriamente entre 5 y 14 capas ($N, N' \in [5, 14]$), en una distribución uniforme. Para este tipo de desorden no es necesario considerar ambas direcciones de espín, ya que ambos tienen el mismo comportamiento y la estructura de bandas es similar, salvo con diferencias en la polarización de espín y velocidad (se mantiene la simetría de inversión temporal).

Dado que este tipo de desorden no rompe la periodicidad (en k_x), es directo comparar la estructura de bandas de un sistema prístino (Fig. 17) con $N, N' = 10$, con respecto a un sistema desordenado (Fig. 19). Los estados de borde se mantienen sin cambios mayores, confirmando que un desorden fuera de la diagonal en el modelo eq. (5.4) no tiene mayor impacto (debido a una protección proveniente de la red bipartita del modelo SSH). Por otro lado, en el gap provenientes de los estados de bulto de este modelo (zona verde de fig. 17) existen diferencias, ya que las variaciones del número de sitios afecta directamente a este valor (en el caso prístino el gap es $2|t' - v'|$).

5.4.2 Impurezas magnético

La protección topológica de los estados de borde del modelo BHZ hace que cualquier defecto que no sea magnético no los afecte de gran manera, por lo que defectos simples (quitar un sitio de la red) no tendrán grandes consecuencias en los estados de borde del modelo BHZ-SSH. Sin embargo, estos estados de borde tienen una gran sensibilidad frente a impurezas o defectos que produzcan algún tipo de momento magnético, ya que se rompe la simetría protectora. Debido a esto, nuestro siguiente objetivo es ver como actúa este tipo de defecto en nuestro modelo de super-redes.

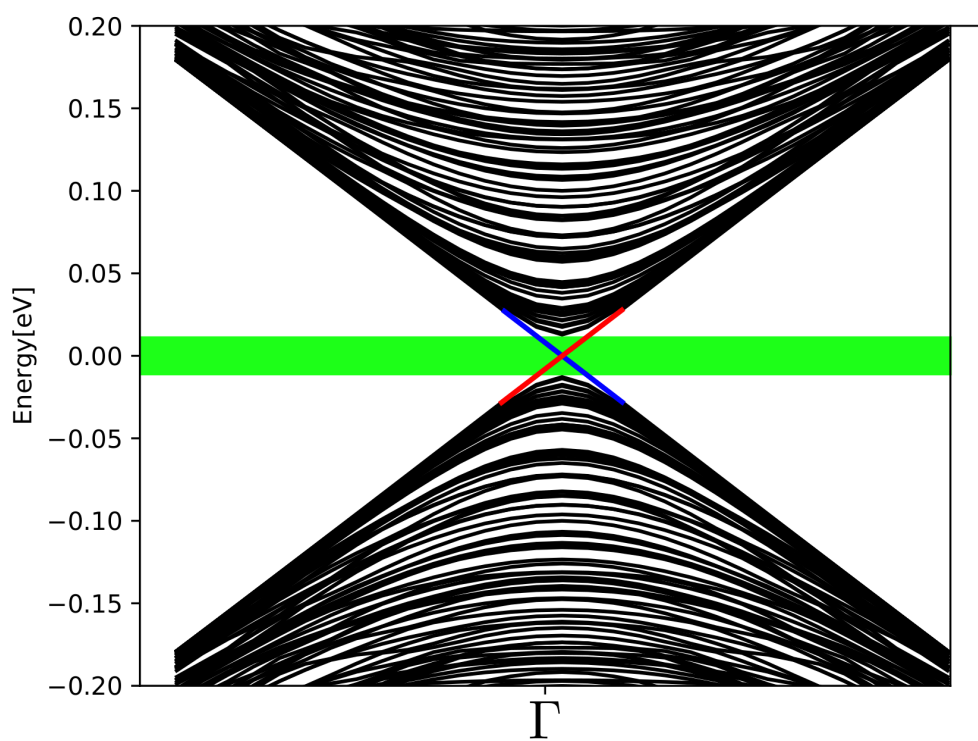


Fig. 19: Estructura de bandas del modelo BHZ-SSH frente a desorden en el número de capas en cada sub sistemas de la heteroestructura. Los parámetros de cada subsistema son los mismo de **17** y el número de capas N, N' es aleatorio entre 5 y 14 en una distribución uniforme.

Para realizarlo, es necesario considerar ambas direcciones de espín, pues tendrán un comportamiento diferente. La manera en que se trabajará este defecto consistirá en tomar una super celda de $x \times y$ sitios del modelo BHZ-SSH, si uno de estos sitios es elegido para ser considerado como defecto magnético, entonces se le agregará una interacción entre ambos espines proporcional a σ_x , rompiendo localmente la simetría de inversión temporal. Para comparar el modelo BHZ-SSH con el modelo BHZ original, tomaremos super celdas de iguales proporciones y se verá los efectos que tiene este tipo de desorden en los estados de borde mediante la conductancia.

A la heteroestructura así construidas, se le colocarán dos contactos en cada lado (fig. 20), de tal manera que en los bordes superior e inferior aparezcan estados de borde metálicos. Como primera aproximación, los contactos tendrán la misma estructura cristalina del modelo BHZ-SSH o BHZ usado (pero sin desorden magnético). El tamaño de estas celdas será lo suficientemente grande para que la aleatoriedad de los defectos sea representativa.

Para poder caracterizar los efectos de los defectos magnéticos, usaremos la conductancia diferencial, que puede encontrarse mediante la formula de Landauer [68]

$$G_{ab} = \frac{e^2}{h} \sum_{n \in a, m \in b} |S_{nm}|^2 \quad (5.13)$$

en donde a y b corresponden a dos electrodos y S_{nm} es la matriz de *scattering*, que puede calcularse usando la formulación de la función de onda del problema de *scattering* mostrada en [69].

Para mostrar como se calcula esta matriz, consideraremos solo un electrodo (ya que muchos contactos pueden ser considerados como un solo contacto efectivo) y una zona de *scattering* (estructura a la que se le quiere calcular la conductancia). El

Hamiltoniano asociado a ambos sistemas es de la forma

$$\begin{pmatrix} \ddots & V_L & & & \\ V_L^\dagger & H_L & V_L & & \\ & V_L^\dagger & H_L & V_{LS} & \\ & & V_{LS}^\dagger & H_s & \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

En donde H_s es el Hamiltoniano de la región de *scattering*, H_L es el Hamiltoniano de la celda de unidad del electrodo, V_L conecta las celdas de unidad del electrodo y V_{LS} conecta el electrodo con la región de *scattering*. Se define una función de onda de un sistema infinito de la forma $(\dots, \Psi^L(2), \Psi^L(1), \Psi^S)$, en donde Ψ^S es la función de onda de la región de *scattering* y $\Psi^L(i)$ la función de onda en el electrodo y tomando en cuenta la simetría traslacional del electrodo ($\Psi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n), \phi_n = (\lambda_n)^j \phi_0$) se obtiene la siguiente relación de recurrencia para el electrodo

$$(H_L + V_L \lambda_n^{-1} + V_L^\dagger \lambda_n) \phi_0 = E \phi_0 \quad (5.15)$$

Hay que destacar que los estados con $|\lambda_n| < 1$ decaen y para $|\lambda| = 1$ son ondas que se propagan. Luego, un estado general de *scattering* en el electrodo es de la forma

$$\Phi_n(i) = \phi_n^{in}(i) + \sum_m S_{mn} \phi_m^{out}(i) + \sum_p S'_{pn} \phi_p^{ev}(i) \quad (5.16)$$

En donde $\phi_n^{in}(i), \phi_m^{out}, \phi_p^{ev}$ son modos incidentes, salientes, y evanescentes. Si se tiene la función de onda de la región de *scattering*, ϕ^S , junto a (5.16) y resolviendo la ecuación de tight-binding $H\psi = \epsilon\psi$ para el Hamiltoniano (5.14), puede encontrarse la matriz de *scattering* S_{mn} .

Los resultados de la conductancia para ambos modelos se encuentran en la fig. 21. Para los sistemas sin desorden, aparece un valor constante de $\frac{e^2}{h}$ para energías por debajo del *band gap*, $|t - v|$ (ó $|t' - v'|$), debido a los dos estados metálicos de borde. El incremento de la conductancia para mayores energías se debe a la aparición de los estados de bulto. Como el sistema esta bajo condiciones ideales, se puede diferenciar muy claramente la contribución de los estados de bulto y los de superficie.

Frente a un valor finito de este tipo de desorden, en el modelo BHZ, ya no es clara la diferencia entre la contribución a la conductancia de los estados de borde y los estados de bulto. Para un porcentaje de impurezas magnéticas de 0.1%, el ruido permite apreciar un valor de la conductancia oscilando alrededor de $G_{a,b} \sim \frac{e^2}{h}$. Aumentando el valor del desorden, se pierde casi totalmente la conductancia, producto de la perdida de la protección topológica en los estados de borde. Por otro lado, en el modelo BHZ-SSH, a medida que el porcentaje de impurezas magnéticas, el promedio de $G_{a,b}$ disminuye. Sin embargo, se esta disminución es mucho menos pronunciada que en el modelo BHZ. Se observa que en una pequeña zona a bajas energías, no existen estados que contribuyan a la conductancia y además crece a medida que aumentamos el desorden. A una concentración de impurezas magnéticas del 0.1%, el promedio de la conductancia es cercano a $G_{a,b} = \frac{2e^2}{h}$, aún logrando diferenciar de buena manera los estados de borde con los de bulto. Si bien a 0.5% de desorden la diferenciación se vuelve más difícil, en promedio sigue estando mas cercana al valor de $G_{a,b} = 2$ que en el modelo BHZ.

En general, se puede concluir con respecto a la conductancia, que la heteroestructura que se construyó en esta tesis posee estados de borde mucho mas estables frente a un desorden que rompa la simetría de inversión temporal, en comparación al modelo BHZ común. Lo que da el primer paso para la construcción de un sistema tipo ais-

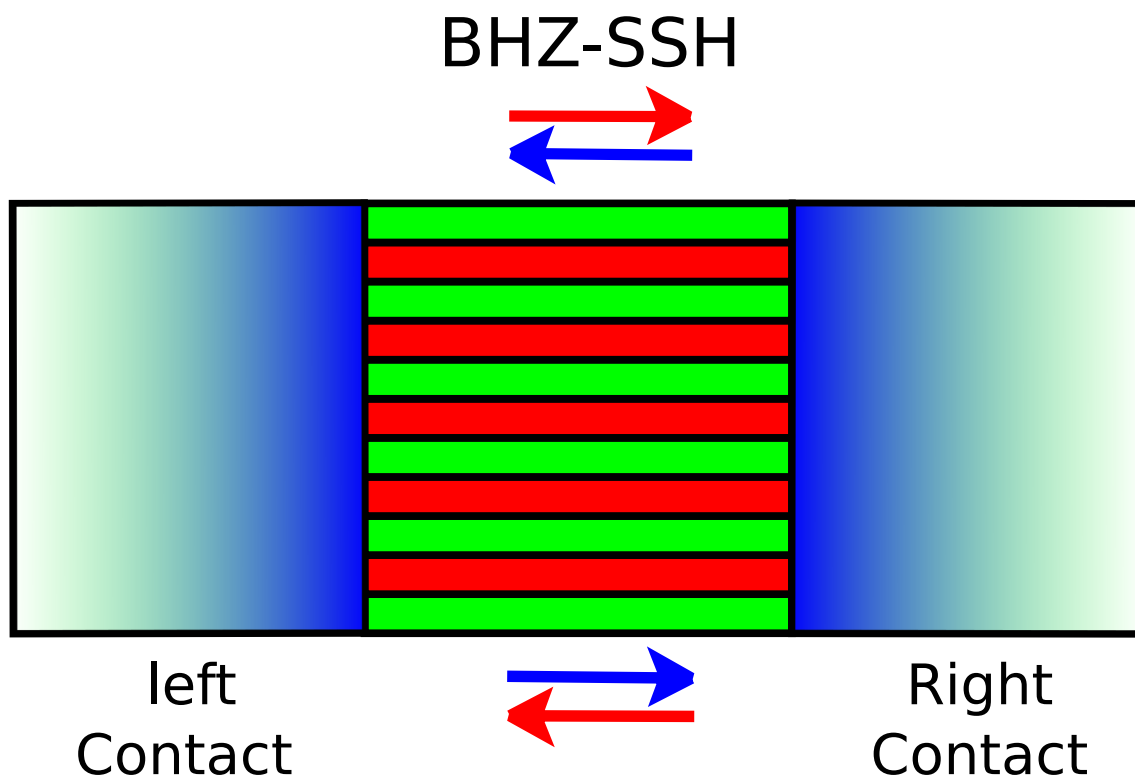


Fig. 20: Esquema del sistema para cálculos de conductancia, en el centro se tiene el modelo BHZ-SSH en donde se ven los estados de borde espín polarizados y los contactos ideales (mismo material) en la parte izquierda y derecha de la heteroestructura

lador topológico realista, en el que la diferenciación entre los estados de borde y bulk en los experimentos de transporte eléctrico sean más claras. Es decir, una concentración baja de defectos, tales como vacancias o impurezas con momento magnético finito, no deberían dominar el transporte eléctrico para un sistema como el BHZ-SSH.

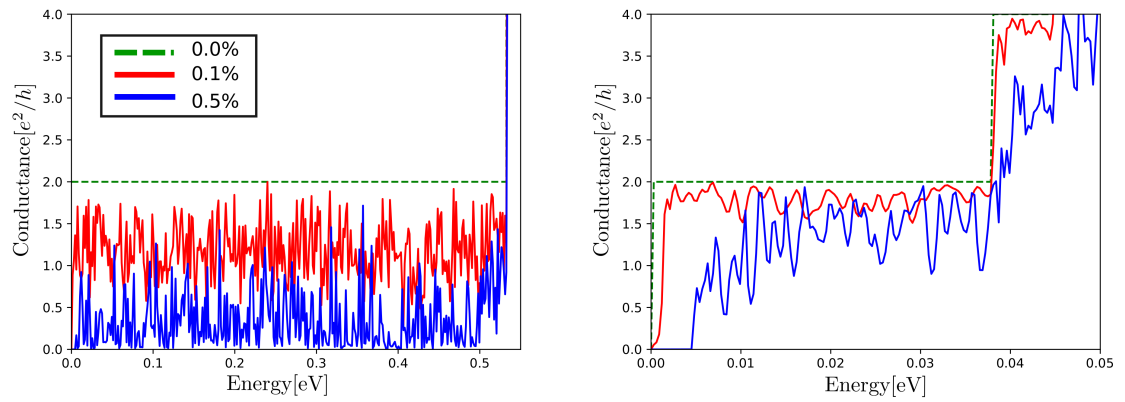


Fig. 21: Comparación entre conductancia del modelo BHZ (panel izquierdo) y modelo BHZ-SSH (panel derecho) para 0% ,0.1%(960 sitios) y 0.5%(4800 sitios) de desorden que rompe simetría de inversión temporal. Para ambos sistemas se usó una super-celda de 400 sitios en la dirección en donde se formarán los estados de borde y 2400 sitios en la dirección perpendicular a esta. los parámetros para ambos sistemas son iguales a [17](#)

Conclusión

El objetivo de esta tesis fue la modelación de heteroestructuras con estados de borde metálicos, topológicamente protegidos, a partir de diferentes fases de subsistemas topológicos.

En la primera parte (capítulos 2 y 3) introducimos el modelo SSH y sus distintas fases topológicas en el bulto, regidas por un número topológico llamado *winding number*. Demostramos anaáliticamente que el sistema posee estados de energía cero y que decaen exponencialmente con una constante de decaimiento proporcional a $\ln^{-1}(t'/t)$ y que la simetría quirál esta directamente relacionada con la aparición de estados de energía cero, ofreciendo una protección frente a cualquier desorden que no rompa esta simetría. Luego logramos construir una heteroestructura formada por una red paredes de dominio en el modelo SSH, que consistía en tomar la hibridización de los estados topológicamente protegidos por simetría quirál en cada pared de dominio como una pseudo-interacción, para luego conformar una red, la que a bajas energías, resulto ser análoga al modelo SSH original. Esta heteroestructura, al igual que en el modelo SSH, tiene estados de energía cero, pero se diferencian del modelo SSH original al posser un longitud de localización mucho mayor, además son mucho más robustos frente al desorden, especialmente frente a desorden que rompe la simetría quirál. Esto sugiere una nueva vía para la construcción de nuevos sistemas con estados de borde metálicos mucho más resistentes.

Para la segunda parte de esta tesis (capítulos 4 y 5), el objetivo fue generalizar lo realizado en los capítulos anteriores para un modelo más cercano a la realidad desde un punto de vista experimental, el modelo BHZ. Un aislador topológico que presenta estados de borde metálicos tipo Dirac, topológicamente protegidos por simetría de inversión temporal. Al igual que en el modelo SSH, cuando el sistema es finito existe una hibridización de los estados de borde, se calculó analíticamente este valor y se creó una heteroestructura compuesta por el modelo BHZ en su fase topológica y trivial alternadas. Se construyó un modelo de bajas energías usando esta interacción efectiva y se conformó una red tipo SSH. En este caso, aparecen estados de borde con energía cero, que están protegidos por simetría de inversión temporal y simetría quiral y además se extienden mucho más a través de la heteroestructura en comparación al modelo BHZ común. Se le aplicaron diferentes tipos de desorden, el primero consistía en un desorden en el número de capas de cada sub sistema. Se demostró que no afecta a los estados de borde debido a que este desorden no rompe simetría quiral. Esta resistencia es particularmente importante, ya que no es necesaria una técnica muy precisa a la hora de hacerla crecer en un laboratorio. Otro tipo de desorden interesante es el que rompe simetría de inversión temporal, se calculó la conductancia y los resultados se compararon con un modelo BHZ original, obteniendo que la heteroestructura sugerida en esta tesis es mucho más resistente frente a este tipo de desorden.

La importante de que nuestro sistema sea más resistente al desorden radica en que en aisladores topológicos tridimensionales, las contribuciones debido a defectos o impurezas en el bulto a la conductividad empañan la contribución de los estados de borde. Por lo que esta heteroestructura aportaría a solucionar este problema, ya que el agregar una simetría extra a la protección de los estados de borde, puede mejorar

las mediciones experimentales del transporte eléctrico en el borde.

Trabajos realizados durante la tesis

A continuación se nombrarán algunos de los trabajos en los que se ha trabajado a lo largo de los años del doctorado. Con respecto a la tesis:

- Martín Pendás, Angel; Contreras-García, Julia; Pinilla, Fernanda; **Mella, José Daniel**; Cárdenas, Carlos; Muñoz, Francisco (2019): A Chemical Theory of Topological Insulators. ChemRxiv. Preprint. (En referato para la revista (Chemical Communication))
- Munoz, F., Pinilla, F., **Mella, J.** & Molina, M. I. Topological properties of a bipartite lattice of domain wall states. Scientific Reports 8, 17330 (2018).
- J.D. Mella, Luis Foa, F. Munoz, Bipartite lattice of the BHZ model (En preparación)

además se realizaron colaboraciones en otros temas de la materia condensada

- Valencia, F., **Mella, J. D.**, Gonzalez, R. I., Kiwi, M., & Bringa, E. M. (2015). Confinement effects in irradiation of nanocrystalline diamond. Carbon, 93, 458-464.
- González, R. I., Valencia, F., Mella, J., Van Duin, A. C., So, K. P., Li, J., ... & Bringa, E. M. (2016). Metal-nanotube composites as radiation resistant materials. Applied Physics Letters, 109(3), 033108.

- Gonzalez, R. I., **Mella, J.**, Diaz, P., Allende, S., Vogel, E., Cardenas, C., & Munoz, F. (2019). Hematene: a 2D magnetic material in van der Waals or non-van der Waals heterostructures. *2D Materials*, 6, 045002 (2019).
- **J.D. Mella**, S. Singh, F. Munoz and A. H. Romero, New 2D chalcogenides materials for high-efficiency water splitting (En preparación)

Bibliografía

- [1] Qi, X.-L. & Zhang, S.-C. The quantum spin hall effect and topological insulators. *arXiv preprint arXiv:1001.1602* (2010).
- [2] Hasan, M. Z. & Kane, C. L. Colloquium: topological insulators. *Reviews of modern physics* **82**, 3045 (2010).
- [3] Mermin, N. D. & Wagner, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133–1136 (1966). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.1133>.
- [4] Davis, J. C., Amar, A., Pekola, J. P. & Packard, R. E. Superfluidity of ^3He films. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 302–304 (1988). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.60.302>.
- [5] Kosterlitz, J. M. & Thouless, D. J. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. (application of dislocation theory). *Journal of Physics C: Solid State Physics* **5**, L124–L126 (1972). URL <https://doi.org/10.1088%2F0022-3719%2F5%2F11%2F002>.

- [6] Klitzing, K. v., Dorda, G. & Pepper, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Physical Review Letters* **45**, 494 (1980).
- [7] Thouless, D. J., Kohmoto, M., Nightingale, M. P. & den Nijs, M. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters* **49**, 405 (1982).
- [8] Laughlin, R. B. Quantized hall conductivity in two dimensions. *Physical Review B* **23**, 5632 (1981).
- [9] Haldane, F. D. M. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the” parity anomaly”. *Physical Review Letters* **61**, 2015 (1988).
- [10] Novoselov, K. S. *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films. *science* **306**, 666–669 (2004).
- [11] Kane, C. L. & Mele, E. J. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical review letters* **95**, 226801 (2005).
- [12] Wu, C., Bernevig, B. A. & Zhang, S.-C. Helical liquid and the edge of quantum spin hall systems. *Physical review letters* **96**, 106401 (2006).
- [13] Boettger, J. & Trickey, S. First-principles calculation of the spin-orbit splitting in graphene. *Physical Review B* **75**, 121402 (2007).
- [14] Huertas-Hernando, D., Guinea, F. & Brataas, A. Spin-orbit coupling in curved graphene, fullerenes, nanotubes, and nanotube caps. *Physical Review B* **74**, 155426 (2006).

- [15] Bernevig, B. A., Hughes, T. L. & Zhang, S.-C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science* **314**, 1757–1761 (2006).
- [16] Dai, X., Hughes, T. L., Qi, X.-L., Fang, Z. & Zhang, S.-C. Helical edge and surface states in hgte quantum wells and bulk insulators. *Physical Review B* **77**, 125319 (2008).
- [17] König, M. *et al.* Quantum spin hall insulator state in hgte quantum wells. *Science* **318**, 766–770 (2007).
- [18] König, M. *et al.* The quantum spin hall effect: theory and experiment. *Journal of the Physical Society of Japan* **77**, 031007 (2008).
- [19] Imura, K.-I., Yamakage, A., Mao, S., Hotta, A. & Kuramoto, Y. Zigzag edge modes in a z_2 topological insulator: reentrance and completely flat spectrum. *Physical Review B* **82**, 085118 (2010).
- [20] Liu, C., Hughes, T. L., Qi, X.-L., Wang, K. & Zhang, S.-C. Quantum spin hall effect in inverted type-ii semiconductors. *Physical review letters* **100**, 236601 (2008).
- [21] Kane, C. L. & Mele, E. J. Z_2 topological order and the quantum spin hall effect. *Physical review letters* **95**, 146802 (2005).
- [22] Moore, J. E. & Balents, L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Physical Review B* **75**, 121306 (2007).
- [23] Roy, R. Topological phases and the quantum spin hall effect in three dimensions. *Physical Review B* **79**, 195322 (2009).

- [24] Fu, L., Kane, C. L. & Mele, E. J. Topological insulators in three dimensions. *Physical review letters* **98**, 106803 (2007).
- [25] Fu, L. & Kane, C. L. Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B* **76**, 045302 (2007).
- [26] Hsieh, D. *et al.* A topological dirac insulator in a quantum spin hall phase. *Nature* **452**, 970 (2008).
- [27] Xia, Y. *et al.* Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface. *Nature physics* **5**, 398 (2009).
- [28] Zhang, H. *et al.* Topological insulators in bi 2 se 3, bi 2 te 3 and sb 2 te 3 with a single dirac cone on the surface. *Nature physics* **5**, 438 (2009).
- [29] Berry, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**, 45–57 (1984).
- [30] Hatsugai, Y. Chern number and edge states in the integer quantum hall effect. *Physical review letters* **71**, 3697 (1993).
- [31] Su, W. P., Schrieffer, J. R. & Heeger, A. J. Solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1698–1701 (1979). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.42.1698>.
- [32] Fu, L. & Kane, C. L. Time reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump. *Phys. Rev. B* **74**, 195312 (2006). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.195312>.

- [33] Sheng, D. N., Weng, Z. Y., Sheng, L. & Haldane, F. D. M. Quantum spin-hall effect and topologically invariant chern numbers. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 036808 (2006). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.036808>.
- [34] Fu, L. & Kane, C. L. Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.045302>.
- [35] Dornhaus, R., Nimtz, G. & Schlicht, B. *Narrow-gap semiconductors*, vol. 98 (Springer, 2006).
- [36] Hsieh, D. *et al.* Observation of unconventional quantum spin textures in topological insulators. *Science* **323**, 919–922 (2009).
- [37] Nishide, A. *et al.* Direct mapping of the spin-filtered surface bands of a three-dimensional quantum spin hall insulator. *Phys. Rev. B* **81**, 041309 (2010). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.041309>.
- [38] Roushan, P. *et al.* Topological surface states protected from backscattering by chiral spin texture. *Nature* **460**, 1106 (2009).
- [39] Noh, H.-J. *et al.* Spin-orbit interaction effect in the electronic structure of Bi_2Te_3 observed by angle-resolved photoemission spectroscopy. *EPL (Europhysics Letters)* **81**, 57006 (2008).
- [40] Ran, Y., Zhang, Y. & Vishwanath, A. One-dimensional topologically protected modes in topological insulators with lattice dislocations. *Nature Physics* **5**, 298 (2009).

- [41] Chen, Y. *et al.* Experimental realization of a three-dimensional topological insulator, Bi_2Te_3 . *science* **325**, 178–181 (2009).
- [42] Hsieh, D. *et al.* A tunable topological insulator in the spin helical dirac transport regime. *Nature* **460**, 1101 (2009).
- [43] Hor, Y. S. *et al.* Development of ferromagnetism in the doped topological insulator $\text{Bi}_{2-x}\text{Mn}_x\text{Te}_3$. *Phys. Rev. B* **81**, 195203 (2010). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.195203>.
- [44] Xia, Y. *et al.* Topological control: Systematic control of topological insulator dirac fermion density on the surface of Bi_2Te_3 . *arXiv preprint arXiv:0907.3089* (2009).
- [45] Qi, X.-L., Hughes, T. L. & Zhang, S.-C. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. *Physical Review B* **78**, 195424 (2008).
- [46] Essin, A. M., Moore, J. E. & Vanderbilt, D. Magnetoelectric polarizability and axion electrodynamics in crystalline insulators. *Physical review letters* **102**, 146805 (2009).
- [47] Fu, L. & Kane, C. L. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Physical review letters* **100**, 096407 (2008).
- [48] Jia, S. *et al.* Low-carrier-concentration crystals of the topological insulator $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$. *Physical Review B* **84**, 235206 (2011).

- [49] Zhang, G. *et al.* Growth of topological insulator Bi_2Se_3 thin films on SrTiO_3 with large tunability in chemical potential. *Advanced Functional Materials* **21**, 2351–2355 (2011).
- [50] Hofer, K. *et al.* Intrinsic conduction through topological surface states of insulating Bi_2Te_3 epitaxial thin films. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **111**, 14979–14984 (2014).
- [51] Peng, H. *et al.* Aharonov–Bohm interference in topological insulator nanoribbons. *Nature materials* **9**, 225 (2010).
- [52] Durand, C. *et al.* Differentiation of surface and bulk conductivities in topological insulators via four-probe spectroscopy. *Nano letters* **16**, 2213–2220 (2016).
- [53] Heeger, A. J. Nobel lecture: Semiconducting and metallic polymers: The fourth generation of polymeric materials. *Reviews of Modern Physics* **73**, 681 (2001).
- [54] Su, W., Schrieffer, J. & Heeger, A. J. Solitons in polyacetylene. *Physical review letters* **42**, 1698 (1979).
- [55] Zak, J. Berry’s phase for energy bands in solids. *Physical review letters* **62**, 2747 (1989).
- [56] Martin Pendas, A. *et al.* A chemical theory of topological insulator. *ChemRxiv* (2019).
- [57] Lin-Liu, Y. & Maki, K. Two-soliton interaction energy and the soliton lattice in polyacetylene. *Physical Review B* **22**, 5754 (1980).

- [58] Pérez-González, B., Bello, M., Gómez-León, Á. & Platero, G. Ssh model with long-range hoppings: topology, driving and disorder. *arXiv preprint arXiv:1802.03973* (2018).
- [59] Edwards, J. & Thouless, D. Numerical studies of localization in disordered systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **5**, 807 (1972).
- [60] Su, W. & Schrieffer, J. Fractionally charged excitations in charge-density-wave systems with commensurability 3. *Physical Review Letters* **46**, 738 (1981).
- [61] Munoz, F., Pinilla, F., Mella, J. & Molina, M. I. Topological properties of a bipartite lattice of domain wall states. *Scientific reports* **8**, 17330 (2018).
- [62] Dirac, P. A. M. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **117**, 610–624 (1928).
- [63] Jackiw, R. & Rebbi, C. Solitons with fermion number 1/2. *Physical Review D* **13**, 3398 (1976).
- [64] Shen, S.-Q., Shan, W.-Y. & Lu, H.-Z. Topological insulator and the dirac equation. In *Spin*, vol. 1, 33–44 (World Scientific, 2011).
- [65] Min, H. *et al.* Intrinsic and rashba spin-orbit interactions in graphene sheets. *Phys. Rev. B* **74**, 165310 (2006). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.74.165310>.
- [66] Yao, Y., Ye, F., Qi, X.-L., Zhang, S.-C. & Fang, Z. Spin-orbit gap of graphene: First-principles calculations. *Physical Review B* **75**, 041401 (2007).

- [67] Belopolski, I. *et al.* A novel artificial condensed matter lattice and a new platform for one-dimensional topological phases. *Science advances* **3**, e1501692 (2017).
- [68] Landauer, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM Journal of Research and Development* **1**, 223–231 (1957).
- [69] Groth, C. W., Wimmer, M., Akhmerov, A. R. & Waintal, X. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics* **16**, 063065 (2014).