



UNIVERSIDAD DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

NUEVAS MANIFESTACIONES DE ESTADOS TOPOLÓGICOS DE LA MATERIA

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE  
DOCTOR EN CIENCIAS, MENCIÓN FÍSICA

ESTEBAN ALONSO RODRÍGUEZ MENA

PROFESOR GUÍA:  
LUIS E. F. FOÀ TORRES

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:  
MÓNICA PACHECO DOLL  
HERNÁN L. CALVO

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por ANID PFCHA, Doctorado nacional 21171229, FONDECYT Regular 1211038 y FONDECYT Regular 1170917

SANTIAGO DE CHILE  
2021

RESUMEN DE LA TESIS PARA OPTAR  
AL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS, MENCIÓN FÍSICA  
POR: ESTEBAN ALONSO RODRÍGUEZ MENA  
FECHA: 2021  
PROF. GUÍA: LUIS E. F. FOÀ TORRES

## NUEVAS MANIFESTACIONES DE ESTADOS TOPOLÓGICOS DE LA MATERIA

Un aislante topológico es un material que se comporta como un aislante en su interior pero que presenta estados de borde o superficie conductores que son robustos a perturbaciones externas y defectos en el material. Estos estados peculiares, llamados estados topológicos, pueden ser intrínsecos al material o estar inducidos por potenciales externos, como un campo magnético o incluso luz. El último caso corresponde a los llamados aislantes topológicos de Floquet, una de las encarnaciones más recientes de las fases topológicas, ahora fuera del equilibrio debido a la iluminación intensa.

Utilizando herramientas teóricas y numéricas, en esta tesis estudiamos los efectos de potenciales dependientes del tiempo en diversos materiales y sistemas, incluyendo materia ultra fría o redes ópticas. Conjugando herramientas y conceptos de estados topológicos, teoría de Floquet y transporte cuántico, exploramos firmas distintivas de nuevas fases topológicas únicas en estos sistemas forzados, así como también cómo manipular estados topológicos nativos usando luz.

Las contribuciones originales que componen esta tesis pueden ser separadas en dos partes conceptualmente diferentes. La primera parte, apunta a usar la luz para controlar los estados topológicos intrínsecos de un material bidimensional producidos por la interacción spin-órbita. La robustez antes mencionada de los estados de borde topológicos es quizás una de las características más interesantes de estos sistemas, aunque, al mismo tiempo, impone nuevos desafíos si se busca controlar su respuesta. En efecto, perturbaciones o defectos, comúnmente utilizados a tal efecto son ineficaces. En esta tesis mostramos cómo es posible aprovechar el juego entre los estados topológicos nativos del sistema, la interacción con luz intensa y el manejo de su polarización, y el acoplamiento spin-órbita tipo Rashba, para lograr: i) la generación de corrientes polarizadas en spin a voltaje nulo, ii) el control de procesos de inversión de espín (espín-flip).

La segunda parte atañe al estudio de firmas topológicas en el transporte cuántico de aislantes topológicos de Floquet-Anderson. Esta fase, únicamente accesible en sistemas periódicos, está definida por la propiedad de que todos los estados que forman las bandas de un sistema quedan completamente localizados por el desorden al tiempo que los estados de borde topológicos persisten, condición imposible en sistemas estáticos debido al llamado argumento de Halperin. Estudiamos el transporte cuántico tanto en la brecha móvil como en las bandas, mostrando que a pesar de la localización de los estados en las bandas en presencia de desorden, los estados topológicos mantienen su conducción.

## NEW MANIFESTATIONS OF TOPOLOGICAL STATES OF MATTER

A topological insulator is a material that behaves as an insulator in its interior but exhibits conducting edge states or surface states that are robust against external perturbations and material defects. These peculiar states, called topological states, can be intrinsic to the material or be induced by external potentials, such as magnetic fields or even light. The latter belongs to the class known as Floquet topological insulators, one of the newest incarnations of the topological phases, now out of equilibrium due to intense illumination.

In this thesis, using theoretical and numerical techniques, we study the effects of time-periodic potentials over diverse materials and systems, including ultracold matter or optical lattices. Employing tools and concepts such as topological states, Floquet theory, and quantum transport, we explore distinctive signatures of new topological phases, unique to driven systems, as well as how to manipulate native topological states using light.

The original contributions in this thesis can be separated into two different conceptual parts. The first part points to the control of the topological states intrinsic to a bi-dimensional material resulting from the spin-orbit coupling. The robustness of the edge states is perhaps one of the most remarkable features of these systems. But this robustness poses a challenge if one wants to control their response. Indeed, perturbations or defects, commonly used for that aim, are now mostly inefficient. In this thesis, we show how it is possible to harness the interplay between the native topological states of the systems, the interaction with intense illumination and the tuning of its polarization, and Rashba spin-orbit coupling to achieve: i) the generation of spin-polarized currents at zero bias; and ii) the control of the process of spin-flip.

The second part concerns the study of topological signatures in the quantum transport of the anomalous Floquet-Anderson topological insulator. This phase, unique to driven systems, has a distinctive feature that all the states forming the bands in a system become localized while the topological edge states persist, a behavior impossible to achieve in static systems due to Halperin's argument. We explicitly study quantum transport within the mobility gap as well as within the bands, showing that even though the states in the bands preserve their localization in presence of disorder, the topological states hold their conduction.

*A mi abuelo Luis, aunque crea que soy astrónomo, jaja*



# Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a mis compañeros de ruta: agradecerte Luis por tu dedicación, comprensión y humor. Por compartir conmigo tu pasión por el trabajo, por generar la confianza para que hablemos de cualquier tema y también por tu paciencia cuando la vida empezaba a suceder demasiado rápido. A Mati por ser un gran colaborador, amigo y fuente de aliento y de muchas veces despotricar cuando las cosas no andaban. Por compartir tu sabiduría y actuar como un hermano mayor.

Agradezco infinitamente a Claudio Romero y Néstor Sepúlveda por permitirme compartir con ellos la pasión por la docencia y por depositar su confianza en mi trabajo.

A mis amigos que conocí en la universidad y a aquellos que han participado desde antes en mi vida, con quienes he compartido grandes momentos e historia y me han brindado su apoyo irrestricto. Especiales agradecimientos a Verónica, Mauricio, Álvaro, Ricardo, Felipe, Javier, Danilo, Bastián, Javiera, Diego, Carla, Juan Pablo. Esta lista no es exhaustiva, así que es probable que pase a algunas personas por alto. Perdón.

A las personas que de manera desinteresada contribuyeron también a mi formación, abriéndome las puertas de su grupo de investigación para formarme, especialmente a János Asbóth, László Oroszlány y András Palyi por su gran recepción en Budapest y a Stephan Roche por la buena onda, los consejos y conversaciones cuando nos encontramos en algún lugar del mundo.

Agradezco a las instituciones que hicieron posible esto: al departamento de física por su formación y a ANID por su soporte financiero.

Gracias por brindarme su amistad y buenos deseos. Como sabrán, tiendo a exponerme a ciertas aventuras, y ustedes son parte de una de las más audaces que he experimentado. Ahora, afortunadamente, vienen más!



# Tabla de Contenido

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Materiales cuánticos	2
1.2. Desde el grafeno a los aislantes topológicos	3
1.2.1. Grafeno	3
1.2.2. Estructura electrónica del grafeno y fermiones de Dirac	5
1.2.3. Efecto Hall cuántico y aislantes de Chern	8
1.2.3.1. Modelo de Haldane	10
1.2.3.2. Caracterización topológica	12
1.2.3.3. Correspondencia del interior con la frontera	12
1.2.4. Efecto Hall cuántico de espín y aislantes topológicos $\mathbb{Z}_2$	12
1.2.4.1. Modelo de Kane y Mele	14
1.2.4.2. Caracterización topológica	15
1.2.4.3. Clasificación de otros aislantes topológicos	16
1.3. Sistemas forzados periódicamente	16
1.3.1. Contexto actual	17
1.3.2. Teoría de Floquet	18
1.3.2.1. Teorema de Floquet	18
1.3.2.2. Hamiltoniano de Floquet	20
1.3.2.3. Descripción efectiva: Réplicas de Floquet	22
1.3.2.4. Densidad de estados promedio	23
1.3.2.5. Limitaciones	23
1.4. Transporte cuántico en sistemas mesoscópicos	23
1.4.1. Matriz- $\mathcal{S}$	24
1.4.2. Fórmula de Landauer	25
1.4.3. Transporte cuántico para sistemas forzados	27
1.5. Sobre esta tesis	27
<b>2. Corrientes de bombeo polarizadas en espín</b>	<b>29</b>
2.1. Revisitando el modelo de Kane y Mele	31
2.1.1. Principales características	31
2.1.2. El rol del acoplamiento tipo Rashba	31
2.2. Dicroísmo circular en el modelo de Haldane	33
2.3. Incluyendo la luz en materiales bidimensionales	35
2.3.1. Sustitución de Peierls y Hamiltoniano de Floquet	36
2.3.2. Cálculo de transmisiones usando funciones de Green-Floquet	38

2.3.2.1.	Relación de Fisher-Lee y fórmula de la traza . . . . .	41
2.3.2.2.	Fórmula de la traza para sistemas forzados . . . . .	42
2.3.3.	Hibridización selectiva de estados con el continuo . . . . .	42
2.3.4.	Regla de oro de Fermi en Floquet . . . . .	43
2.4.	Corrientes de bombeo polarizadas en espín . . . . .	45
2.4.1.	Espectro de cuasienergías . . . . .	45
2.4.2.	Propiedades de transporte . . . . .	48
2.4.3.	Racionalizando las medidas de transporte . . . . .	49
2.4.4.	Comentarios finales de la sección 2.4 . . . . .	51
2.5.	Corrientes de bombeo de espín- <i>flip</i> . . . . .	51
2.5.1.	Medidas de transporte: contribuciones de flip . . . . .	52
2.5.2.	Oscilaciones de Rabi: desacople espín-orbital asistido por luz . . . . .	54
2.5.3.	Estimación de longitud de onda . . . . .	57
2.5.4.	Comentarios finales de la sección 2.5 . . . . .	61
2.6.	Conclusiones . . . . .	61
<b>3.</b>	<b>Transporte en aislantes topológicos anómalos de Floquet-Anderson</b>	<b>62</b>
3.1.	Topología y desorden en sistemas cuánticos . . . . .	63
3.1.1.	Desorden y localización . . . . .	63
3.1.2.	Rol del desorden en régimen de efecto Hall cuántico . . . . .	64
3.2.	Aislantes topológicos de Floquet . . . . .	67
3.2.1.	Grafeno irradiado con luz circularmente polarizada . . . . .	67
3.2.2.	Aislantes topológicos de Floquet anómalos (AFTI) . . . . .	71
3.2.3.	Aislantes topológicos de Floquet-Anderson (AFAI) . . . . .	72
3.3.	Transporte cuántico en AFAI . . . . .	73
3.3.1.	Espectro del modelo prístino . . . . .	74
3.3.2.	Configuración de dos terminales . . . . .	76
3.3.3.	Configuración multiterminal . . . . .	79
3.4.	Conclusión . . . . .	81
<b>4.</b>	<b>Comentarios finales</b>	<b>83</b>
<b>A.</b>	<b>Modelos Tight-Binding usando Kwant</b>	<b>85</b>
<b>B.</b>	<b>Algoritmos de decimación</b>	<b>88</b>
B.1.	Algoritmo de renormalización-decimación: sistemas infinitos . . . . .	88
B.2.	Decimación de un sistema finito . . . . .	90
	<b>Bibliografía</b>	<b>92</b>

# Índice de Figuras

1.1. (a) Red directa para un sistema tipo panal de abejas. La red de Bravais es triangular con una base bipartita monoespecie de sitios de tipo $A$ y $B$ , denotados por un punto vacío y lleno respectivamente. (b) Red recíproca desplegada por los vectores (1.3). Un único hexágono representa a una primera zona de Brillouin. Los puntos de alta simetría $\Gamma$ , $\mathbf{M}$ , $\mathbf{K}'$ y $\mathbf{K}$ están destacados. En cada zona $\mathbf{K}'$ y $\mathbf{K}$ no están conectados por vectores de red recíproca. La forma hexagonal de la red recíproca no es consecuencia de que la red directa tenga forma hexagonal, sino porque la red de Bravais directa es triangular. . . . .	4
1.2. (a) Red hexagonal de grafeno mostrando las direcciones de corte para generar aGNR ( <i>armchair graphene nanoribbons</i> ) o zGNR ( <i>zig-zag graphene nanoribbons</i> ). (b) y (c) muestran la celda unidad para estas cintas y (d) muestra una dirección arbitraria de corte para generar otras propiedades. Imagen extraída de [15]. . . . .	5
1.3. (a) El modelo <i>tight-binding</i> para el grafeno que usamos es la descripción efectiva de cómo los orbitales híbridos de tipo $sp^2$ se unen entre átomos de carbono vecinos para conformar los enlaces covalente $\sigma$ que dan su característica forma de panal de abeja. Los orbitales atómicos $p_z$ , perpendiculares al plano son aquellos que aportan los electrones que participan en las propiedades electrónicas. Imagen extraída de [15]. (b) Espectro del grafeno. Rojo para la banda de conducción y azul para la de valencia. La relación de dispersión es lineal cerca de los conos. Imagen extraída de [34]. . . . .	7
1.4. Resistencia Hall (recíproco de la conductividad dada por (1.16)) para un 2DEG a temperaturas bajas al variar el campo magnético normal al plano del gas. Para cada valor de $n$ se despliega la característica forma de escalera para la resistencia Hall. Imagen extraída de [37]. . . . .	9
1.5. (a) Acoples entre segundos vecinos para una red tipo panal de abeja. En el sentido del modelo de Haldane estas flechas representan un término del tipo $t_2 e^{i\phi}$ . La orientación opuesta representa a su complejo conjugado. (b) Ejemplo para determinar la orientación correcta del término $t_2 e^{i\nu_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j$ y su dependencia con $\nu_{ij}$ a través de (1.19) . (c) Flujo magnético efectivo introducido por los acoples a segundos vecinos. Dada la definición de este Hamiltoniano, el flujo total es cero. . . . .	10

1.6.	Estructura de bandas y autoestados del modelo de Haldane con condiciones de borde abiertas: <b>(a)</b> Espectro para el modelo de Haldane en una cinta de terminación tipo zig-zag. La escala de color codifica el peso de la función de onda asociada $ \psi(k_x, y) ^2$ cerca del borde de la cinta. Los estados asociados a los puntos $(k, E)$ señalados en rojo, azul y negro son señalados en (b) y (c). <b>(b)</b> Estados de borde quirales localizados en los bordes de la muestra junto a una representación esquemática de la cinta. El momento $k_x = c$ está indicado para enfatizar que el estado tiene un momento constante fijo. <b>(c)</b> Estado genérico sin localización definida. . . . .	13
1.7.	Diagrama de fase topológico para el modelo de Haldane. Dependiendo de la elección de parámetros, el sistema puede exhibir una cantidad de estados de borde de acuerdo al número de Chern asociado al sistema de bulto. Cada transición entre la frontera es una transición de fase topológica. Imagen extraída de [41]. . . . .	13
1.8.	Diagrama de fases topológicas como función de los parámetros del sistema. Para el caso no trivial, en una cinta del modelo de Kane y Mele observaremos los estados helicoidales polarizados en espín doblemente degenerados y contrapropagantes. Imagen extraída de [35]. . . . .	16
1.9.	<b>(a)</b> Espectro de cuasienergías pesados sobre procesos elásticos para una cinta de grafeno zig-zag con $\hbar\Omega = 1.5t$ , con el coeficiente que caracteriza la intensidad del potencial externo $z = 2\pi a_0 A_0 / (\Phi_0 \sqrt{3}) \approx 0.15$ , con $\Phi_0$ el cuanto de flujo magnético y $A_0$ la amplitud del láser normal a la muestra. <b>(b)</b> Conductancia de dos terminales para la cinta de grafeno irradiada con desorden, dando paso a corrientes de bombeo y a cuantización aproximada de la conductancia de dos terminales, sugiriendo una dependencia con la densidad de estados promedio. Imagen extraída de [14]. . . . .	17
1.10.	<b>(a)</b> Un sistema representado por un Hamiltoniano $T$ -periódico puede ser ahora abstraído a una serie de réplicas de él mismo y los acoples entre ellas. <b>(b)</b> Representación matricial por bloques del Hamiltoniano de Floquet. Los acoples entre réplicas, ocupando posiciones fuera de la diagonal, median la interacción luz-materia para intercambiar un determinado cuanto de $\hbar\Omega$ . Los términos diagonales representan a cada copia del sistema en la acepción de (a). Imagen extraída de [15]. . . . .	22
1.11.	Descripción esquemática de las ondas participantes en un proceso de dispersión. Cada vector $a$ almacena la amplitud de todos los canales disponibles en el electrodo. . . . .	25
1.12.	Configuración de dos terminales que describe el transporte en la fórmula de Landauer. La muestra de interés es conectada a dos electrodos que están conectados a reservas de electrones a potencial químico $\mu_{L/R}$ . . . . .	26

- 2.1. Diferentes estructuras de bandas para el modelo de Kane -Mele en una nanocinta infinita de terminación tipo zig-zag. El color codifica el peso de la función de onda en espín  $w_s \equiv |\langle s | \psi(k_x) \rangle|^2$ , con  $s = \{1, -1\}$  para espín up y down respectivamente. Cada recuadro está en la misma escala, siendo azul  $s = -1$  y rojo  $s = 1$  **(a)** Caso en que el término de acople tipo Rashba es nulo  $\lambda_R = 0$  con un leve término que rompe la simetría entre ambas componentes de espín (sin acoplarlos)  $\lambda_v = 0.05t$  el cual permite distinguir ambos espectros. Si ese coeficiente es nulo ambas componentes son completamente degeneradas. **(b)** Espectro para  $\lambda_R = 0.05t$ ,  $\lambda_v = 0.2t$  y  $\lambda_{so} = 0.06t$ . En este caso las componentes de espín no son independientes debido a la presencia del acoplamiento tipo Rashba, sin embargo la polarización de espín permanece muy bien definida para estados de borde. **(c)** Caso en que el acople Rashba es  $\lambda_R = 0.1t$ . Este acoplamiento es muy alto, despolarizando completamente la componente de espín en el interior de las bandas, fenómeno clave que puede permitir procesos de espín-*flip*. El código que genera esta figura se puede ver en el Apéndice A. . . . . 30
- 2.2. Acoplamiento espín-orbita en grafeno: **(a)** acople espín-órbita intrínseco. **(b)** acople espín-órbita tipo Rashba. Figura extraída de [15]. . . . . 33
- 2.3. Elemento de matriz de transición al cuadrado para el modelo de Haldane en función del momento  $\mathbf{k}$  en la primera zona de Brillouin, para términos de masa de Semenoff nulo y de la fase  $\phi$  que controla la fase topológica de Haldane como descrito en la Fig. 1.7. En el eje  $z$  esta graficado  $|\mathbf{P}_\sigma \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K}^\xi)|^2$  con  $\xi$  denotando el grado de libertad de valle. En las filas están para cada una de las direcciones de polarización. Figura extraída de [89]. . . . . 35
- 2.4. **(a)** Configuración de transporte con sus respectivos Hamiltonianos indicados. Bajo cada uno de los términos están indicadas sus dimensiones. La líneas punteadas denotan a las matrices  $H_{LC}$  y  $H_{RC}$ . **(b)** División conveniente de los elementos que participan en el Hamiltoniano para introducir los algoritmos de decimación para sistemas infinitos y finitos . . . . . 38
- 2.5. Resumen esquemático de una configuración de transporte de dos terminales en el contexto de Floquet. El índice  $p$  denota los canales de Floquet disponibles, o equivalentemente, la réplica de Floquet estática correspondiente a uno de los electrodos. La incidencia en esta figura está definida desde el canal elástico  $p = 0$ , canal de referencia que siempre usaremos a lo largo de esta tesis. La transmisión total corresponde a la suma las transmisiones parciales asociadas a diferentes procesos accesibles en el electrodo de llegada. . . . . 43

- 2.6. Diferentes límites determinados por la frecuencia de la radiación para un espectro del modelo de Haldane (una componente de espín de Kane y Mele). La intensidad está fija a cero, permitiendo identificar inicialmente cuáles son los procesos que se van a activar mediados por la luz. En azul la estructura de bandas que representa a la réplica cero **(a)** Límite de frecuencias muy altas, en donde el acople entre réplicas se vuelve despreciable debido a la separación en cuasienergías. El espectro se comporta de manera efectiva como un sistema estático. **(b)** Caso intermedio en que la frecuencia es comparable al ancho de banda  $W$  de la estructura de bandas estática. Procesos de acople entre la réplica de color naranja y verde ahora pueden hibridizarse con la de color azul. **(c)** Límite en que los estados de la brecha ahora pueden hibridizarse, así como procesos entre réplicas también están permitidos. . . . . 44
- 2.7. Modelo de Kane-Mele irradiado. En ausencia del acople espín-órbita, tenemos dos copias desacopladas del modelo de Haldane para espín up y espín down (**(a)** izquierda). Bajo iluminación láser se desarrolla el espacio de réplicas que representa los procesos mediados por fotones (**(a)** derecha). **(b)** Esquema del dispositivo considerado para el transporte. 45
- 2.8. Estructura de bandas resuelta en espín para una nanocita zig-zag de grafeno con acople espín-órbita,  $W = 100a$  ( $\sim 25$  nm),  $\lambda_v = 0.1$ ,  $\lambda_{SO} = 0.05$ ,  $\hbar\Omega = 1.5$  y  $\bar{z}_x = 2\pi A_x/\Phi_0 = \bar{z}_y = 2\pi A_y/\Phi_0 = 0.15$ . Paneles **(a)** y **(b)** son sin radiación. Paneles **(c)**, **(d)** y **(e)**, **(f)** son para radiación con polarización lineal y circular, respectivamente. Rojo (azul) denota espín up (down). Las regiones de transporte unidireccional o bidireccional están destacadas para los estados de borde que pasan por la brecha. La escala de color muestra la función espectral en escala logarítmica. . . . . 47
- 2.9. Los paneles **(a)**-**(d)** muestra las probabilidades de transmisión desde izquierda a derecha y viceversa en el rango de la brecha nativa. Transporte de carga unidireccional es logrado en **(a)**, **(b)**, y **(c)**, mientras en **(d)** no hay efecto unidireccional. En los paneles **(e)** y **(f)** se presenta la fotocorriente resuelta en espín obtenida para polarización lineal y circular. Debido a la presencia de las corrientes de bombeo en el contexto de Floquet, este comportamiento se traduce en corrientes de carga nulas con polarización lineal, dando paso a corrientes de espín puras **(e)** mientras que en polarización circular **(f)** permite corrientes de carga polarizadas en espín. La última puede ser modificada al cambiar la dirección de la polarización circular. . . . . 48

- 2.10.  $T_{ij}^{(n)}(\varepsilon)$  es la probabilidad de transmisión a través de un canal mediado por el intercambio de  $n$  fotones con una electrón con energía de incidencia  $\varepsilon$ . Desde los paneles **(a)** al **(f)** se muestra  $T_{ij}^{(n)}(\varepsilon)$  bajo polarización circular, describiendo el proceso completo para cada canal de espín independientemente. Desde los paneles **(g)** a **(l)**, la misma información se describe para polarización lineal. Los canales elásticos prueban ser la principal fuente de transmisión, mientras que los procesos de reflexión que dan paso a transporte unidireccional en regiones dentro del interior de las bandas, están completamente mediados por procesos de intercambio de fotones, una señal distintiva de la hibridización de los estados con el continuo. Los recuadros en cada panel cuantifican el grado de acople de un estado topológico nativo y el interior de las bandas inducido por los acoples con réplicas de orden superior, dados por (2.50). En los recuadros, las líneas continuas y discontinuas representan diferentes estados de borde quirales. . . . . 52
- 2.11. Probabilidad de transmisión total en **(a)** y **(b)**, junto con las contribuciones debida a procesos de espín-flip en **(c)** y **(d)**. El tipo de trazo destaca el canal incidente de espín, siendo el sólido (discontinuo) para down (up). En los paneles **(c)** y **(d)** el espín conservado y las de espín-flip son mostradas con trazos grises y azules, respectivamente. . . . . 54
- 2.12. Espectro de cuasienergías para el modelo de Kane-Mele bajo luz circularmente polarizada con acoplamiento Rashba. El color codifica el peso de la función de onda por réplica y espín. La polarización de espín se pierde en el continuo de las bandas debido al acoplamiento de tipo Rashba, tal como mostramos en la Fig. 2.1. Para  $E_F \approx -0.15$ , la velocidad de propagación del estado de borde de espín down es cercana a nula mientras que el espín up se hibridiza con el continuo con velocidad no nula. Los parámetros usados son  $\lambda_R = 0.0074$ ,  $W = 100a$  ( $\sim 25$  nm),  $\lambda_v = 0.1$ ,  $\lambda_{SO} = 0.05$ ,  $\hbar\Omega = 1.5$  y  $\bar{z}_x = 2\pi A_x/\Phi_0 = \bar{z}_y = 2\pi A_y/\Phi_0 = 0.15$ . . . . . 55
- 2.13. Densidad asociada a la función de onda dispersada en una configuración de dos terminales para una energía de Fermi  $E_F \approx -0.15$ . El color codifica la polarización de espín y  $n$  denota el índice de réplica. En la vecindad de esta energía, encontramos que los procesos elásticos están suprimidos, ya que los estados de borde se hibridizan de manera completa con las réplicas de orden superior. El proceso asociado a  $n = +1$  permite transmisión por todo el dispositivo cambiando el espín con una longitud de onda característica al viajar por la muestra. La velocidad de grupo del modo de espín down es nula en correspondencia a la estructura de bandas asociada en la Fig. 2.12. . . . . 56
- 2.14. Contraste para escenarios en que la longitud de onda está ajustada para generar un dispositivo que exhiba espín-flip **(a)** y su contraparte **(b)**. La influencia de la frecuencia espacial de oscilación muestra de manera elocuente que la contribución a procesos de espín-flip casi del orden el cuanto de transmisión, en cambio cuando el proceso de flip no está correctamente sintonizado, la probabilidad de transmisión disminuye a  $\approx 0.2$ . . . . . 57

2.15. Vista lateral <b>(a)</b> y vista frontal <b>(b)</b> de la función de onda dispersada y sumada sobre un eje fijo, cantidad mostrada en los ejes como función del acople Rashba. Las oscilaciones se muestran de manera clara exhibiendo un patrón tipo oscilación de Rabi para el espín, esto sobre la réplica $n = +1$ . Las oscilaciones se detienen una vez que el terminal opuesto es alcanzado. Las oscilaciones de alta frecuencia han sido filtradas porque están asociadas a longitudes de onda comparables al espaciamiento entre átomos, mucho más pequeñas que la escala de longitud relevante. En los paneles <b>(c)</b> y <b>(d)</b> se muestran los ajustes lineales, los cuales prueban que el sistema se comporta de manera efectiva como sistema de dos niveles. Esto nos otorgará un argumento heurístico para saber si el sistema hará flip en una configuración de transporte. . . . .	60
3.1. Contraste en la densidad de estados de un aislante en el que la brecha no tiene densidad de estados (aislante de bandas) y un aislante de Anderson, en los cuales existe densidad de estados finita entre dos regiones con estados extendidos, pero donde la localización exponencial no permite a la carga atravesar la región sombreada en azul. Por ende, mientras la energía de Fermi esté en la brecha móvil no existirá conducción. Imagen extraída de [120]. . . . .	64
3.2. Niveles de Landau para un sistema prístino y para un sistema con desorden. Si el nivel de Fermi cae dentro del espaciamiento entre los diferentes niveles, los estados de borde contrapropagantes aparecen en la frontera de la muestra <b>(a)</b> . Esta conclusión se preserva en el caso <b>(b)</b> , con la diferencia de que ahora los niveles se ensachan producto de la presencia de desorden. Imágenes extraídas de [39]. . . . .	65
3.3. Ilustración del llenado de los niveles de Landau en la analogía del llenado con electrones. Las líneas denotan las equipotenciales llenadas al nivel de Fermi $\epsilon_F$ . (a) Está bajo el umbral de percolación, (b) es justo cuando percolan los estados entre los bordes, mientras que (c) es sobre el umbral. Imágenes extraídas de [117]. . . . .	66
3.4. Representación esquemática de la densidad de estados para un aislante. Dado el argumento de la percolación, algunos estados extendidos existen al interior de las bandas. . . . .	66
3.5. Comparativa del espectro de una cinta de grafeno zig-zag <b>(a)</b> y su versión bajo la acción de luz circularmente polarizada <b>(b)</b> , mostrando estados de borde quirales en la brecha entorno al punto de neutralidad de carga. La escala de color indica el valor de la función espectral (1.69) en la réplica $m = 0$ , relevante para estudiar el transporte al acoplarse a electrodos no forzados. El espectro para el caso forzado es fuera de la aproximación a orden lineal en momento y con amplitud de láser intensa. La frecuencia en este caso es comparable al ancho de banda permitiendo procesos de absorción-emisión entre réplicas de orden superior. El acople a primeros vecinos está fijo a la unidad, y en el caso irradiado $z_x = z_y = 0.15$ , $\hbar\Omega = 1.5$ con tres réplicas en total. . . . .	70

- 3.6. Estados de borde no triviales pueden ser exhibidos en sistemas de Floquet incluso en el caso en que los números de Chern de las bandas son nulos. Debido a la periodicidad del espectro de cuasienergías y de cuasimomento, los estados de borde pueden conectar extremos del espectro de Floquet-Bloch de manera continua (entre los puntos vacíos y llenos). De manera efectiva, el espectro vive entonces en un toro. Imagen extraída de [20]. . . . . 72
- 3.7. Al incrementar el desorden, los estados extendidos que separan las brechas en cuasienergías pueden separarse en dos casos: la aniquilación o levitación. El segundo escenario es únicamente posible en el caso de los sistemas forzados debido a la periodicidad del espectro de cuasienergías. Como resultado del proceso, el sistema se comporta como un aislante de Anderson trivial o como un AFAI. En el segundo caso los estados topológicos en las brechas continúan conduciendo por los bordes. En escala de color se muestra la conductividad de dos terminales. Imagen extraída de [128]. . . . . 74
- 3.8. **(a)** Protocolo de forzamiento en el modelo de aislante anómalo de Floquet-Anderson en una red cuadrada. Los acoples de primeros vecinos (líneas sólidas que conectan los sitios representados por círculos) son encendidos y apagados en la secuencia indicada en los cuatro paneles. La magnitud del acople es  $J$ , elegida de tal manera que la probabilidad de salto de un sitio al otro sea igual a uno. Este protocolo de forzamiento produce estados de borde quirales en la frontera de la cinta sin efecto en el interior. **(b)** Espectro de cuasienergías en términos del cuasimomento en la primera zona de Brillouin. Los cálculos consideraron réplicas desde  $-4$  a  $+4$ . La escala de color indica la razón de participación inversa en escala logarítmica mostrando fuerte localización de los modos quirales que pasan por la brecha. Los estados en las bandas permanecen localizados. 76
- 3.9. **(a)** Cuasienergía como función del cuasimomento a lo largo de la dirección de traslación espacial para el modelo de AFAI sin desorden. El estudio de transporte se focaliza en la primera región no trivial (denotada con líneas verticales rojas discontinuas) en donde existen estados de borde contrapropagantes que cruzan la brecha. **(b)** Conductancia diferencial de dos terminales como función de la energía de Fermi en los electrodos no forzados. La conductancia llega a valores cercanos al cuanto de conductancia  $2e^2/h$  para energías dentro de la brecha no trivial. La conductancia de dos terminales en las bandas comienza a atenuarse al aumentar la intensidad del desorden hasta que el régimen de AFAI aparece, saturando la conductancia a un valor ligeramente inferior al límite teórico de  $2e^2/h$ . Para alta intensidad de desorden el sistema alcanza la localización fuerte. En el panel **(c)** se muestra la asimetría de la transmisión  $\delta T = \frac{1}{2}(T_{RL} - T_{LR})$  responsable de la corriente de bombeo. Los cálculos corresponden a  $W = 40$  celdas unidad con los parámetros del electrodo ajustados a  $J_{\text{electrodo}} = 0.258J$  y  $E_{\text{electrodo}} = 0.528J$ . . . . . 78

3.10. Variación de la conductancia de dos terminales en función de la intensidad del desorden $dS$ . En rojo se muestra para un valor de energía dentro del interior de las bandas y en azul para un valor de energía dentro de la brecha. La conductancia prueba ser constante para intensidades de desorden moderadas (región etiquetada como <i>régimen AFAI</i> ) para los casos dentro de las bandas como de la brecha. Para intensidades de desorden muy altas la localización fuerte se manifiesta atenuando la conductancia fuertemente. El cómputo se hizo en un promedio de cincuenta realizaciones de desorden. . . . .	79
3.11. Conductancia diferencial de tres terminales para un sistema con forma de T, en función de la energía de Fermi. Dependiendo de la energía de los modos incidentes, la quiralidad esperada desde el modelo de AFAI empieza a desarrollarse. El inicio de esta fase comienza a ser visto de manera más clara para energías dentro del interior de las bandas cuando $dS = 7.0$ . . . . .	80
3.12. Función de onda dispersada en la muestra para la configuración de tres terminales para energías $E = 0.5$ (dentro del interior las brecha) $E = 0.9$ (dentro del interior de las bandas) para diferentes valores del desorden. Al incrementarse el desorden, los estados del interior se localizan hasta que uno de los estados de borde quirales permanece (f), indicando el régimen de aislante de Floquet-Anderson anómalo. . . . .	81

# Capítulo 1

## Introducción

En la madrugada del 5 de febrero del 1980, en Grenoble, Klaus von Klitzing evidenciaría por primera vez el efecto Hall cuántico entero<sup>1</sup> [1], abriendo la física de materia condensada a un territorio inexplorado: los estados topológicos de la materia. La física de estos estados presenta llamativas propiedades, como la cuantización exacta de la conductividad Hall, una conductividad longitudinal nula y la excepcional robustez de estas características ante imperfecciones de la muestra. Sin embargo, las condiciones para lograr esta particular fase en un gas de electrones 2D —como lo hizo originalmente von Klitzing— son muy exigentes ya que se necesitan campos magnéticos muy altos y simultáneamente temperaturas muy bajas [2].

El soporte teórico de la descripción de este fenómeno llegaría dos años más tarde de la mano de trabajos de Robert Laughlin y David Thouless, quienes explicaron la raíz de la cuantización de la conductividad en términos de un invariante topológico [3, 4], lo cual dio el nombre al área. En 1988, Duncan Haldane toma la física del efecto Hall cuántico entero y la independiza del campo magnético [5], sustituyéndolo por orden magnético constitutivo de una red monocapa tipo panal de abeja. Desafortunadamente, para aquel entonces la existencia de materiales en dos dimensiones no había sido probada experimentalmente y el modelo de Haldane fue relegado a un plano exclusivamente conceptual.

No fue sino hasta el año 2004 en que el estudio de materiales en dos dimensiones vio su génesis con la aislación experimental del grafeno [6, 7], un material en dos dimensiones monocapa con características físicas excepcionales, como una inusual dureza, buena conductividad térmica y eléctrica [8]. Este descubrimiento vino a echar por tierra el manto de escepticismo con que la teoría pensaba a los materiales en dos dimensiones [8, 9], ya que se creía que cualquier orden de largo alcance en ellos sería inestable ante fluctuaciones de gran longitud de onda. Gracias a la existencia del grafeno, los materiales monocapa serían una realidad.

Los materiales en dos dimensiones y la física topológica encontrarían un espacio co-

---

<sup>1</sup>En adelante nos referiremos al efecto Hall cuántico entero simplemente como efecto Hall cuántico ya que su contraparte fraccionaria no será relevante para los efectos de este documento.

mún gracias al modelo formulado por Kane y Mele, constituyendo la primera propuesta de aislante topológico basado en un material completamente real como el grafeno, a través del denominado efecto Hall cuántico de espín [10, 11], una extensión del modelo de Haldane. La física de estados topológicos, ya no estaría supeditada a un plano de intrincados modelos experimentales o teóricos, sino que serían una propiedad constitutiva del grafeno mediada por acoplamiento de espín-órbita. La consecuente caracterización a través de un invariante topológico concreto, que depende únicamente de la descripción cuántica del sistema, lo hacen integrarse a los denominados "materiales cuánticos". Pese a que el acoplamiento de espín-órbita en grafeno resultó ser mucho más bajo que lo estimado por Kane y Mele, este modelo sirvió como precursor para descubrir experimentalmente el efecto Hall cuántico de espín por König [12] basado en un modelo teórico desarrollado previamente por Bernevig, Hughes y Taylor [13].

Nuevos elementos han irrumpido en el área de las fases topológicas de la materia, y de forma particularmente relevante para este trabajo, la inclusión de potenciales periódicos en el tiempo [14-17]. Esta herramienta ha mostrado ser eficaz para el control de propiedades en materiales cuánticos como aislantes topológicos o superconductores [18], como a la vez ser capaz de proponer nuevos tipos de fenómenos exclusivos de sistemas fuera del equilibrio que no tienen contraparte estática [19-21]. Diferentes ideas y teorías sobre la física de sistemas fuera del equilibrio y su sinergia con la física de estados topológicos ya son llevadas al plano experimental en sistemas que se comportan de manera efectiva como si fueran de materia condensada, como en sistemas fotónicos, átomos ultra fríos o redes acústicas [22-24].

En este capítulo buscamos introducir de una forma incremental cómo el campo de los aislantes topológicos se ha gestado, a través de la descripción de importantes hitos para la materia condensada que han dado forma al área. A su vez, esta introducción servirá para entregar el sustrato conceptual básico y la terminología utilizada en los capítulos siguientes, recorriendo los estados topológicos de sistemas conocidos en la literatura, la teoría de Floquet y teoría de transporte cuántico.

## 1.1. Materiales cuánticos

La mecánica cuántica, desde sus inicios, ha estado íntimamente arraigada en el núcleo de la física del sólido. Numerosos modelos que combinan argumentos clásicos y cuánticos han sido capaces de explicar y predecir propiedades elásticas, electrónicas, magnéticas, térmicas y ópticas. Aunque estos sistemas no son ajenos a la física cuántica, los efectos de ella en algunos casos no resultan evidentes [25, 26].

Sin embargo, en las últimas dos décadas una nueva familia de materiales ha instalado con fuerza un nuevo paradigma: los *materiales cuánticos*. Estos materiales poseen una física macroscópica completamente dominada por la mecánica cuántica, y por ende sus efectos son evidentes a gran escala.[26] Algunas de estas propiedades derivan de su baja dimensión, la fuerte correlación entre los electrones que los constituyen o la topología del espacio de Bloch definido por la función de onda de los electrones. Incluso, un tópico que está atrayendo el interés de la comunidad es el de topología en sistemas fuertemente correlacionados [27]. Entre los materiales cuánticos se pueden encontrar superconduc-

tores, grafeno, aislantes topológicos, semimetales de Weyl, líquidos cuánticos de espín y más [16, 25].

Con el éxito del aislamiento del grafeno, nuevos materiales 2D (o cuasi-2D) comenzaron a aparecer. Como consecuencia, la física de heteroestructuras 2D comenzó a ganar terreno al generar nuevas propiedades mecánicas, ópticas y electrónicas [28]. mediante la apropiada combinación de las características de cada una de las capas del nuevo arreglo, abriendo una ruta a una amplia gama de aplicaciones [29, 30].

Una vertiente importante del estudio de heteroestructuras 2D se relaciona con la generación de acople espín-órbita por proximidad [15, 31]. Materiales como el grafeno presentan un acoplamiento espín-órbita intrínseco demasiado pequeño, de modo que su brecha electrónica no es fácil de modificar. Como alternativa, materiales muy pesados como los dicalcogenuros de metales de transición, los cuales poseen brechas energéticas amplias del orden de  $\sim 1$  eV, pueden inducir el efecto deseado al ser usados como sustrato para el grafeno, manteniendo su movilidad electrónica original [31]. Este control de la brecha asistido por el acoplamiento espín-órbita es interesante puesto que permite lograr de manera experimental la fase de *aislante topológico*.

## 1.2. Desde el grafeno a los aislantes topológicos

En términos generales, un aislante topológico es un material que solo permite conducción eléctrica por sus bordes; en el interior es perfectamente aislante. De manera notable, estos estados presentan robustez ante los defectos del material y exhiben cuantización de conductividad Hall de carga o de espín.

Para empezar a escudriñar cómo la materia condensada se ha reestructurado en torno a los estados topológicos, nuestro punto de partida será el material que sirvió de inspiración conceptual para develar la conexión entre propiedades inherentemente cuánticas y sus observables: el grafeno.

### 1.2.1. Grafeno

El grafeno es un material 2D monocapa conformado únicamente por átomos de carbono dispuestos en los vértices de una red de tipo panal de abeja (Fig. 1.1(a)). La relación entre sus propiedades y su simplicidad estructural no resulta intuitiva: es un material extremadamente duro con un módulo de Young mayor al del diamante y es buen conductor de la electricidad y calor. La primera aislación del grafeno ocurrió el año 2004, y la caracterización de sus propiedades fue hecha por Andre Geim y Konstantin Novoselov [6-8, 32, 33], trabajo por el cual recibieron el Premio Nobel de Física del 2010.

Para comenzar la caracterización de la red de grafeno, podemos escribir sus vectores de la red de Bravais y un vector que conecta a las diferentes sitios  $A$  y  $B$

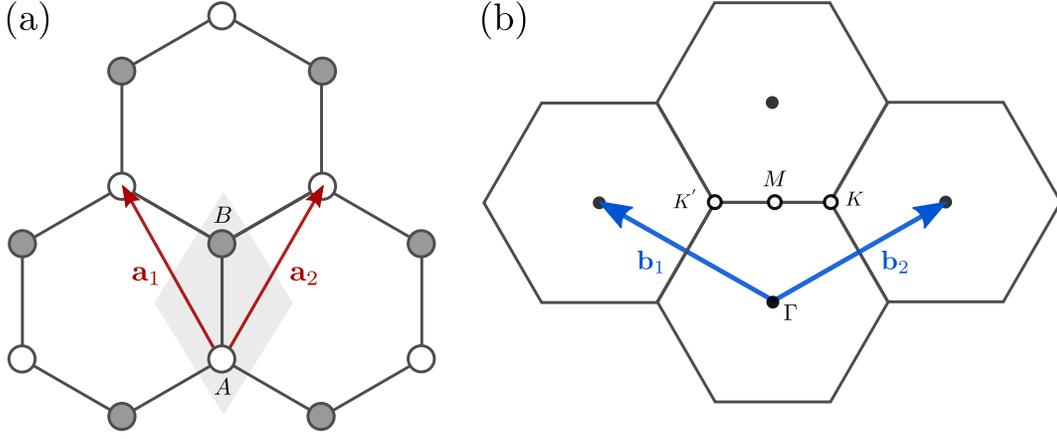


Figura 1.1: **(a)** Red directa para un sistema tipo panal de abejas. La red de Bravais es triangular con una base bipartita mono especie de sitios de tipo  $A$  y  $B$ , denotados por un punto vacío y lleno respectivamente. **(b)** Red recíproca desplegada por los vectores (1.3). Un único hexágono representa a una primera zona de Brillouin. Los puntos de alta simetría  $\Gamma$ ,  $M$ ,  $K'$  y  $K$  están destacados. En cada zona  $K'$  y  $K$  no están conectados por vectores de red recíproca. La forma hexagonal de la red recíproca no es consecuencia de que la red directa tenga forma hexagonal, sino porque la red de Bravais directa es triangular.

$$\mathbf{a}_1 = a \left( -\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right), \quad \mathbf{a}_2 = a \left( \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right), \quad \boldsymbol{\delta} = \frac{a}{\sqrt{3}}\hat{y}, \quad (1.1)$$

con  $a \equiv a_0\sqrt{3}$ , donde  $a_0 \approx 0.142$  nm es la distancia entre carbonos vecinos. Esta definición la mantendremos para cualquier red tipo panal de abejas que abordemos durante este capítulo. Los vectores que conectan a los primeros vecinos también serán relevantes, conectando un sitio de tipo  $A$  a  $B$  mediante

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{\sqrt{3}}\hat{y}, \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{\sqrt{3}} \left( \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} - \frac{1}{2}\hat{y} \right), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = \frac{a}{\sqrt{3}} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} - \frac{1}{2}\hat{y} \right) \quad (1.2)$$

Como es estándar en física del sólido, las propiedades electrónicas podemos describirlas en términos de la red recíproca, cuyos vectores de red, definidos mediante la relación  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$  son

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{1}{2}\hat{y} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \left( \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{1}{2}\hat{y} \right). \quad (1.3)$$

En consecuencia, podemos también definir la primera zona de Brillouin, cuya forma hexagonal (Fig. 1.1(b)) es herencia de la red de Bravais triangular subyacente mas no

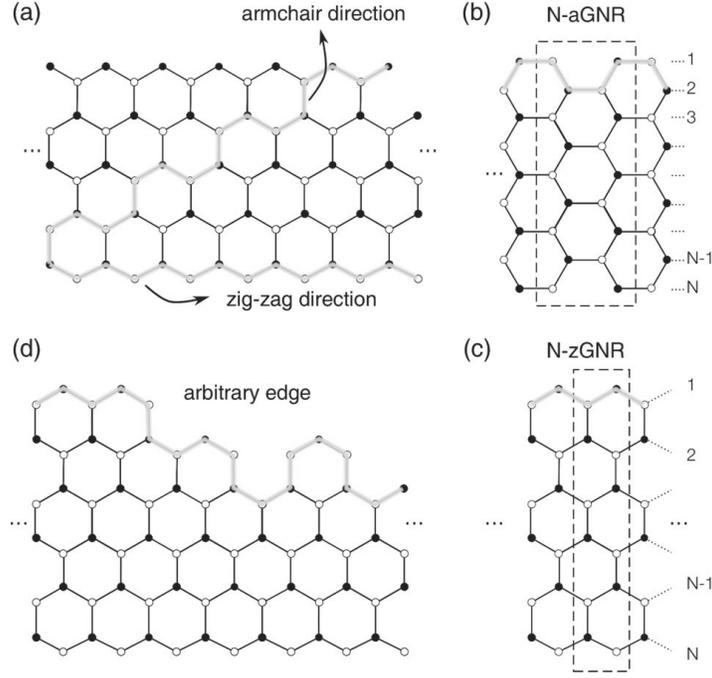


Figura 1.2: **(a)** Red hexagonal de grafeno mostrando las direcciones de corte para generar aGNR (*armchair graphene nanoribbons*) o zGNR (*zig-zag graphene nanoribbons*). **(b)** y **(c)** muestran la celda unidad para estas cintas y **(d)** muestra una dirección arbitraria de corte para generar otras propiedades. Imagen extraída de [15].

del aspecto de panal de abeja de la red directa. Cada zona de Brillouin posee seis vértices siendo solo dos independientes, puesto que no están conectados por vectores de red recíproca. Elegimos dos de estos puntos

$$\mathbf{K} \equiv \frac{4\pi}{3a} \left( \frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right), \quad \mathbf{K}' \equiv \frac{4\pi}{3a} \left( -\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right), \quad (1.4)$$

que serán de capital importancia para entender la estructura electrónica del grafeno.

Sistemas con diferentes propiedades electrónicas pueden ser generados a partir de una lámina infinita. Un ejemplo minimal de manejo de las propiedades electrónicas del grafeno se da a través de cortes en el plano del material para generar nanocintas. En la Fig. 1.2 se muestran algunas alternativas, las cuales exhiben estructuras de bandas con características distintivas como el cambio del tamaño de la brecha energética entre bandas de valencia y de conducción.

### 1.2.2. Estructura electrónica del grafeno y fermiones de Dirac

Para deducir el espectro de una hoja infinita de grafeno prístino, podemos recurrir a escribir su Hamiltoniano en un formalismo *tight-binding*. Definamos  $c_i^\dagger$  como el operador fermiónico de creación en el sitio  $i$  y por  $c_i$  el respectivo operador de aniquilación en el sitio  $i$ . Luego, el Hamiltoniano *tight-binding* del grafeno se puede escribir por

$$\mathcal{H}_{\text{Grafeno}} = t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + \sum_i \varepsilon_0 c_i^\dagger c_i, \quad (1.5)$$

con  $\varepsilon_0$  representando el término de energía del electrón al ocupar el sitio  $i$ . La cantidad  $t$  representa la amplitud de acople de los orbitales  $p_z$  entre los primeros vecinos  $i, j$  denotados mediante  $\langle ij \rangle$ . Para el grafeno esta cantidad es de  $t \approx 2.7$  eV [15]. Como el grafeno es un material monoespecie, la energía de sitio debe ser idéntica para cualquier punto de la red y por ende estos términos representan un desplazamiento global del Hamiltoniano y podemos fijarlo como energía de referencia  $\varepsilon_0 = 0$ .

Gracias a la simetría de traslación por vectores de red en el plano, el momento  $\mathbf{k}$  es un buen número cuántico y podemos aprovechar el teorema de Bloch. Podemos diagonalizar el Hamiltoniano mediante una transformada de Fourier

$$c_i(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_i(\mathbf{k}), \quad (1.6)$$

donde  $\mathbf{r}_i$  es la posición de cada uno de los sitios y  $N$  el número total de átomos de carbono. Puede demostrarse que el Hamiltoniano transformado en Fourier adopta la forma

$$\mathcal{H}_{\text{Grafeno}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{A\mathbf{k}}^\dagger & c_{B\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & S_1(\mathbf{k}) \\ S_1^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{A\mathbf{k}} \\ c_{B\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

con  $S_1(\mathbf{k}) \equiv t \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_i}$  con los vectores  $\boldsymbol{\delta}_i$  dados por (1.2). Si llamamos al espinor  $c_{\mathbf{k}}^\dagger \equiv \begin{pmatrix} c_{A\mathbf{k}}^\dagger & c_{B\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}$  podemos extraer el Hamiltoniano de Bloch  $h(\mathbf{k})$  al reconocerlo de  $\mathcal{H}_{\text{Grafeno}} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger h(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}$ :

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & S_1(\mathbf{k}) \\ S_1^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

entonces el espectro viene dado por

$$E(\mathbf{k}) = \pm t |S_1(\mathbf{k})|, \quad (1.9)$$

$$= \pm t \left| \exp\left(\frac{ik_y a}{\sqrt{3}}\right) + 2 \exp\left(\frac{-ik_y a}{2\sqrt{3}}\right) \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \right|, \quad (1.10)$$

$$= \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)}. \quad (1.11)$$

Para caracterizar completamente este espectro basta con tomar  $\mathbf{k}$  en una única zona de Brillouin. Gráficamente podemos visualizarlo en la Fig. 1.3(b). La relación de

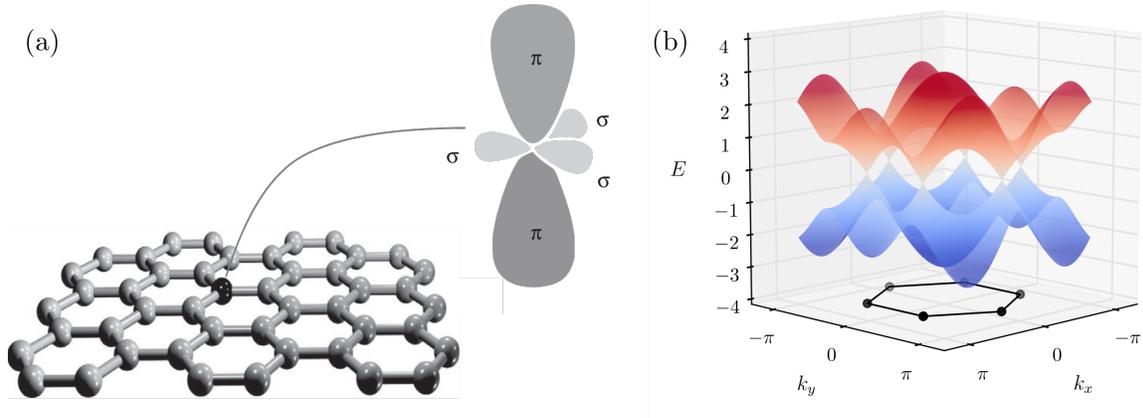


Figura 1.3: (a) El modelo *tight-binding* para el grafeno que usamos es la descripción efectiva de cómo los orbitales híbridos de tipo  $sp^2$  se unen entre átomos de carbono vecinos para conformar los enlaces covalente  $\sigma$  que dan su característica forma de panal de abeja. Los orbitales atómicos  $p_z$ , perpendiculares al plano son aquellos que aportan los electrones que participan en las propiedades electrónicas. Imagen extraída de [15]. (b) Espectro del grafeno. Rojo para la banda de conducción y azul para la de valencia. La relación de dispersión es lineal cerca de los conos. Imagen extraída de [34].

dispersión (1.11) es simétrica en torno a  $E = 0$  e implica la existencia de puntos de contacto entre la banda de la valencia y de conducción, que son coincidentes con los puntos  $\mathbf{K}'$  y  $\mathbf{K}$  de la red recíproca. Dadas estas características, el grafeno presenta un carácter metálico de brecha nula y con superficie de Fermi reducida a un punto. Estas peculiares características le valen su clasificación al grafeno y sistemas similares como un *semimetal*[15].

La conexión entre la banda de valencia y de conducción en un punto tiene profundas consecuencias para la física de bajas energías en torno a  $\mathbf{K}'$  y  $\mathbf{K}$ . Esto queda de manifiesto a través de una expansión en serie de Taylor a orden lineal entorno a dichos puntos

$$\mathcal{H}_\xi(\mathbf{p}) = -\frac{\sqrt{3}}{2}ta (\xi p_x \sigma_x + p_y \sigma_y), \quad (1.12)$$

con  $\xi = \pm 1$  definido para  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  respectivamente,  $p_{x,y}$  el valor del momento con respecto a esos puntos de la red recíproca y  $\sigma_{x,y,z}$  las matrices de Pauli usuales las cuales representan el grado de libertad de subred. El Hamiltoniano (1.12) corresponde a una partícula cuya dispersión es lineal y sin masa con velocidad  $\hbar c = \frac{\sqrt{3}}{2}ta$ , lo cual imita los denominados *fermiones de Dirac*. A continuación probaremos que la existencia de estos conos no es casual y que son estables ante la introducción de diferentes términos[35, 36].

Cualquier Hamiltoniano  $h(\mathbf{k})$  de  $2 \times 2$  puede ser escrito como combinación de las matrices de Pauli, tal que

$$h(\mathbf{k}) \equiv \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = d_0(\mathbf{k})\sigma_0 + \sum_{i \in \{x,y,z\}} d_i(\mathbf{k})\sigma_i, \quad (1.13)$$

en particular podemos hacer esto para (1.12). Para un sistema fermiónico sin espín, la acción del operador de reversión temporal  $T$  viene dada por la conjugación compleja y toma  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}$  y  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ . Luego notamos que  $Th(\mathbf{k})T^{-1} = h(-\mathbf{k})$  por ende para que  $T$  sea una simetría del sistema se debe satisfacer  $h^*(\mathbf{k}) = h(-\mathbf{k})$ , lo cual impone algunas restricciones, en particular

$$d_z(\mathbf{k}) = d_z(-\mathbf{k}). \quad (1.14)$$

La red del grafeno tiene una disposición tal que es invariante ante inversión espacial. El operador de inversión en espacio de coordenadas tiene la acción  $I : \mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ , lo que en espacio de momento se traduce a cambiar el signo del momento e intercambiar los sitios  $A$  y  $B$  de rol. Es posible demostrar que la condición de simetría de inversión se puede resumir en  $Ih(\mathbf{k})I^{-1} = \sigma_x h(-\mathbf{k})\sigma_x = h(\mathbf{k})$ .

Al tomar la componente  $z$  de esta última relación obtenemos que  $d_z(-\mathbf{k}) = d_z(\mathbf{k})$ . Si imponemos simetría de reversión temporal y de inversión a la vez, llegamos a la importante relación

$$d_z(\mathbf{k}) = 0. \quad (1.15)$$

Este es justamente el caso del Hamiltoniano (1.12) y que se anula en los puntos de Dirac. Por ende, la conclusión que extraemos de (1.15) es que los puntos de Dirac son localmente estables ante cualquier término extra que preserve simetría de reversión temporal y de inversión *a la vez* y no se abre una brecha energética que separe la banda de valencia y de conducción. Adicionalmente, si incorporamos a este razonamiento la simetría de rotación del grafeno por  $2\pi/3$  (también conocida como simetría  $C_3$ ) encontramos que los puntos de Dirac son globalmente estables y su posición no cambia al incluir términos extra que sigan siendo invariantes ante  $T$  e  $I$  simultáneamente [35].

Todas las conclusiones extraídas para el grafeno y sus simetrías probarán ser particularmente importantes desde un punto de vista conceptual e histórico para el desarrollo de la física de aislantes topológicos.

### 1.2.3. Efecto Hall cuántico y aislantes de Chern

El efecto Hall cuántico, fue descubierto por Klaus von Klitzing en 1980 [1] como producto de su investigación en las propiedades de transporte eléctrico de un 2DEG (gas electrónico en dos dimensiones) en MOSFET de silicio en condiciones de baja temperatura  $T \approx 4.2\text{K}$  y a muy alto campo magnético  $B \approx 20\text{T}$ . Durante la medición de conductancia Hall como función de la intensidad del campo magnético aplicado directamente de manera normal al dispositivo, esta exhibió una secuencia de *plateaus*

de manera similar a una escalera (Fig. (1.4)) siguiendo de manera sorprendentemente exacta la cuantización entera de  $e^2/h$

$$\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h} \quad \nu \in \mathbb{N}, \quad (1.16)$$

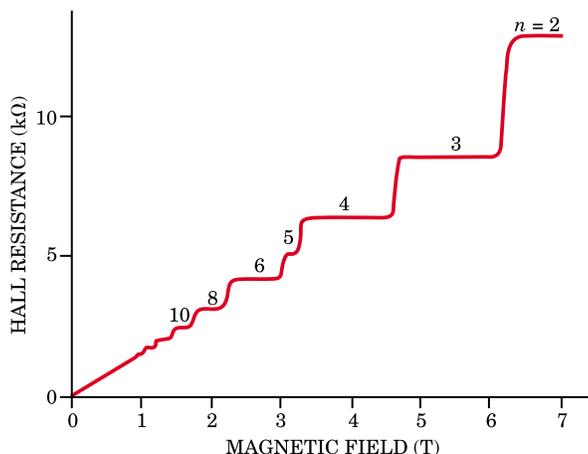


Figura 1.4: Resistencia Hall (recíproco de la conductividad dada por (1.16)) para un 2DEG a temperaturas bajas al variar el campo magnético normal al plano del gas. Para cada valor de  $n$  se despliega la característica forma de escalera para la resistencia Hall. Imagen extraída de [37].

y simultáneamente mostraba una conductividad longitudinal muy pequeña  $\sigma_{xx} \approx 0$ . De manera llamativa, esta relación permanece válida incluso al variar la geometría de la muestra y sin importar los defectos presentes en ella. El descubrimiento del efecto Hall cuántico le valió a von Klitzing el Premio Nobel de Física del año 1985, y gracias a su extraordinaria precisión (que mediciones más actuales señalan desviaciones del entero de una parte por billón) proveyó un nuevo estándar de resistencia eléctrica y de definición de la constante de estructura fina [2]. Inicialmente, una consecuencia fue la redefinición del "Ohm" en el Sistema Internacional *constante de von Klitzing*

$$R_K \approx 25812.80745 \Omega \approx \frac{h}{e^2}, \quad (1.17)$$

y recientemente el nuevo Sistema Internacional, en su redefinición en base a constantes de la mecánica cuántica, utiliza  $R_K$  para definir el "kilo", el estándar de masa [38].

El siguiente problema para la física es explicar qué hace a esta cuantización ser tan robusta, exacta y persistente de manera independiente a la muestra material. Trabajos de Laughlin y Halperin [3, 39] basados en la cuantización de los niveles de Landau del sistema mostraron que la cuantización de  $\sigma_{xy}$  implica la existencia de estados de borde quirales en la muestra: estados exponencialmente localizados en cada borde que se

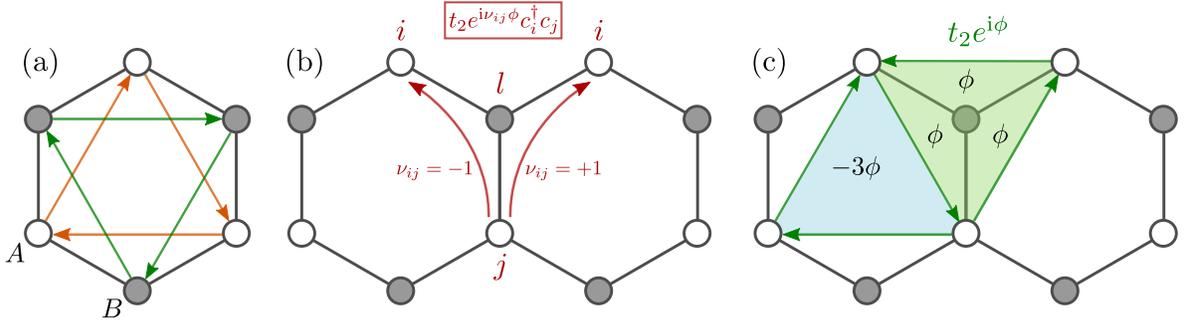


Figura 1.5: **(a)** Acoples entre segundos vecinos para una red tipo panal de abeja. En el sentido del modelo de Haldane estas flechas representan un término del tipo  $t_2 e^{i\phi}$ . La orientación opuesta representa a su complejo conjugado. **(b)** Ejemplo para determinar la orientación correcta del término  $t_2 e^{i\nu_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j$  y su dependencia con  $\nu_{ij}$  a través de (1.19). **(c)** Flujo magnético efectivo introducido por los acoples a segundos vecinos. Dada la definición de este Hamiltoniano, el flujo total es cero.

mueven en direcciones opuestas y que son conductores. Más tarde, Thouless y colaboradores [4] proveyeron la primera explicación en términos de un invariante topológico calculando la conductividad mediante la fórmula de Kubo, identificando  $\nu$  como *número de Chern*.

### 1.2.3.1. Modelo de Haldane

La primera formulación teórica de un aislante topológico fue el modelo de Haldane. Propuesto en 1988, D. Haldane [5] concibió un modelo que exhibía efecto Hall cuántico en donde el mecanismo de ruptura de reversión temporal ya no dependía de un campo magnético, sino de parámetros intrínsecos de la misma red. Este modelo se mantuvo largamente inadvertido debido a su intrincado mecanismo, siendo considerado un artificio sin correlato experimental. Fue probado experimentalmente recién el año 2014 por Jotzu y colaboradores [40].

Concretamente, este modelo consiste en un modelo de electrones sin espín ocupando una red tipo panal de abeja de la misma forma en que el grafeno. El ingrediente clave que rompe la simetría de reversión temporal es la incorporación de acoples a segundos vecinos complejos (Fig. (1.5)(a)), y por ende conectando sitios de la misma subred. Este nuevo término cumple el rol de campo magnético externo rompiendo la simetría de reversión temporal. Sin embargo, para asegurar la condición de que el flujo magnético sea nulo<sup>2</sup>, la fase de los acoples de segundos vecinos debe estar apropiadamente construida (ver Fig. (1.5)). De manera precisa, el Hamiltoniano *tight-binding* del modelo de Haldane puede ser escrito en la forma

$$\mathcal{H}_{\text{Haldane}} = t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + M \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i + t_2 \sum_{\langle\langle i \leftarrow j \rangle\rangle} c_i^\dagger c_j e^{i\nu_{ij}\phi}, \quad (1.18)$$

con el primer término los acoples de primeros vecinos del grafeno, el segundo un término

<sup>2</sup>Y por ende, prescindir de campo magnético.

de masa tipo Semenoff ( $\xi_i = 1$  para subred  $A$  y  $\xi_i = -1$  para subred  $B$ ) que ayuda abrir una brecha agregando un término de masa. El término que introduce la física nueva es el tercero, en donde  $\langle\langle i \leftarrow j \rangle\rangle$  representa el acople orientado entre sitios que son segundos vecinos. Cada par orientado  $\langle\langle ij \rangle\rangle$  contribuye dos términos que son conjugados por lo que el Hamiltoniano resultante es Hermitiano. El índice  $\nu_{ij}$  del par orientado  $\langle\langle i \leftarrow j \rangle\rangle$  está definido por

$$\nu_{ij} \equiv \hat{z} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_{il} \times \boldsymbol{\delta}_{lj}}{|\boldsymbol{\delta}_{il} \times \boldsymbol{\delta}_{lj}|}, \quad \boldsymbol{\delta}_{ij} \equiv \boldsymbol{\delta}_j - \boldsymbol{\delta}_i, \quad (1.19)$$

con  $l$  el primer vecino común que comparten los sitios  $i$  y  $j$ , como se muestra en la Fig. (1.5)(b) y  $\boldsymbol{\delta}_i$  los vectores dados por (1.2). Efectuando el mismo proceso de transformada de Fourier hecho para obtener (1.8) podemos llegar a

$$\mathcal{H}_{\text{Haldane}} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{A\mathbf{k}}^\dagger & c_{B\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{2,A}(\mathbf{k}) & S_1(\mathbf{k}) \\ S_1^*(\mathbf{k}) & S_{2,B}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{A\mathbf{k}} \\ c_{B\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

con  $S_2$ . los factores de estructura que conectan sitios del mismo tipo a segundos vecinos, explícitamente

$$S_{2,A}(\mathbf{k}) = -2t_2 \sum_{\boldsymbol{\gamma}_i} \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma}_i + \phi) + M, \quad (1.21)$$

$$S_{2,B}(\mathbf{k}) = -2t_2 \sum_{\boldsymbol{\gamma}_i} \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma}_i - \phi) - M. \quad (1.22)$$

con los vectores  $\boldsymbol{\gamma}_i$  dados por

$$\boldsymbol{\gamma}_1 = -a\hat{x}, \quad \boldsymbol{\gamma}_2 = \frac{a}{2}\hat{x} - \frac{3a}{2\sqrt{3}}\hat{y}, \quad \boldsymbol{\gamma}_3 = \frac{a}{2}\hat{x} + \frac{3a}{2\sqrt{3}}\hat{y}. \quad (1.23)$$

El espectro se obtiene mediante la diagonalización del Hamiltoniano de Bloch que identificamos en (1.20)

$$E_{\pm} = -2t_2 \cos \phi \sum_{\boldsymbol{\gamma}_i} \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma}_i) \pm \sqrt{|S_1(\mathbf{k})|^2 + \left( M + 2t_2 \sin \phi \sum_{\boldsymbol{\gamma}_i} \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\gamma}_i) \right)^2}. \quad (1.24)$$

Dada la información del espectro y de sus autoestados, es posible determinar el invariante que sostiene la existencia del efecto Hall cuántico para el modelo de Haldane [41].

### 1.2.3.2. Caracterización topológica

El nuevo término de segundos vecinos que introduce Haldane produce la deseada ruptura de reversión temporal y además ensancha la brecha energética entre la banda de valencia y de conducción al introducir un término que rompe la simetría de inversión. Haldane mostró [5] que para una apropiada elección de los parámetros asociados a los nuevos términos, podemos distinguir entre un aislante de Chern que exhibe efecto Hall cuántico y un aislante trivial, esto mediante el cómputo del *número de Chern*

$$\mathcal{C} = \frac{1}{4\pi} \int_{\text{BZ}} \frac{\mathbf{d}(\mathbf{k})}{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^3} \left( \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right) d^2\mathbf{k}, \quad (1.25)$$

con  $\mathbf{d}(\mathbf{k})$  el vector que descompone al Hamiltoniano del modelo de Haldane en el mismo sentido de (1.13).

De manera precisa, es posible demostrar mediante una expansión del Hamiltoniano de Bloch en torno a los conos de Dirac  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{K}'$  que para  $|M| > 3t_2 \sin \phi$  se encuentra que  $\mathcal{C} = 0$  para la banda de valencia, dando paso a un aislante trivial y cuando  $|M| < 3t_2 \sin \phi$  el número de Chern  $\mathcal{C} = \pm 1$ . Estas relaciones definen el diagrama de fase topológico para el modelo de Haldane, como se muestra en la Fig. (1.7). La consecuencia observable del número de Chern se enuncia a través del resultado de *correspondencia del interior con la frontera*.

### 1.2.3.3. Correspondencia del interior con la frontera

Conviene recordar que el número de Chern se computa en la abstracción del modelo de Haldane como una hoja infinita con simetría de traslación en ambas direcciones. Sin embargo, el hecho de que la física del material infinito tenga topología no trivial con  $\mathcal{C} \neq 0$  tiene una consecuencia concreta: para un sistema con condiciones de borde abiertas, el número de Chern determina el número neto de estados de borde moviéndose en una dirección en cada frontera del material [35, 42], como se muestra en la Fig. (1.6).

Argumentos para justificar esta relación datan desde el trabajo de Laughlin para entender la existencia de estados de borde<sup>3</sup> en el efecto Hall cuántico [3]. Este tópico es un tema recurrente para diferentes clases de aislantes topológicos, con invariantes diferentes al número de Chern. Demostraciones generales de este principio son un tópico activo de investigación altamente técnico en la teoría de aislantes topológicos y no son parte de la investigación en esta tesis.

## 1.2.4. Efecto Hall cuántico de espín y aislantes topológicos $\mathbb{Z}_2$

Para un aislante de Chern hemos identificado como ingrediente principal la ruptura de simetría de reversión temporal, incluso sin la necesidad de *flujo* magnético. Quince años después de la propuesta de Haldane para obtener topología no trivial, aparece una extensión para generar esta física en sistemas que preservan simetría de reversión temporal. A través de la incorporación del acoplamiento espín-órbita en sistemas 2D,

---

<sup>3</sup>Abarcaremos este argumento en el capítulo 4.

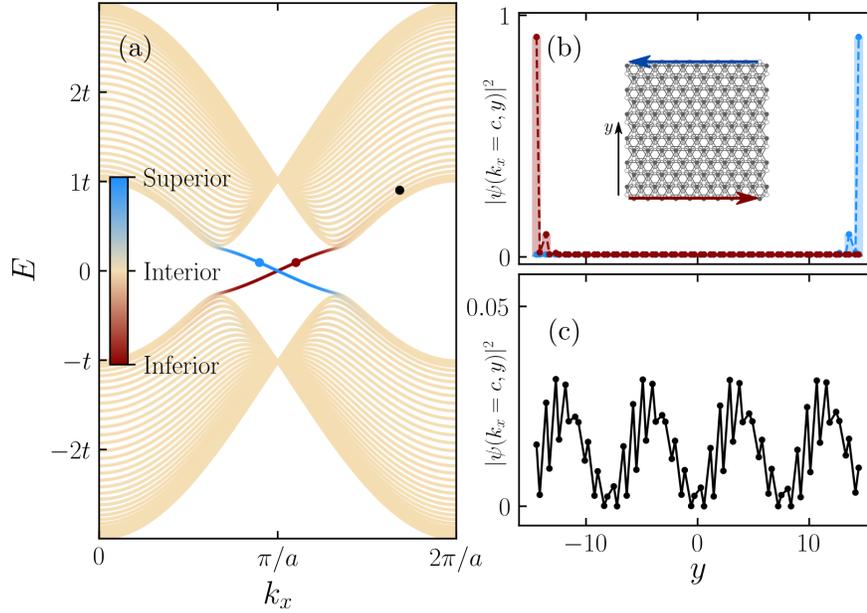


Figura 1.6: Estructura de bandas y autoestados del modelo de Haldane con condiciones de borde abiertas: **(a)** Espectro para el modelo de Haldane en una cinta de terminación tipo zig-zag. La escala de color codifica el peso de la función de onda asociada  $|\psi(k_x, y)|^2$  cerca del borde de la cinta. Los estados asociados a los puntos  $(k, E)$  señalados en rojo, azul y negro son señalados en (b) y (c). **(b)** Estados de borde quirales localizados en los bordes de la muestra junto a una representación esquemática de la cinta. El momento  $k_x = c$  está indicado para enfatizar que el estado tiene un momento constante fijo. **(c)** Estado genérico sin localización definida.

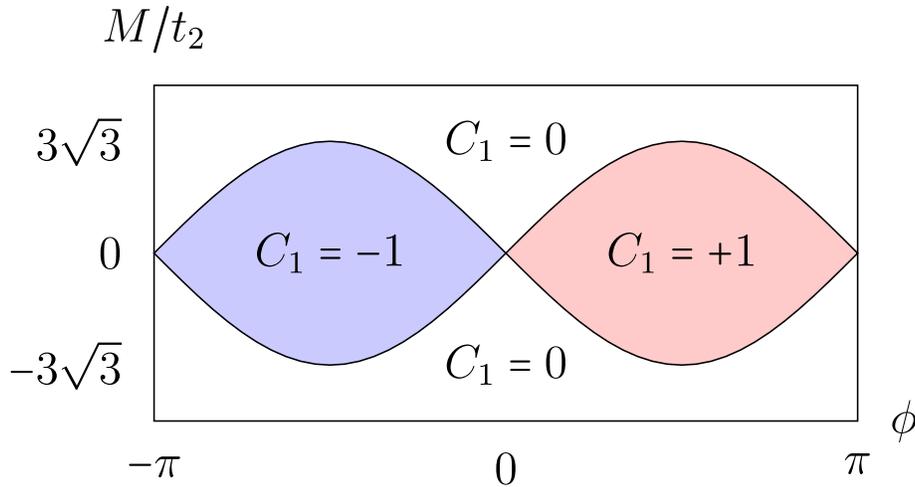


Figura 1.7: Diagrama de fase topológico para el modelo de Haldane. Dependiendo de la elección de parámetros, el sistema puede exhibir una cantidad de estados de borde de acuerdo al número de Chern asociado al sistema de bulto. Cada transición entre la frontera es una transición de fase topológica. Imagen extraída de [41].

el cual cumple esta condición y abre una brecha, Kane y Mele [10] demostraron que se puede generar una clase topológica diferente a los aislantes de Chern y que también exhiben estados de borde robustos, *protegidos* por la preservación de la simetría de reversión temporal y caracterizados por un invariante topológico denominado  $\mathbb{Z}_2$  [11]. Sin embargo, la fenomenología de estos estados es radicalmente diferente: por cada uno de los bordes de la muestra se conducen *dos* estados contrapropagantes los cuales no se dispersan entre sí y llevan espín opuesto. En consecuencia, la conductividad Hall de un aislante topológico  $\mathbb{Z}_2$  es  $\sigma_{xy} = 0$  para carga, pero  $\sigma_{xy}^s = 2e^2/h$  para espín [12].

Originalmente este modelo fue propuesto para grafeno con acoplamiento espín-órbita intrínseco, sin embargo la magnitud de este es un tópico controvertido debido a la dificultad de su medición y al ser este mucho más pequeño que lo estimado por Kane y Mele [15]. La realización experimental del efecto Hall cuántico de espín fue inicialmente comprobada en pozos cuánticos de HgTe/CdTe [12], cuyo modelo más próximo fue propuesto por Bernevig, Hughes and Zhang [13].

#### 1.2.4.1. Modelo de Kane y Mele

Vamos a extender el modelo de Haldane para el caso de fermiones con espín  $s = 1/2$  usando la misma red. El término de masa de Haldane al ser doblado para ambos grados de libertad puede asociarse a un término de espín-órbita intrínseco.

Concretamente el Hamiltoniano *tight-binding* para el modelo de Kane y Mele es

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Kane-Mele}} = & t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + i\lambda_{\text{so}} \sum_{\langle\langle i \leftarrow j \rangle\rangle} \nu_{ij} c_i^\dagger s_z c_j \\ & + i\lambda_{\text{R}} \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger \left( \mathbf{s} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij} \right)_z c_j + \lambda_{\text{v}} \sum_i \xi_i c_i^\dagger c_i. \end{aligned} \quad (1.26)$$

El primer término corresponde al término usual de acople de primeros vecinos del grafeno, el término proporcional a  $\lambda_{\text{so}}$  representa el acople espín-orbita intrínseco representado mediante un acople orientado a segundos vecinos complejos con  $\nu_{ij}$  dado por (1.19). El término proporcional a  $\lambda_{\text{R}}$  representa un acoplamiento espín-órbita de tipo Rashba a primeros vecinos, con  $\hat{\mathbf{d}}_{ij}$  la dirección unitaria de acople entre primeros vecinos. Este término que rompe simetría  $z \rightarrow -z$ , el cual puede aparecer como consecuencia de aplicar un campo eléctrico perpendicular o debido a la acción de un sustrato, como en heteroestructuras 2D. El término proporcional a  $\lambda_{\text{v}}$  representa un término de masa de tipo Semenoff como aquel introducido en el modelo de Haldane. A través de transformada de Fourier, gracias al teorema de Bloch podemos escribir el Hamiltoniano de la forma

$$\mathcal{H}_{\text{Kane-Mele}}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^5 d_i(\mathbf{k})\Gamma_i + \sum_{i<j, i=1}^5 d_{ij}(\mathbf{k})\Gamma_{ij}, \quad (1.27)$$

donde cada componente de vector  $\mathbf{\Gamma}$  y  $\Gamma_{ij}$  vienen dadas por

$$\mathbf{\Gamma} = \left( \sigma_x \otimes s_0, \sigma_z \otimes s_0, \sigma_y \otimes s_x, \sigma_y \otimes s_y, \sigma_y \otimes s_y \right), \quad (1.28)$$

$$\Gamma_{ij} = \frac{1}{2i} [\Gamma_i, \Gamma_j], \quad (1.29)$$

donde  $\sigma_i$  y  $s_i$  son las matrices de Pauli representando de manera independiente el grado de libertad de subred ( $A, B$ ) y espín ( $\uparrow, \downarrow$ ). Los coeficientes no nulos que acompañan a las matrices  $\Gamma_i$  vienen dados por

$$d_1 = t \left( 1 + 2 \cos \left( \frac{k_x a}{2} \right) \cos \left( \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \right) \right), \quad (1.30)$$

$$d_2 = \lambda_v, \quad (1.31)$$

$$d_3 = \lambda_R \left( 1 - \cos \left( \frac{k_x a}{2} \right) \cos \left( \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \right) \right), \quad (1.32)$$

$$d_4 = -\sqrt{3} \lambda_R \sin \left( \frac{k_x a}{2} \right) \sin \left( \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \right) \quad (1.33)$$

y los términos no nulos que acompañan a los conmutadores

$$d_{12} = -2t \cos \left( \frac{k_x a}{2} \right) \sin \left( \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \right), \quad (1.34)$$

$$d_{15} = \lambda_{so} \left( 2 \sin(k_x a) - 4 \sin \left( \frac{k_x a}{2} \right) \cos \left( \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \right) \right), \quad (1.35)$$

$$d_{23} = -\lambda_R \cos \left( \frac{k_x a}{2} \right) \sin \left( \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \right), \quad (1.36)$$

$$d_{24} = \sqrt{3} \lambda_R \sin \left( \frac{k_x a}{2} \right) \cos \left( \frac{\sqrt{3} k_y a}{2} \right). \quad (1.37)$$

Con esta información podemos obtener toda la información relativa al espectro y a los autoestados del modelo de Kane y Mele.

#### 1.2.4.2. Caracterización topológica

Como hemos mencionado, una diferencia fundamental entre el modelo de Haldane y el modelo de Kane y Mele es que este último necesita la simetría de reversión temporal preservada para sostener física topológica. En tanto este sea el caso, el sistema exhibirá efecto Hall cuántico de espín.

El invariante topológico que determina el número de estados de borde en un borde, está dado por el invariante  $\mathbb{Z}_2$ . La definición matemática de este invariante puede encontrarse en [10, 35, 42].

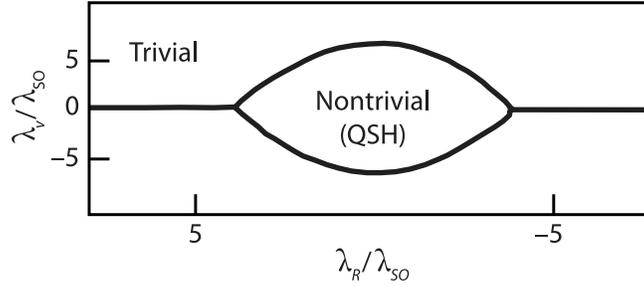


Figura 1.8: Diagrama de fases topológicas como función de los parámetros del sistema. Para el caso no trivial, en una cinta del modelo de Kane y Mele observaremos los estados helicoidales polarizados en espín doblemente degenerados y contrapropagantes. Imagen extraída de [35].

Para entender porqué la simetría de reversión temporal interviene en la robustez de los estados helicoidales y evita que los estados de borde se dispersen, tenemos que recurrir a un resultado de mecánica cuántica: el operador de reversión temporal para partículas de espín  $1/2$  cumple

$$T^2 = -1, \quad (1.38)$$

y si un sistema es invariante ante reversión temporal, es decir  $[\mathcal{H}, T] = 0$ , el teorema de Kramers nos dice que si  $\psi$  es solución de la ecuación de Schrödinger, entonces  $T\psi$  es también una solución linealmente independiente con el mismo autovalor y de espín opuesto. Es decir, un estado  $\psi(\mathbf{k})$  y su par  $T\psi(\mathbf{k})$ , que tiene momento  $-\mathbf{k}$  y autovalores  $E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k})$  están siempre presentes. Es posible demostrar, mediante un cálculo explícito de transporte que si la muestra que alberga estos estados posee una región con un defecto que preserve reversión temporal, entonces los pares de Kramers no se dispersan entre sí y la transmisión de cada estado sobre el defecto es perfecta [42].

### 1.2.4.3. Clasificación de otros aislantes topológicos

Los ejemplos del modelo de Haldane y el modelo de Kane y Mele representan solamente dos casos particulares de una clasificación de aislantes topológicos más amplia, conocida como la *tabla periódica de los aislantes topológicos*. Esta taxonomía de los aislantes topológicos y superconductores se basa en el tipo de simetrías que tiene y su dimensión, luego le asigna un invariante topológico determinado por una determinada fórmula [43-45].

## 1.3. Sistemas forzados periódicamente

En las secciones anteriores hemos intentado reforzar la idea, desde un ángulo inductivo, cómo la apropiada modificación del sistema conduce a la emergencia de nueva física. Sin embargo, algunas de estas dependen de detalles microscópicos del sistema que una vez fijos son difíciles de controlar a voluntad para generar nuevos conceptos y eventuales aplicaciones.

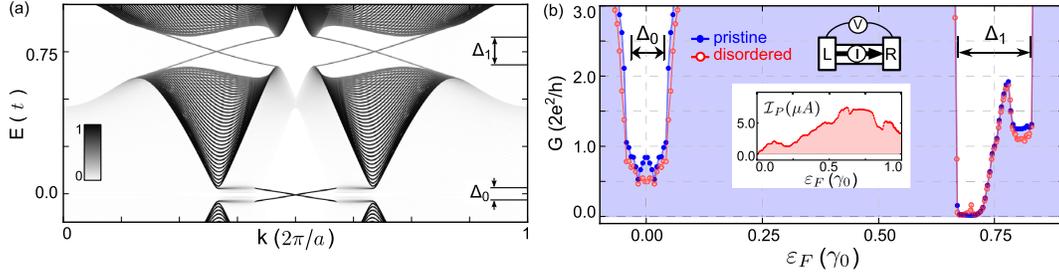


Figura 1.9: **(a)** Espectro de cuasienergías pesados sobre procesos elásticos para una cinta de grafeno zig-zag con  $\hbar\Omega = 1.5t$ , con el coeficiente que caracteriza la intensidad del potencial externo  $z = 2\pi a_0 A_0 / (\Phi_0 \sqrt{3}) \approx 0.15$ , con  $\Phi_0$  el cuanto de flujo magnético y  $A_0$  la amplitud del láser normal a la muestra. **(b)** Conductancia de dos terminales para la cinta de grafeno irradiada con desorden, dando paso a corrientes de bombeo y a cuantización aproximada de la conductancia de dos terminales, sugiriendo una dependencia con la densidad de estados promedio. Imagen extraída de [14].

Un mecanismo que ha sido explotado para poder controlar la fenomenología cuántica de un sistema es la introducción de potenciales dependientes del tiempo que sean periódicos. Esta herramienta constituye una vía a la modificación de propiedades, por ejemplo, electrónicas de un sólido, proporcionando nuevo comportamiento de transporte o incluso generando un mecanismo de encendido y apagado de topología bajo demanda. Un ejemplo arquetípico de esta situación, y que inspira fuertemente los resultados de esta tesis es el grafeno irradiado, el cual exhibe bajo luz circularmente polarizada la emergencia de estados topológicos en el mismo sentido del efecto Hall cuántico, generando de manera efectiva la física del modelo de Haldane con algunas diferencias en propiedades de transporte [14, 46-48]. Debido a que estos estados son generados mediante un potencial periódico en el tiempo, el grafeno irradiado pertenece al grupo de los *aislantes topológicos de Floquet*, término acuñado en [49].

Los sistemas forzados periódicamente son convenientemente tratados mediante la *Teoría de Floquet*[50], la cual es análoga al caso de la teoría de Bloch para sistemas que presentan simetría de traslación, pero esta vez para traslaciones temporales. El objeto central del estudio de un sistema de Floquet reside sobre un Hamiltoniano del tipo

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}(\mathbf{r}, t + T), \quad (1.39)$$

con  $T = 2\pi/\Omega$ . En esta sección introduciremos algunas consecuencias derivadas del *teorema de Floquet* las cuales conformarán gran parte del núcleo técnico de los resultados de esta tesis.

### 1.3.1. Contexto actual

El control y la generación de fases cuánticas de la materia son parte central de la teoría moderna de materia condensada [28]. En este sentido, la efectiva manipulación y la existencia de fases exclusivas que ofrecen los sistemas fuera del equilibrio —y en particular los sistemas forzados periódicamente— representan una vía prometedora

para el desarrollo de nuevos dispositivos [16]. Un ejemplo es la generación y estudio de transporte en el caso del grafeno irradiado, como mostrado en la Fig. (1.9)

La física de sistemas forzados periódicamente ofrece fases que no tienen contraparte estática y que muestran firmas topológicas únicas. Entre algunas de estas fases se destacan la fase de aislante topológico anómalo de Floquet [21], los aislantes anómalos de Floquet-Anderson [20] y los Cristales de Tiempo [51]. Algunas de estas fases incluso logran ser replicadas en sistemas de caminatas cuánticas [52, 53] y modelos de red [54] los cuales pueden tratarse mediante el formalismo de Floquet y exhiben firmas topológicas y de transporte similares a los sistemas electrónicos. Propuestas que combinan la física de sistemas de Floquet y sistemas no hermitianos han sido recientemente formuladas generalizando la teoría de fases topológicas fuera del equilibrio [55].

No obstante, la idea del uso de potenciales periódicos en el tiempo trasciende a sistemas de física del sólido. Para probar este tipo de fenomenología, sistemas que experimentalmente se comportan de manera efectiva como sistemas electrónicos forzados han servido como campos de pruebas, destacando el uso de sistemas fotónicos [24, 56], átomos ultra fríos [22] y también en redes acústicas [23]. De manera reciente y relevante para esta tesis, la física del efecto Hall cuántico en aislantes topológicos de Floquet ha sido comprobada experimentalmente en grafeno ópticamente excitado [57, 58].

### 1.3.2. Teoría de Floquet

La evolución temporal  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  de un sistema cuántico de muchas partículas puede ser descrita en términos de la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.40)$$

Múltiples técnicas pueden ser empleadas para resolver esta ecuación diferencial, dependiendo de los tiempos característicos del sistema. Si el Hamiltoniano se ve modificado por un término adicional que varía mucho más lento que el Hamiltoniano original, técnicas como el teorema adiabático resultan útiles. En caso contrario, es necesario recurrir a técnicas más generales.

#### 1.3.2.1. Teorema de Floquet

Asumamos únicamente que el Hamiltoniano que describe la dinámica del sistema cumpla que es  $T$ -periódico, es decir  $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}(\mathbf{r}, t + T)$ . Si definimos el operador de traslación temporal por un período  $\mathcal{T}_T$ , notamos que

$$\mathcal{T}_T \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H}(\mathbf{r}, t + T) \Psi(\mathbf{r}, t + T) = \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) \mathcal{T}_T \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.41)$$

Dado que esta relación es válida para cualquier función y en particular, para la función de onda del problema definido por (1.40), notamos que  $[\mathcal{T}_T, \mathcal{H}] = 0$ . Por consi-

guiente, podemos elegir las soluciones de  $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$  también como base de autoestados de  $\mathcal{T}_T$

$$\mathcal{T}_T \Psi(\mathbf{r}, t) = C \Psi(\mathbf{r}, t) \Rightarrow C \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t + T), \quad (1.42)$$

con  $C \in \mathbb{C}$  una constante arbitraria. Haciendo uso de la condición de normalización de  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  y  $\Psi(\mathbf{r}, t + T)$  concluimos que  $C$  es necesariamente un número complejo de módulo unidad el cual podemos caracterizar mediante una fase  $e^{-i\alpha}$

$$e^{-i\alpha} \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t + T). \quad (1.43)$$

Podemos generalizar este resultado al escribir (1.43) como

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{\alpha}{T}t} \phi(\mathbf{r}, t), \quad (1.44)$$

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t + T), \quad (1.45)$$

lo cual se puede probar de manera directa desde (1.44)

$$\Psi(\mathbf{r}, t + T) = e^{-i\frac{\alpha}{T}(t+T)} \phi(\mathbf{r}, t + T) = e^{-i\alpha} e^{-i\frac{\alpha}{T}t} \phi(\mathbf{r}, t), \quad (1.46)$$

$$= e^{-i\alpha} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.47)$$

que es lo mismo que (1.43). Finalmente, introduciendo  $\varepsilon \equiv \hbar\alpha/T$  obtenemos el resultado conocido como *Teorema de Floquet* [50]: Si el Hamiltoniano que gobierna la evolución de un sistema cuántico es  $T$ -periódico, las soluciones de la ecuación de Schrödinger pueden ser escritas como el producto de una fase y una función  $T$ -periódica:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{\varepsilon}{\hbar}t} \phi(\mathbf{r}, t), \quad (1.48)$$

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t + T). \quad (1.49)$$

El teorema de Floquet impone una dramática consecuencia en la física de los sistemas forzados periódicamente: la periodicidad del espectro. En sistemas en los cuales el Hamiltoniano es  $T$ -periódico la energía no está unívocamente definida, por ejemplo, al hacer

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon + p\hbar\Omega, \quad \text{con } p \in \mathbb{Z} \quad \text{y} \quad \Omega = \frac{2\pi}{T}, \quad (1.50)$$

en (1.43) obtenemos que

$$\Psi(\mathbf{r}, t + T) = e^{-i\frac{(\varepsilon + p\hbar\Omega)T}{\hbar}} \Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{\varepsilon T}{\hbar}} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.51)$$

donde hemos usado que  $e^{-ip\Omega T} = 1$  y hemos llegado exactamente a la misma conclusión que al usar únicamente  $\varepsilon$ . Esta particularidad nos indica que al definir

$$\varepsilon_n = \varepsilon + n\hbar\Omega, \quad (1.52)$$

con  $n \in \mathbb{Z}$ , tenemos energías de estados físicamente equivalentes [15, 59-61]. Dada esta redundancia en el espectro, el coeficiente  $\varepsilon$  no tiene la interpretación de energía como en problemas estacionarios. Para hacer evidente esta distinción denominaremos  $\varepsilon$  como la *cuasienergía*. Es costumbre acotar el valor de  $\varepsilon$  al intervalo  $(-\hbar\Omega/2, \hbar\Omega/2)$ , intervalo al cual denominaremos *primera zona de Floquet*.

### 1.3.2.2. Hamiltoniano de Floquet

El teorema de Floquet permite expresar el problema (1.40) de una manera análoga a la ecuación de Schrödinger para problemas estacionarios. Consideremos  $\Psi_\alpha(\mathbf{r}, t)$  como la  $\alpha$ -ésima solución de nuestro problema con cuasienergía  $\varepsilon_\alpha$  definida en la primera zona de Floquet. Al reemplazar en (1.40) usando (1.48)

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, t) \left( e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \phi_\alpha(\mathbf{r}, t) \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \phi_\alpha(\mathbf{r}, t) \right), \quad (1.53)$$

$$e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) \phi_\alpha(\mathbf{r}, t) = e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar} \left[ \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{r}, t) + i\hbar \frac{\partial \phi_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right], \quad (1.54)$$

$$\left[ \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \phi_\alpha(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{r}, t), \quad (1.55)$$

$$\mathcal{H}_F \phi_\alpha(\mathbf{r}, t) \equiv \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{r}, t), \quad (1.56)$$

en donde hemos definido el *Hamiltoniano de Floquet* mediante

$$\mathcal{H}_F = \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (1.57)$$

La formulación de la ecuación de Schrödinger otorgada por (1.56) admite una expresión explícita estática que resultará particularmente útil para resolver numéricamente un sistema forzado periódicamente. Nuevamente, explotando el hecho de que  $\mathcal{H}(\mathbf{r}, t)$  y  $\phi_\alpha(\mathbf{r}, t)$  son  $T$ -periódicos, podemos expandirlos en series de Fourier mediante

$$\phi_\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_m \phi_\alpha^m(\mathbf{r}) e^{im\Omega t}, \quad (1.58)$$

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \mathcal{H}^m(\mathbf{r}) e^{im\Omega t}, \quad (1.59)$$

con  $T = 2\pi/\Omega$ , desacoplando la parte espacial y/o espín de la temporal. Para simplificar la notación, omitiremos la dependencia explícita de las funciones  $\phi$  y del Hamiltoniano:

$$\sum_{m,m'} \mathcal{H}^{m'} e^{i\Omega t(m+m')} \phi_\alpha^m + \hbar\Omega \sum_m m \phi_\alpha^m e^{im\Omega t} = \varepsilon_\alpha \sum_m \phi_\alpha^m e^{im\Omega t}. \quad (1.60)$$

Haciendo uso de la ortogonalidad de las funciones  $\{e^{in\Omega t}\}$

$$\frac{1}{T} \int_0^T e^{i(n-m)\Omega t} dt = \delta_{nm}, \quad (1.61)$$

premultiplicamos (1.60) por  $e^{-in\Omega t}$  e integramos en un período

$$\sum_{m,m'} \mathcal{H}^{m'} \phi_\alpha^m \frac{1}{T} \int_0^T e^{-in\Omega t} e^{i\Omega t(m+m')} dt + \sum_m m \hbar\Omega \phi_\alpha^m \frac{1}{T} \int_0^T e^{-in\Omega t} e^{im\Omega t} dt = \varepsilon_\alpha \sum_m \phi_\alpha^m \delta_{nm}, \quad (1.62)$$

de donde obtenemos finalmente

$$\varepsilon_\alpha \phi_\alpha^n(\mathbf{r}) = \sum_m \left( \mathcal{H}^{n-m}(\mathbf{r}) + m \hbar\Omega \delta_{nm} \right) \phi_\alpha^m(\mathbf{r}), \quad (1.63)$$

de donde (1.59) interpretamos que

$$\mathcal{H}^{m-n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) e^{-i(m-n)\Omega t} dt, \quad (1.64)$$

y que el bloque  $\langle m | \mathcal{H}_F | n \rangle$  del Hamiltoniano de Floquet (1.57) puede ser escrito como

$$\langle m | \mathcal{H}_F(\mathbf{r}) | n \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) e^{-i(m-n)\Omega t} dt + m \hbar\Omega \delta_{nm}, \quad (1.65)$$

lo que representa un problema de autovalores estático en términos de las componentes de Fourier temporales y sus componentes de posición y/o espín. Este tipo de expansión es una descripción del problema original temporal con la salvedad de que el espacio de Hilbert resultante corresponde al espacio producto conformado por las funciones  $T$ -periódicas tales que  $\langle t | n \rangle = e^{in\Omega t}$ , con  $n \in \mathbb{Z}$ , al cual denominaremos  $\mathcal{T}$ , y las funciones en espacio real (o momento) y/o espín que conforman la parte estática, subespacio que denotaremos por  $\mathcal{R}$ . Por ende, el espacio de Hilbert completo es  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$ , también denominado en la literatura como *espacio de Sambe*[62]. Si denotamos por índice latino  $|i\rangle$  a los elementos de la base de  $\mathcal{T}$  y por índice griego  $|\lambda\rangle$  a los elementos de la base de  $\mathcal{R}$ , cada elemento de matriz de  $\mathcal{H}_F$  viene dado por

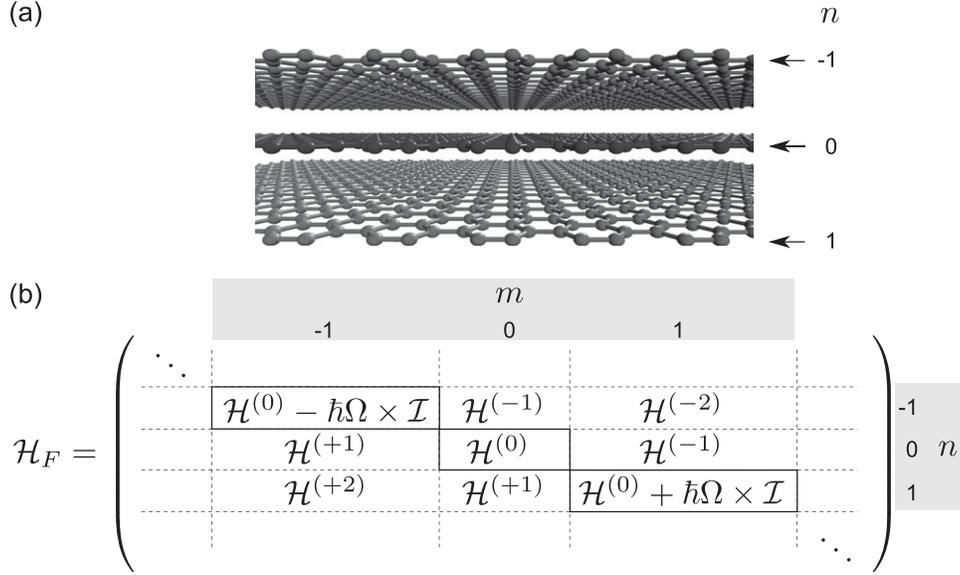


Figura 1.10: **(a)** Un sistema representado por un Hamiltoniano  $T$ -periódico puede ser ahora abstraído a una serie de réplicas de él mismo y los acoples entre ellas. **(b)** Representación matricial por bloques del Hamiltoniano de Floquet. Los acoples entre réplicas, ocupando posiciones fuera de la diagonal, median la interacción luz-materia para intercambiar un determinado cuanto de  $\hbar\Omega$ . Los términos diagonales representan a cada copia del sistema en la acepción de (a). Imagen extraída de [15].

$$\langle m, \lambda | \mathcal{H}_F | n, \sigma \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \langle \lambda | \mathcal{H}(\mathbf{r}, t) | \sigma \rangle e^{-i(m-n)\Omega t} dt + m\hbar\Omega \delta_{nm} \delta_{\lambda\sigma}. \quad (1.66)$$

### 1.3.2.3. Descripción efectiva: Réplicas de Floquet

La descripción provista por (1.65) nos permite entender que el Hamiltoniano de Floquet describe, de manera efectiva, al sistema imitando una descripción estática pero compuesta de múltiples *réplicas de Floquet*. Estas réplicas están desplazadas en cuántos de energía  $m\hbar\Omega$  y los bloques fuera de la diagonal del espacio de funciones periódicas representan los acoples entre réplicas. El índice  $n$  puede ser entendido físicamente como el número de excitaciones mediada por fotones en el sistema [59]. La Fig. (1.10)(a) y (b) ejemplifican la descripción y su correspondiente expresión matricial por bloques del Hamiltoniano estático  $\mathcal{H}^0$  con los acoples a réplicas  $\mathcal{H}^{n \neq 0}$ .

El cálculo de elementos de matriz explícito es posible mediante (1.66), lo cual hace de esta ecuación muy apropiada para elaborar enfoques numéricos a sistemas forzados periódicamente. Sin embargo, es importante notar que su dimensión es infinita, pues hereda esta propiedad del espacio  $\mathcal{T}$ . Con una apropiada elección del número de réplicas necesarias, es posible truncar  $\mathcal{H}_F$  mediante el estudio de la convergencia de una función de respuesta. De esta manera, esta formulación es adecuada para cualquier potencial  $T$ -periódico, incluso fuera del régimen perturbativo y no adiabático<sup>4</sup>.

<sup>4</sup>Sin embargo, para garantizar convergencia en el caso adiabático, es importante considerar un gran

### 1.3.2.4. Densidad de estados promedio

Para determinar la densidad de estados usando el formalismo de Floquet, se puede utilizar el formalismo de funciones de Floquet-Green. Asumiendo que la frecuencia del muestreo de la densidad de estados es mucho más lenta que el período de oscilación de  $\mathcal{H}(t)$  se obtiene la densidad de estados promediada en el tiempo [19]

$$\bar{\rho}(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Tr} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[ \sum_{\alpha, m} \frac{[\phi_\alpha^m(\mathbf{r})]^* \phi_\alpha^m(\mathbf{r}')}{\epsilon_\alpha - m\hbar\Omega - \epsilon + i\eta} \right], \quad (1.67)$$

$$= \sum_{\alpha, m} A_\alpha^m \delta(\epsilon_\alpha - m\hbar\Omega - \epsilon), \quad (1.68)$$

donde  $\epsilon_\alpha$  es la cuasienergía en la primera zona de Floquet, la traza se efectúa en el subespacio  $\mathcal{R}$  de las funciones estáticas que componen al espacio de Sambe y

$$A_\alpha^m = \int d\mathbf{r} [\phi_\alpha^m(\mathbf{r})]^* \phi_\alpha^m(\mathbf{r}), \quad (1.69)$$

se denomina la *función espectral*. Esta función provee una forma útil de visualizar cómo los estados de Floquet se acoplan a cuasienergías específicas con sistemas no forzados.

### 1.3.2.5. Limitaciones

El tratamiento de problemas periódicos con el método de funciones de Floquet presenta algunas limitantes por su construcción. De manera resumida podemos indicar: i) Fuera del régimen monocromático incrementa las dimensiones del Hamiltoniano de Floquet de manera crítica al necesitarse una estructura de bloques para cada frecuencia haciendo su implementación numérica muy exigente. ii) El formalismo de Floquet permite calcular las cantidades en el régimen estacionario, en donde todos los transientes ya han desaparecido en el sistema. Por lo tanto, cualquier efecto que sea dependiente de la dinámica para tiempos cortos no puede ser tratada por el método de funciones de Floquet [63]. Estas escalas de tiempo cortas no son relevantes para las conclusiones y resultados de este trabajo.

## 1.4. Transporte cuántico en sistemas mesoscópicos

Una de las propiedades más relevantes de la física de aislantes topológicos en dos dimensiones es la existencia de canales de transporte de carga y/o espín fuertemente localizados en los bordes de estos. Las propiedades de robustez ante imperfecciones y su quiralidad/helicidad los hacen especialmente interesantes para aplicaciones en nanodispositivos.

Para hacer contacto entre los estados de borde topológicos y observables físicos necesitamos conceptos sobre transporte cuántico que introduciremos en esta sección.

---

número de réplicas. Esto pues las expansiones en términos de las frecuencias escalan como su inverso.

Nuestro objetivo principal es tener una receta para calcular conductancias para dos o más terminales, y relacionarlas a canales de transporte abiertos en una muestra finita de aislante topológico.

### 1.4.1. Matriz- $\mathcal{S}$

Para conductores coherentes, podemos asociar el cálculo de probabilidad de transmisión por modos con la matriz- $\mathcal{S}$ . Esta matriz relaciona la amplitud de las ondas desde el electrodo incidente con el de salida. Por ejemplo, para el caso esbozado en la Fig. (1.11), podemos arreglar en un vector las amplitudes de la onda incidente

$$a^{(\text{in})} = \left( a_{L,1}^{(\text{in})} \quad \cdots \quad a_{L,N}^{(\text{in})} \quad a_{R,1}^{(\text{in})} \quad \cdots \quad a_{R,N}^{(\text{in})} \right), \quad (1.70)$$

donde  $a_{L(R),i}^{(\text{in})}$  es la amplitud desde  $L(R)$  en el modo  $i$ . Las amplitudes asociadas a procesos de transmisión y reflexión están descritas por el vector

$$a^{(\text{out})} = \left( a_{L,1}^{(\text{out})} \quad \cdots \quad a_{L,N}^{(\text{out})} \quad a_{R,1}^{(\text{out})} \quad \cdots \quad a_{R,N}^{(\text{out})} \right). \quad (1.71)$$

La matriz- $\mathcal{S}$  es una matriz tal que cumple la igualdad [61, 64]

$$a^{(\text{out})} \equiv \mathcal{S}a^{(\text{in})}. \quad (1.72)$$

El tamaño de la matriz- $\mathcal{S}$  es de  $2N \times 2N$  y tiene la estructura de bloques

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (1.73)$$

donde cada subbloque es de  $N \times N$ :  $r$  y  $r'$  describen la reflexión desde la izquierda hacia la izquierda y desde la derecha a la derecha, mientras que  $t$  y  $t'$  son los subbloques que almacenan las transmisiones desde izquierda a derecha e izquierda a derecha, respectivamente. Los autovalores de la matriz  $tt^\dagger$  corresponden a los valores de la probabilidad de transmisión por cada modo y  $\text{tr}(tt^\dagger)$  corresponde a la transmisión total.



Figura 1.11: Descripción esquemática de las ondas participantes en un proceso de dispersión. Cada vector  $a$  almacena la amplitud de todos los canales disponibles en el electrodo.

### 1.4.2. Fórmula de Landauer

Para estudiar la teoría de transporte cuántico nos centraremos principalmente en la conductancia  $G$ . Este coeficiente caracteriza la respuesta eléctrica de un sistema mesoscópico  $S$  cuando es sometido a una pequeña diferencia de potencial entre los contactos  $\Delta V$ .

En conductores de tamaño macroscópico, la conductancia está dada por la ley de Ohm  $G = \sigma A/L$ , donde  $\sigma$  es un parámetro independiente de la geometría del sistema,  $A$  su ancho y  $L$  su largo. Sin embargo, conforme las dimensiones del sistema se ven reducidas, siendo estas comparables a la longitud de coherencia de los electrones en  $S$ , los efectos cuánticos empiezan a dominar la física y la ley de Ohm ya no es válida [65].

Para introducir la fórmula de Landauer, pensemos inicialmente en el caso de la matriz- $\mathcal{S}$  con un canal abierto para cada electrodo [42]. Suponiendo la incidencia desde  $L$ , con probabilidad de reflexión  $R = |r|^2$  y de transmisión  $T' = |t'|^2$ . Podemos escribir la corriente  $L \rightarrow R$  como

$$I = \frac{2e}{\bar{L}} \sum_k v_k [(1 - R(\varepsilon_k)) f_L(\varepsilon_k) - T'(\varepsilon_k) f_R(\varepsilon_k)], \quad (1.74)$$

con  $\bar{L}$  la longitud de la muestra y  $v_k$  la velocidad de grupo del modo incidente, siendo que la corriente eléctrica transportada a momento  $k$  fijo es  $2ev_k/\bar{L}$  (incluyendo espín up y down). Si consideramos que  $\frac{1}{\bar{L}} \sum_k$  puede ser aproximado por  $\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi}$ , y usando  $1 - R \equiv T = T'$

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{d\varepsilon_k}{dk} [(1 - R(\varepsilon_k)) f_L(\varepsilon_k) - T'(\varepsilon_k) f_R(\varepsilon_k)], \quad (1.75)$$

$$= \frac{2e}{h} \int d\varepsilon T(\varepsilon) [f_L(\varepsilon) - f_R(\varepsilon)], \quad (1.76)$$

para el caso de temperatura cero y diferencia de potencial débil<sup>5</sup>

<sup>5</sup>Donde hemos usado que  $\mu_\alpha = \varepsilon_F + eV_\alpha$ . En estas condiciones podemos aproximar la función de

$$I = \frac{2e^2}{h} \Delta V T(E_F), \quad (1.77)$$

por lo que

$$G = \frac{dI}{d\Delta V} = \frac{2e^2}{h} T(E_F). \quad (1.78)$$

Esta última relación se puede extender para múltiples canales presentes en los electrodos: la fórmula de Landauer [64-66] (ver Fig. (1.12))

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{m \in L} \sum_{n \in R} T_{mn}(E_F) = \frac{2e^2}{h} \sum_{m \in R} \sum_{n \in L} T_{mn}(E_F), \quad (1.79)$$

con  $N = \lfloor k_F W / \pi \rfloor$  y  $T_{mn}$  es la probabilidad de transmisión del modo transversal  $m$ -ésimo hacia el modo de salida  $n$ -ésimo. La igualdad ante el cambio de índices está garantizada por conservación de la probabilidad. Así, la fórmula de Landauer establece una equivalencia entre la conductancia y la transmisión. En el caso de múltiples electrodos, la fórmula de Landauer fue generalizada por Büttiker

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{p \leftarrow q}(E_F) = \frac{2e^2}{h} \sum_{m \in p} \sum_{n \in q} T_{mn}(E_F), \quad (1.80)$$

con  $\bar{T}_{p \leftarrow q}$  la transmisión total desde el contacto  $q$  al  $p$ . Para calcular las probabilidades de transmisión podemos usar la matriz- $\mathcal{S}$ , la cual puede determinarse mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger con condiciones de borde apropiadas o usando el método de funciones de Green fuera del equilibrio. Ambas formulaciones son equivalentes a través de la fórmula de Fisher-Lee [65], la cual enunciaremos en la sección 2.3.2.1.

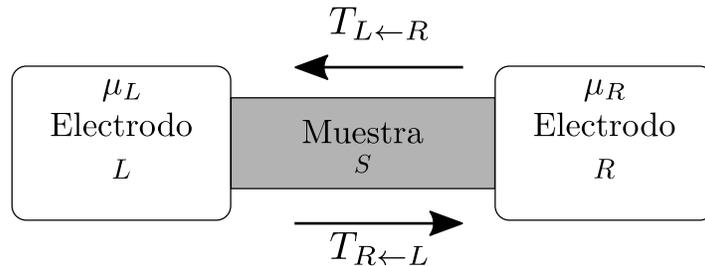


Figura 1.12: Configuración de dos terminales que describe el transporte en la fórmula de Landauer. La muestra de interés es conectada a dos electrodos que están conectados a reservas de electrones a potencial químico  $\mu_{L/R}$ .

---

Fermi-Dirac como  $f_\alpha = f_0 - eV_\alpha \frac{\partial f_0}{\partial E} + O(V_\alpha^2)$ . Con  $f_0$  la función de Fermi-Dirac en equilibrio.

### 1.4.3. Transporte cuántico para sistemas forzados

Podemos extender los conceptos anteriores para el caso de transporte cuántico sobre sistemas de Floquet. Si consideramos el problema de dos terminales, pero esta vez con la muestra descrita por un potencial  $T$ -periódico, la corriente promediada en un período puede ser escrita como [67]

$$\bar{I} = \frac{1}{T} \int_0^T I(t) dt = \frac{2e}{h} \sum_n \int d\varepsilon \left( T_{L \leftarrow R}^{(n)}(\varepsilon) f_R(\varepsilon) - T_{R \leftarrow L}^{(n)}(\varepsilon) f_L(\varepsilon) \right), \quad (1.81)$$

donde  $T_{R \leftarrow L}^{(n)}$  es la probabilidad de transmisión para un electrón desde el electrodo  $L$  con energía  $\varepsilon$  salir en el electrodo  $R$  emitiendo (absorbiendo)  $n > 0$  ( $n < 0$ ) fotones y  $f_\alpha(\varepsilon)$  la distribución de Fermi-Dirac del electrodo  $\alpha$  ( $\alpha = L, R$ ) o para procesos elásticos que no son mediados por absorciones o emisiones con  $n = 0$ . Podemos asociar las transmisiones totales al contabilizar todos los procesos de absorción y emisión posibles al definir

$$T_{L \leftarrow R}(\varepsilon) = \sum_n T_{L \leftarrow R}^{(n)}(\varepsilon), \quad (1.82)$$

$$T_{R \leftarrow L}(\varepsilon) = \sum_n T_{L \leftarrow R}^{(n)}(\varepsilon). \quad (1.83)$$

Para determinar la conductancia de dos terminales ante una diferencia de potencial pequeña a temperatura cero, como en la fórmula de Landauer, podemos escribir (1.81) en términos de  $T(\varepsilon) = \frac{1}{2}(T_{L \leftarrow R}(\varepsilon) + T_{R \leftarrow L}(\varepsilon))$  y  $\delta T(\varepsilon) = \frac{1}{2}(T_{L \leftarrow R}(\varepsilon) - T_{R \leftarrow L}(\varepsilon))$ , resultando a orden lineal

$$\bar{I} = \frac{2e}{h} T(E_F) \Delta V + \frac{4e}{h} \int_{-\infty}^{E_F} \delta T(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (1.84)$$

El último término de esta ecuación es la componente de *corriente de bombeo*, que aparece y es en general no nulo, ya que  $T_{L \leftarrow R} \neq T_{R \leftarrow L}$  [61, 67], en contraste con (1.79) (ver por ejemplo Fig. 1.9(b)). El motivo de esto es que la igualdad  $T_{L \leftarrow R} = T_{R \leftarrow L}$  es en general válida para dos terminales, pero en el caso de sistemas forzados periódicamente, la cantidad de electrodos efectiva se multiplica por el número de réplicas que describe al sistema, siendo de manera global un sistema *multiterminal*, y por ende llevando el problema del cálculo de la matriz- $\mathcal{S}$  a un caso similar al de Landauer-Büttiker.

## 1.5. Sobre esta tesis

Los objetivos fundamentales de esta tesis son controlar y evidenciar nuevos estados topológicos de la materia, principalmente utilizando forzamiento periódico como herramienta, la cual ha probado su madurez teórica (y recientemente experimental) en múltiples sistemas.

Considerando que los estados topológicos de la materia exhiben una inusual persistencia, estos son difíciles de manejar con fines específicos. Utilizaremos modelos históricamente relevantes como campo de prueba de control de corrientes de carga y de espín mediados por estados topológicos, controlar selectivamente su encendido y apagado o generar cambios en su quiralidad. Adicionalmente, también abordaremos fases topológicas generadas por el uso de potenciales periódicos con excepcionales propiedades que no tienen contraparte estática.

La tesis se estructura en tres capítulos que engloban la introducción ya abordada, describiendo conceptos claves y dos capítulos sobre proyectos independientes. El capítulo 2 abarca el modelo de Kane-Mele bajo luz circular y linealmente polarizada, las cuales exhiben fotocorrientes polarizadas en espín mediante la apropiada disrupción de los estados topológicos nativos. Adicionalmente, estudiamos una configuración de transporte que permite generar procesos de espín-flip al utilizar el acople tipo Rashba en conjunción con el acople espín-órbita. El capítulo 3, aborda la fase anómala de Floquet-Anderson, estudiando sus propiedades de transporte asociadas a los estados topológicos que existen únicamente bajo forzamiento. Determinamos un diagrama de fase para identificar en un sistema de dos terminales dónde hay una transición desde aislante anómalo de Floquet a un aislante anómalo de Floquet-Anderson hasta finalmente conseguir la localización de Anderson trivial.

# Capítulo 2

## Corrientes de bombeo polarizadas en espín

Las primeras propuestas teóricas [11, 68] y la subsecuente realización experimental de aislantes topológicos aunó importantes esfuerzos científicos en una comunidad interdisciplinaria que involucra a la física, ciencia de materiales y química [69, 70]. Los estados topológicamente protegidos son atractivos, pues se diferencian de los estados electrónicos usuales con su gran robustez ante la presencia de perturbaciones y desorden. Sin embargo, esta robustez abre nuevos desafíos para su manipulación. Los esquemas típicos como la funcionalización de la superficie son inefectivos cuando se aplican a aislantes topológicos [70]. Por consiguiente, apagar la conducción de carga y/o espín en un aislante topológico ha motivado propuestas para un transistor topológico asistido por campo eléctrico [71, 72], llevando una fase topológica a una trivial, y por ende aislante. Este concepto ha sido realizado experimentalmente de manera reciente [73].

Una línea paralela de investigación busca explotar la interacción de la luz con la materia en materiales para controlar sus propiedades. Esto incluye generar efectos como el dicroísmo, [74, 75] una situación donde los electrones en diferentes valles absorben luz circularmente polarizada en contra/a favor del sentido horario de manera diferente, el cual es relevante en el contexto de materiales en dos dimensiones [76, 77]. Otro enfoque busca usar intensa iluminación láser para cambiar de manera efectiva propiedades del material [58]. En efecto, iluminación láser ha mostrado producir estados híbridos de electrones y fotones<sup>1</sup>. [78, 79] que pueden presentar nuevas propiedades topológicas [16, 17, 19] e incluso exhibir efecto Hall cuántico inducido por luz [57].

En este capítulo volveremos a emplear la idea de la influencia externa de un potencial periódico en el tiempo [80-82], con una modificación clave: en vez de generar fases o estados nuevos, buscaremos activamente la disrupción de estados topológicos existentes. Usaremos como sustrato para probar nuestras ideas al modelo de Kane-Mele, sin embargo las conclusiones extraídas son igualmente aplicables a otros sistemas que posean estructuras de bandas similares [83]. De manera específica, detallaremos cómo

---

<sup>1</sup>A los que nos referiremos también como estados de Floquet-Bloch.

podemos modificar la estructura de bandas de sistemas compatibles con el modelo de Kane-Mele [84] utilizando tres ingredientes principales: la iluminación láser, dicroísmo circular y la hibridación selectiva de estados topológicos con el interior de las bandas que aparecen en la estructura del Hamiltoniano de Floquet asociado al sistema. Probaremos que en diferentes realizaciones de transporte, podemos generar corrientes de carga polarizadas en espín, corrientes puras de espín y también, analizando configuraciones de transporte dependientes del momento angular de espín incidente, podemos generar procesos de espín-*flip* asistidos por luz en los estados topológicos nativos. Estos resultados son resumidos en una de las publicaciones originales que componen esta tesis en [83] [preprint].

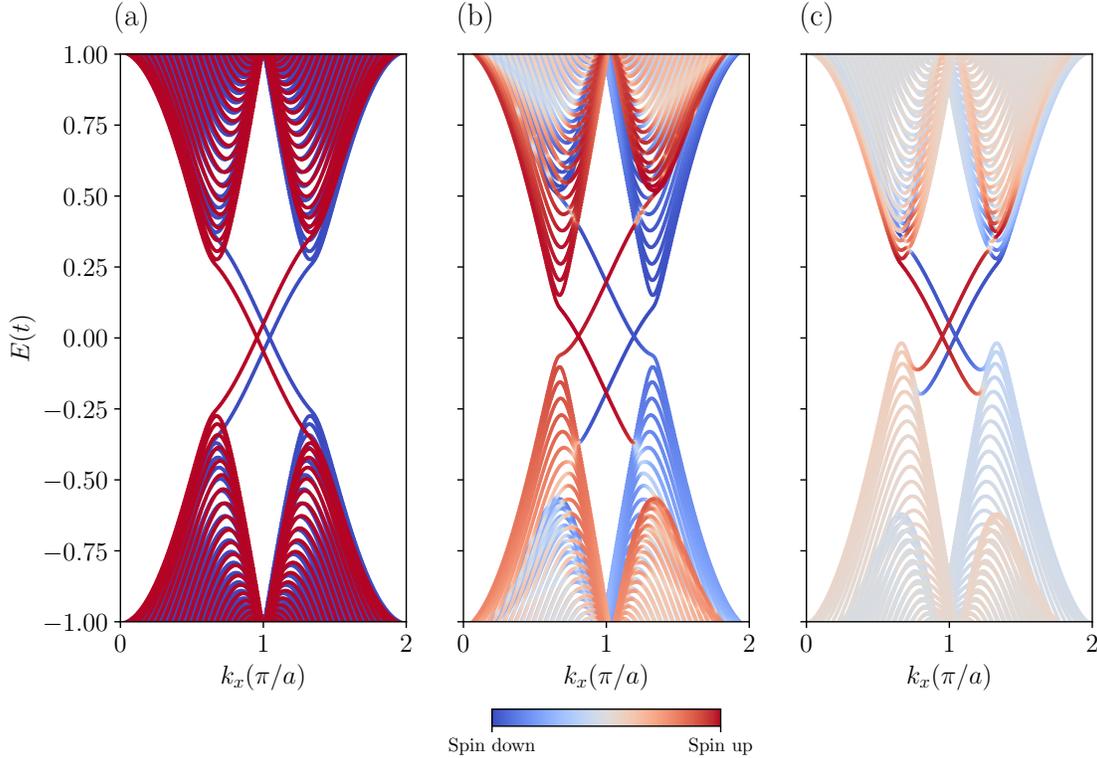


Figura 2.1: Diferentes estructuras de bandas para el modelo de Kane -Mele en una nanocinta infinita de terminación tipo zig-zag. El color codifica el peso de la función de onda en espín  $w_s \equiv |\langle s | \psi(k_x) \rangle|^2$ , con  $s = \{1, -1\}$  para espín up y down respectivamente. Cada recuadro está en la misma escala, siendo azul  $s = -1$  y rojo  $s = 1$  (a) Caso en que el término de acople tipo Rashba es nulo  $\lambda_R = 0$  con un leve término que rompe la simetría entre ambas componentes de espín (sin acoplarlos)  $\lambda_v = 0.05t$  el cual permite distinguir ambos espectros. Si ese coeficiente es nulo ambas componentes son completamente degeneradas. (b) Espectro para  $\lambda_R = 0.05t$ ,  $\lambda_v = 0.2t$  y  $\lambda_{so} = 0.06t$ . En este caso las componentes de espín no son independientes debido a la presencia del acoplamiento tipo Rashba, sin embargo la polarización de espín permanece muy bien definida para estados de borde. (c) Caso en que el acople Rashba es  $\lambda_R = 0.1t$ . Este acoplamiento es muy alto, despolarizando completamente la componente de espín en el interior de las bandas, fenómeno clave que puede permitir procesos de espín-*flip*. El código que genera esta figura se puede ver en el Apéndice A.

## 2.1. Revisitando el modelo de Kane y Mele

El modelo de Kane-Mele introduce la noción de aislante topológico cuyas propiedades están protegidas por la preservación de la simetría de reversión temporal [10, 36]. Este hecho es clave para entender el tipo de perturbaciones que podemos introducir y qué esperar en la consecuente estructura de bandas. Diferentes tipos de términos serán analizados para intentar detentar sus efectos en una posible configuración de transporte.

### 2.1.1. Principales características

El espectro del modelo de Kane-Mele, comparte muchas de las características con el modelo de Haldane para cada una de sus componentes de espín [11, 85, 86]. Gracias a que globalmente la simetría de reversión temporal en este sistema está satisfecha y corresponde a un sistema con espín  $s = 1/2$ , se satisface el teorema de Kramers que describimos en la sección 1.2.4.2. Este hecho es extremadamente importante para entender los resultados siguientes en la sección 2.4 y 2.5, ya que la ruptura de la simetría de reversión temporal implicará efectos dramáticos en el transporte.

Centraremos nuestro análisis de manera exclusiva en el caso de cintas con terminación zig-zag del modelo Kane-Mele. En términos generales, la estructura de bandas hereda las propiedades del modelo de Haldane, exhibiendo una brecha con estados de borde topológicos que atraviesan la muestra. Sin embargo, es necesario notar que hay una distinción importante, puesto que en general, si vemos el Hamiltoniano (1.26), la inclusión de acoples tipo Rashba está permitida, y que de manera explícita no permite utilizar el momento angular de espín en la dirección  $z$  como un buen número cuántico.

En la Fig. 2.1 podemos observar diferentes estructuras de bandas para diferentes valores de los parámetros presentes en (1.26), pero esta vez solo periódico en  $x$ , con  $k_x$  siendo un buen número cuántico. De manera notable, los estados de borde topológicamente protegidos siguen existiendo a pesar de que la intensidad del acople Rashba se aumenta.

### 2.1.2. El rol del acoplamiento tipo Rashba

El acoplamiento espín-órbita es un efecto relativista entre los electrones y el campo eléctrico local que puede ser debido a campos externos o internos. El término que caracteriza a este acople viene dado por [15]

$$\mathcal{H}_{SO} = \frac{\mu_B}{2mc^2} \mathbf{E} \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{p}) = -\frac{\mu_B}{2mc^2} \mathbf{s} \cdot (\mathbf{p} \times \nabla V). \quad (2.1)$$

Los electrones que se mueven rápidamente sienten un campo magnético efectivo en el sistema de reposo relativo a ellos, afectándolos con un término de acople tipo Zeeman en el grado de libertad de espín a través de

$$\mathcal{H}_{SO} = \frac{g\mu_B}{2} \mathbf{B}_R \cdot \mathbf{s}. \quad (2.2)$$

Por consiguiente, se puede asociar entre (2.1) y (2.2) que  $\mathbf{B}_R \sim \mathbf{E} \cdot (\mathbf{s} \times \mathbf{p})$ , el cual se denomina campo Rashba [87], paralelo al plano del material, induciendo precesión del espín de los electrones con frecuencia  $\Omega = \mu_B |\mathbf{B}_R| / \hbar$ . Podemos escribir el acople (2.1) en términos de una fuerza  $\mathbf{F}$

$$\mathcal{H}_{SO} = -\alpha (\mathbf{s} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{F}, \quad (2.3)$$

con  $\alpha$  un parámetro desconocido. Al separar las componentes de la fuerza en una paralela y perpendicular (ver Fig. 2.2) al plano

$$(\mathcal{H}_I)_{ij} = i\gamma_2 (\mathbf{F}_{\parallel} \times \mathbf{d}_{ij}) \cdot \mathbf{s} = i\lambda_{SO} \mathbf{s} \cdot \frac{(\boldsymbol{\delta}_{kj} \times \boldsymbol{\delta}_{ik})}{|\boldsymbol{\delta}_{kj} \times \boldsymbol{\delta}_{ik}|}, \quad (2.4)$$

con  $\gamma_2$  y  $\lambda_{SO}$  constantes dependientes del material,  $\mathbf{d}_{ij}$  el vector unitario entre el sitio  $i$  y  $j$  y  $\boldsymbol{\delta}_{ij} \equiv \boldsymbol{\delta}_j - \boldsymbol{\delta}_i$  con  $\boldsymbol{\delta}_i$  los vectores (1.2). La segunda igualdad solo involucra términos de segundos vecinos, dado que por simetría el acople de espín-órbita intrínseco a primeros vecinos se anula. Notar que el cociente en la relación (2.4) es el término que introdujo Haldane en su modelo [5] dado por (1.19). Otro efecto que debemos considerar es la presencia de un campo eléctrico fuera del plano el cual puede ser inducido por potencial de compuerta o impurezas cargadas debido a posicionar el material sobre un sustrato. Este campo eléctrico quiebra la simetría espacial de inversión induciendo términos de espín-órbita tipo Rashba. Este término permite transiciones entre valores de espín

$$(\mathcal{H}_R)_{ij} = i\gamma_1 (\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij}) \cdot F_{\perp} \hat{z} = i\lambda_R \hat{z} \cdot (\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{d}}_{ij}), \quad (2.5)$$

con  $\gamma_1$  y  $\lambda_R$  parámetros dependientes del material y la interfaz entre el material y el sustrato y  $\hat{\mathbf{d}}_{ij}$  la dirección unitaria de primeros vecinos entre el sitio  $i$  y  $j$ . Los términos (2.4) y (2.5) constituyen el segundo y tercer sumando en (1.26).

Los términos de acople espín-órbita intrínseco y Rashba son sustancialmente diferentes. Este último, al permitir procesos de espín-*flip* impide la definición de  $s_z$  como buen número cuántico. No obstante, en el caso del modelo de Kane-Mele, los estados topológicos permanecen con un peso de espín definido en la brecha, permitiendo asociar a cada uno de ellos una componente de espín de manera inequívoca [10, 11]. De acuerdo al diagrama de fases topológico que ilustramos en la Fig. 1.8. este tipo de términos rompe la simetría de la red hexagonal al cambiar el eje de cuantización del espín, mas no rompe simetría de reversión temporal. Para el rango de amplitudes ubicado en  $\lambda_R < 2\sqrt{3}\lambda_{SO}$ , este término no constituye efectos apreciables en la polarización de espín de los estados topológicos [10, 11], y por tanto, si queremos estudiar el transporte de los estados topológicos para ambas componentes a la vez podemos, sin pérdida de generalidad estudiar cada una de las componentes por separado: un modelo de Haldane y su copia tiempo revertido [11].

Podemos evidenciar de manera explícita la fuerte polarización de espín en las estructuras de bandas de la Fig. 2.1 (c), en donde la polarización de espín en la brecha,

para un acople Rashba alto  $0.1t$  [84], permanece bien definida. Así mismo, cuando el acople tipo Rashba aparece, la polarización del interior de las bandas comienza a hacerse menos definida, siendo prácticamente nula para Rashba más alto Fig. 2.1 (c). En la sección 2.5 propondremos una forma de aprovechar esta despolarización en el interior de las bandas acoplando el sistema de manera adecuada con radiación láser para generar transporte que permitan procesos de espín-*flip* asistidos por luz.

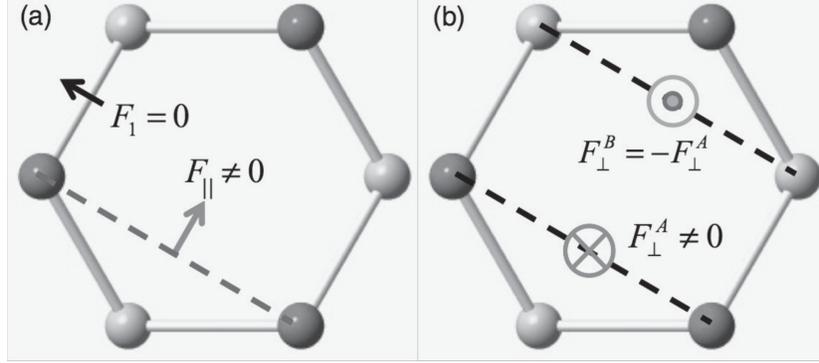


Figura 2.2: Acoplamiento espín-órbita en grafeno: (a) acople espín-órbita intrínseco. (b) acople espín-órbita tipo Rashba. Figura extraída de [15].

## 2.2. Dicroísmo circular en el modelo de Haldane

El concepto de dicroísmo es la propiedad de un material que describe diferentes formas de absorber la luz según la polarización de esta. En particular, el dicroísmo circular corresponde a identificar una distinción en las propiedades de respuesta del sistema bajo radiación electromagnética cuando esta está polarizada en el sentido de las agujas del reloj (en adelante RCP) o en contra de ellas (LCP). Trabajos dirigidos por Ghalamkari, Tatsumi y Saito [88, 89] demuestran que para el caso de materiales de tipo panel de abeja como el grafeno, y también en sus versiones de aislantes topológicos similares al modelo de Haldane, exhiben dicroísmo circular. La conclusión de estos trabajos es que el material absorberá la luz solo en uno de los casos de la polarización circular. Este resultado es un ingrediente fundamental para los resultados que se muestran en la sección 2.4.

El elemento de matriz de transición de los electrones excitados por la luz se puede determinar por

$$\mathbf{M}_{if}(\mathbf{k}) = \langle f | H_{\text{int}} | i \rangle = -\frac{\hbar e}{m\Omega} \sqrt{\frac{I}{c\epsilon}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i(\omega_c - \omega_v - \Omega)t} \mathbf{P} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{k}), \quad (2.6)$$

con  $H_{\text{int}} = \frac{i\hbar e}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla$  el término del Hamiltoniano que caracteriza a la interacción electrón-fotón,  $\Omega$  a frecuencia de la radiación,  $e$  la carga del electrón,  $\epsilon$ ,  $c$  y  $I$  la permitividad eléctrica, la velocidad de la luz en el vacío y la intensidad de la luz. Además,  $\omega_{c,v} = E_{c,v}/\hbar$

la energía del espectro sin irradiar en la banda de conducción o de valencia. Para luz circularmente polarizada, el vector de polarización viene dado por

$$\mathbf{P} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i\sigma \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

donde el  $\sigma = +1$  es para polarización circular en el sentido contrario de las agujas del reloj y  $\sigma = -1$  para el caso a favor.

Al desarrollar el Hamiltoniano de Haldane (1.18) a orden lineal en torno a los puntos de Dirac en función del momento, de la misma forma que en (1.13), los autoestados del Hamiltoniano pueden ser descritos en sus componentes como  $|\psi\rangle = (C_A^d, C_B^d)^T$  con  $d = c, v$  correspondiente a los estados para la banda de conducción y de valencia, respectivamente. Mediante el uso de la aproximación dipolar [90], el vector dipolar [89]  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  entre los primeros vecinos<sup>2</sup>

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}) \equiv \langle \psi^c(\mathbf{k}) | \nabla | \psi^v(\mathbf{k}) \rangle, \quad (2.8)$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{a} m_{\text{opt}} \left[ (C_A^c)^* C_B^v \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j} \boldsymbol{\delta}_j - (C_B^c)^* C_A^v \sum_{j=1}^3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_j} \boldsymbol{\delta}_j \right], \quad (2.9)$$

con  $\boldsymbol{\delta}_j$  los vectores de red definidos en (1.2). El vector dipolar, cuando  $0 < \phi < \pi$  y  $M = 0$  (centro de la zona roja en la Fig. 1.7), puede ser expresado en los conos de Dirac como

$$\mathbf{D}(\mathbf{K}^\xi) = \frac{3}{2} m_{\text{opt}} \xi \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

con  $m_{\text{opt}}$  la componente  $x$  del vector dipolar atómico entre átomos vecinos [88], y  $\xi = \pm 1$  para  $\mathbf{K}$  o  $\mathbf{K}'$ , respectivamente. Así, el elemento de matriz  $\mathbf{M}_{ij}$  dado por (2.6) puede ser escrito como

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K}^\xi) = \frac{3}{2\sqrt{2}} m_{\text{opt}} (1 + \sigma) \xi. \quad (2.11)$$

Análogamente, cuando el vector dipolar cuando  $-\pi < \phi < 0$  y  $M = 0$

$$\mathbf{D}(\mathbf{K}^\xi) = \frac{3}{2} m_{\text{opt}} \xi \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

---

<sup>2</sup>Los segundos vecinos también pueden ser considerados. Se utilizan los primeros vecinos por simplicidad.

por lo que el elemento de matriz  $\mathbf{M}_{ij}$  puede ser escrito para este caso

$$\mathbf{P} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K}^\xi) = \frac{3}{2\sqrt{2}} m_{\text{opt}} (1 - \sigma) \xi. \quad (2.13)$$

Es fácil notar que en la relación (2.11), donde  $0 < \phi < \pi$ , para  $\sigma = -1$ , caso en que tenemos RCP, la tasa de transición dada por  $|\mathbf{P} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K}^\xi)|$  es nula, no así en el caso de LCP. Para RCP en el caso donde  $-\pi < \phi < 0$ , la tasa de transición no es nula, esto implica una relación de reversión temporal entre ambos casos. El valor de este elemento de matriz se muestra en la Fig. 2.3 para toda la primera zona de Brillouin. El resultado dado por (2.11) implica físicamente que el sistema responderá de manera diferente ante las dos polarizaciones circulares posibles en caso de que la simetría de reversión temporal está rota, es decir, cuando entramos a la fase de Haldane topológica en donde  $\phi \neq 0$ . Este resultado genera una conexión explícita de la existencia de dicroísmo circular con la presencia de número de Chern no nulo, por lo que podemos predecir la existencia de dicroísmo circular siempre que estemos en las regiones no triviales del diagrama 1.7.

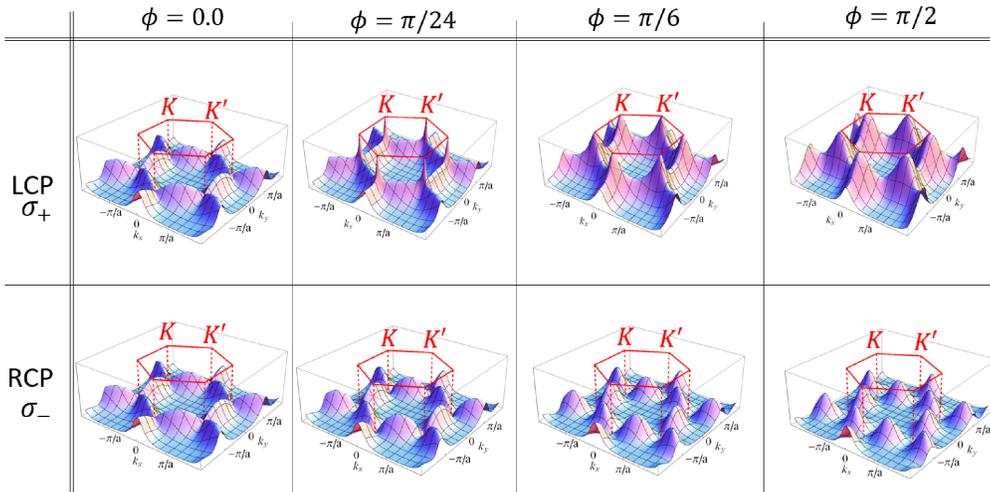


Figura 2.3: Elemento de matriz de transición al cuadrado para el modelo de Haldane en función del momento  $\mathbf{k}$  en la primera zona de Brillouin, para términos de masa de Semenoff nulo y de la fase  $\phi$  que controla la fase topológica de Haldane como descrito en la Fig. 1.7. En el eje  $z$  está graficado  $|\mathbf{P}_\sigma \cdot \mathbf{D}(\mathbf{K}^\xi)|^2$  con  $\xi$  denotando el grado de libertad de valle. En las filas están para cada una de las direcciones de polarización. Figura extraída de [89].

## 2.3. Incluyendo la luz en materiales bidimensionales

En esta sección abordaremos en un tenor técnico la inclusión de un campo electromagnético sobre materiales en dos dimensiones descrito a través de un modelo tight-binding y cómo se determinan las amplitudes de probabilidad de transmisión en el formalismo de Floquet. Centraremos específicamente el análisis para el caso del modelo de Kane-Mele bajo luz circular o linealmente polarizada. Las cantidades y derivaciones

mostradas aquí constituyen el núcleo principal de la implementación computacional que condujo a dos de los trabajos originales que son parte de esta tesis en [83] y otros resultados en preparación.

### 2.3.1. Sustitución de Peierls y Hamiltoniano de Floquet

El campo electromagnético externo puede ser descrito a través del potencial vector  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  que cumple las siguientes ecuaciones de la electrodinámica [91]

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (2.14)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla V(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.15)$$

con  $V$  en este contexto el potencial escalar. Contabilizaremos los efectos del campo electromagnético en una situación semiclásica por lo que no estará cuantizado. Para poder incorporar la física del potencial vector sobre un modelo tight-binding tenemos que recurrir a la *sustitución de Peierls* [92], herramienta que entrega la siguiente modificación a los términos de acople entre vecinos

$$J_{ij} c_i^\dagger c_j \rightarrow J_{ij} \exp \left[ i \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{\mathbf{r}_j}^{\mathbf{r}_i} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{r} \right] c_i^\dagger c_j, \quad (2.16)$$

con  $J_{ij}$  el valor del acople sin campo externo y  $\Phi_0 = hc/(2e)$  es el cuanto de flujo magnético y  $c_i^\dagger$  el operador fermiónico de creación en el sitio en  $\mathbf{r}_i$ . Para el desarrollo de este capítulo consideraremos luz circular y linealmente polarizada perpendicular al plano del material. Podemos describir este campo electromagnético través del potencial vector

$$\mathbf{A}(t) = A_0 \sin(\Omega t) \hat{x} + A_0 \sin(\Omega t + \phi) \hat{y}, \quad (2.17)$$

con  $\phi$  el parámetro que controla la polarización:  $\phi = 0$  para polarización lineal y  $\phi = \pm\pi/2$  para luz circularmente polarizada en sentido contrario/a favor de las manecillas del reloj. Se puede inferir que la integral de línea en (2.16) depende del acople considerado. En el caso del modelo de Kane-Mele hay tres acoples independientes de primeros vecinos y tres acoples independientes de segundos vecinos [11]. Recrearemos la derivación de una expresión general en función de los acoples [48] y enunciaremos los términos que componen los bloques del Hamiltoniano de Floquet (1.65). Comenzando la descomposición de las funciones periódicas vía

$$J_{ij}(t) = \sum_n J_{ij}^n e^{-in\Omega t}, \quad (2.18)$$

y ocupando las relaciones de ortogonalidad

$$\frac{1}{T} \int_0^T e^{i(m-n)t} dt = \delta_{mn}, \quad (2.19)$$

es posible recuperar una expresión integral para cada una de las componentes de Fourier en (2.16)

$$J_{ij}^m = \frac{1}{T} \int_0^T J_{ij} \exp\left(i \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{d}_{ij}\right) e^{in\Omega t} dt, \quad (2.20)$$

$$= \frac{1}{T} \int_0^T J_{ij} \exp\left(iz_x^{ij} \sin(\Omega t) + iz_y^{ij} \sin(\Omega t + \phi)\right) e^{in\Omega t} dt, \quad (2.21)$$

$$= \frac{1}{T} \int_0^T J_{ij} \exp\left(i \left[z_x^{ij} + z_y^{ij} \cos \phi\right] \sin(\Omega t) + iz_y^{ij} \sin \phi \cos(\Omega t)\right) e^{in\Omega t} dt, \quad (2.22)$$

con  $\mathbf{d}_{ij}$  el vector que conecta al sitio  $j$  con el  $i$ . También se han definido de manera conveniente las siguientes cantidades que caracterizan la intensidad de la iluminación externa

$$z_x^{ij} \equiv \frac{2\pi}{\Phi_0} A_x \hat{x} \cdot \mathbf{d}_{ij} \quad \text{y} \quad z_y^{ij} \equiv \frac{2\pi}{\Phi_0} A_y \hat{y} \cdot \mathbf{d}_{ij}. \quad (2.23)$$

Podemos resolver (2.22) utilizando las identidades de Anger-Jacobi [93]

$$e^{iz \cos \theta} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^n J_n(z) e^{in\theta}, \quad (2.24)$$

$$e^{iz \sin \theta} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(z) e^{in\theta}. \quad (2.25)$$

Expandiendo

$$J_{ij}^m = \frac{1}{T} \int_0^T J e^{im\Omega t} \sum_k J_k(z_x^{ij} + z_y^{ij} \cos \phi) e^{ik\Omega t} \sum_\ell i^\ell J_\ell(z_y^{ij} \sin \phi) e^{i\ell\Omega t} dt, \quad (2.26)$$

$$= J_{ij} \sum_{k,\ell} i^\ell J_k(z_x^{ij} + z_y^{ij} \cos \phi) J_\ell(z_y^{ij} \sin \phi) \frac{1}{T} \int_0^T e^{i(m+\ell+k)\Omega t} dt, \quad (2.27)$$

$$= J_{ij} \sum_{k,\ell} i^\ell J_k(z_x^{ij} + z_y^{ij} \cos \phi) J_\ell(z_y^{ij} \sin \phi) \delta_{-(\ell+k),m}, \quad (2.28)$$

$$= J_{ij} \sum_\ell i^\ell J_{-(m+\ell)}(z_x^{ij} + z_y^{ij} \cos \phi) J_\ell(z_y^{ij} \sin \phi). \quad (2.29)$$

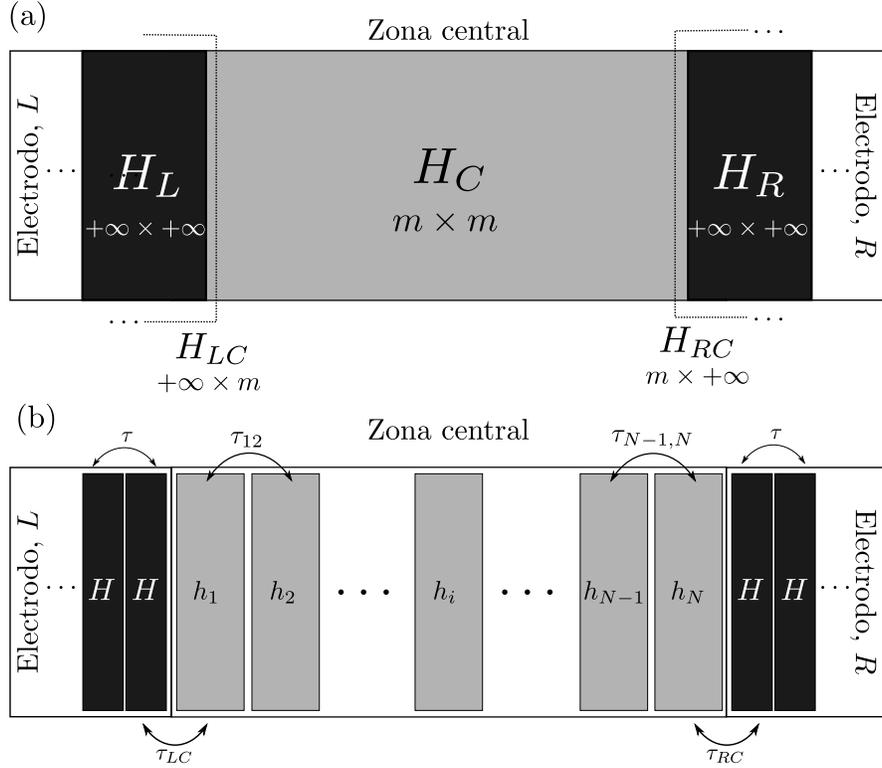


Figura 2.4: **(a)** Configuración de transporte con sus respectivos Hamiltonianos indicados. Bajo cada uno de los términos están indicadas sus dimensiones. Las líneas punteadas denotan a las matrices  $H_{LC}$  y  $H_{RC}$ . **(b)** División conveniente de los elementos que participan en el Hamiltoniano para introducir los algoritmos de decimación para sistemas infinitos y finitos .

de esa forma podemos escribir explícitamente

$$J_{ij}(t) = J_{ij} \sum_m \left( \sum_\ell i^\ell J_{-(m+\ell)}(z_x^{ij} + z_y^{ij} \cos \phi) J_\ell(z_y^{ij} \sin \phi) \right) e^{-im\Omega t}. \quad (2.30)$$

Esta ecuación es crucial para encontrar los elementos del Hamiltoniano de Floquet dado por (1.66). Al tener el Hamiltoniano estático podemos determinar toda la componente estática  $\mathcal{R}$  del espacio de Sambe y con esta descomposición en Fourier toda la estructura debido al potencial vector introducido mediante sustitución de Peierls. Los casos más importantes para la parte estática son por ejemplo: determinar la estructura de bandas descomponiendo el Hamiltoniano estático en funciones de Bloch o la descripción en base de espacio real y/o espín para construir configuraciones de transporte.

### 2.3.2. Cálculo de transmisiones usando funciones de Green-Floquet

A continuación, abordaremos la sección 1.4 desde un punto de vista técnico, describiendo un esquema computacional que permite el cálculo de probabilidades de trans-

misión. Específicamente, utilizaremos las funciones de Green: un método ampliamente usado para determinar diferentes cantidades físicas [94]. Para nuestro contexto específico, cantidades como la densidad de estados, la conductividad y la conductancia pueden ser expresadas en términos de las funciones de Green, y por ende su cómputo es de capital importancia. Enunciaremos la conexión explícita entre la matriz- $\mathcal{S}$  y las funciones de Green a través de la relación de Fisher-Lee [64, 65, 95] y su generalización para sistemas de Floquet. Nuestro objetivo principal es enunciar una fórmula cerrada para el cálculo de probabilidades de transmisión para aplicar la fórmula de Landauer [15, 65, 96].

Pese a que las funciones de Green fueron inicialmente diseñadas para tratar problemas mucho más amplios involucrando interacciones más intrincadas como electrón-electrón o electrón-fonón [15], nos limitaremos a describir como se emplean estas técnicas en sistemas no interactuantes y en el caso electrón-fotón.

Consideremos la configuración de transporte de dos terminales de la Fig. 2.4 (a). Convenientemente hemos separado el sistema en tres componentes principales: (i) un electrodo hacia la izquierda ( $L$ ), (ii) un electrodo a la derecha ( $R$ ) y (iii) la región central ( $C$ ), en donde el proceso de dispersión toma lugar. Los electrodos actúan como reservorios que proveen o absorben electrones en equilibrio y que son transmitidos y dispersados por la región central. Es importante notar que los electrodos siempre se asumen como materiales cristalinos perfectos con simetría de traslación espacial en la dirección opuesta a la muestra y por ende el sistema completo tiene un Hamiltoniano  $H_{\text{tot}}$  de dimensiones  $+\infty \times +\infty$ . Para esta configuración, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se escribe por

$$H_{\text{tot}}\Psi = ES_{\text{tot}}\Psi, \quad (2.31)$$

con

$$H_{\text{tot}} = \begin{pmatrix} H_L & H_{LC} & \\ H_{CL} & H_C & H_{CR} \\ & H_{RC} & H_R \end{pmatrix}, \quad S_{\text{tot}} = \begin{pmatrix} S_L & S_{LC} & \\ S_{CL} & S_C & S_{CR} \\ & S_{RC} & S_R \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Los bloques que componen a  $H_{\text{tot}}$  están ilustrados en la Fig. 2.4 (a). Las matrices  $H_{L/R}$  son los Hamiltonianos aislados de los electrodos,  $H_C$  es el Hamiltoniano de la región central. Los Hamiltonianos  $H_{LC/CL/RC/CR}$  son los términos que dan cuenta de los acoples entre las regiones. Las mismas nociones se siguen para las matrices de traslape en  $S_{\text{tot}}$ .

Es importante notar que los bloques  $H_{L/R}$  y  $S_{L/R}$  son de dimensiones  $[+\infty \times +\infty]$ , dado que están asociados a electrodos con invariancia traslacional. En contraste, los bloques  $H_C$ ,  $S_C$  y  $G_C$  son de dimensiones  $[m \times m]$ , donde  $m$  es el número de orbitales en la región central. Los bloques  $H_{LC}$  y  $H_{RC}$  que representan las interacciones entre los electrodos y la zona central tienen dimensiones  $[+\infty \times m]$  y  $[m \times +\infty]$ , respectivamente (análogamente para sus adjuntas). Sin embargo, estas sub-matrices son cero excepto en

los sub-bloques de ellas que representan el acople de la celda unidad del electrodo y la zona central, el cual denotaremos por  $\tau_{LC}$  y  $\tau_{RC}$  (ver Fig. 2.4 (b)). Estos sub-bloques tienen dimensiones  $[n \times m]$ , con  $n$  el número de orbitales en el electrodo.

La función de Green retardada asociada al problema (2.31) satisface

$$[(E + i\eta) S_{\text{tot}} - H_{\text{tot}}] G_{\text{tot}}^r(E) = \mathbb{I}, \quad (2.33)$$

donde  $\mathbb{I}$  es la matriz identidad de dimensión infinita,  $E + i\eta$  es la energía con una pequeña parte imaginaria positiva. La adición de  $\eta$  permite la distinción entre la función de Green retardada<sup>3</sup> y avanzada. Desde un punto de vista numérico es también conveniente agregarla: al ser suficientemente pequeña sus efectos en los resultados son despreciables y si se ajusta lo suficientemente grande ayuda a evitar matrices mal condicionadas para efectuar inversiones. Reescribiendo (2.33) en notación matricial

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_+ S_L - H_L & \varepsilon_+ S_{LC} - H_{LC} & 0 \\ \varepsilon_+ S_{CL} - H_{CL} & \varepsilon_+ S_C - H_C & \varepsilon_+ S_{CR} - H_{CR} \\ 0 & \varepsilon_+ S_{RC} - H_{RC} & \varepsilon_+ S_R - H_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_L & G_{LC} & G_{LR} \\ G_{CL} & G_C & G_{CR} \\ G_{RL} & G_{RC} & G_R \end{pmatrix} = \mathbb{I}. \quad (2.34)$$

con  $\varepsilon_+ \equiv E + i\eta$ . Seleccionando las tres ecuaciones por bloques que involucran a  $G_C$  tenemos el sistema de ecuaciones

$$[\varepsilon_+ S_{CL} - H_{CL}] G_{LC} + [\varepsilon_+ S_C - H_C] G_C + [\varepsilon_+ S_{CR} - H_{CR}] G_{RC} = \mathbb{I}, \quad (2.35)$$

$$[\varepsilon_+ S_L - H_L] G_{LC} + [\varepsilon_+ S_{LC} - H_{LC}] G_C = 0, \quad (2.36)$$

$$[\varepsilon_+ S_R - H_R] G_{RC} + [\varepsilon_+ S_{RC} - H_{RC}] G_C = 0, \quad (2.37)$$

despejando para  $G_{LC}$  y  $G_{RC}$

$$G_{LC} = -(\varepsilon_+ S_L - H_L)^{-1} (\varepsilon_+ S_{LC} - H_{LC}) G_C, \quad (2.38)$$

$$G_{RC} = -(\varepsilon_+ S_R - H_R)^{-1} (\varepsilon_+ S_{RC} - H_{RC}) G_C, \quad (2.39)$$

y reemplazando de vuelta en (2.35) obtenemos

$$G_C = \left[ (\varepsilon_+ S_C - H_C) - (\varepsilon_+ S_{CR} - H_{CR}) (\varepsilon_+ S_R - H_R)^{-1} (\varepsilon_+ S_{RC} - H_{RC}) - (\varepsilon_+ S_{CL} - H_{CL}) (\varepsilon_+ S_L - H_L)^{-1} (\varepsilon_+ S_{LC} - H_{LC}) \right]^{-1}. \quad (2.40)$$

---

<sup>3</sup>Omitiremos la notación  $G^r$  por simplemente  $G$  para denotar la función de Green retardada.

Es costumbre definir las cantidades

$$\Sigma_L(E) \equiv (\varepsilon_+ S_{CL} - H_{CL}) (\varepsilon_+ S_L - H_L)^{-1} (\varepsilon_+ S_{LC} - H_{LC}), \quad (2.41)$$

$$\Sigma_R(E) \equiv (\varepsilon_+ S_{CR} - H_{CR}) (\varepsilon_+ S_R - H_R)^{-1} (\varepsilon_+ S_{RC} - H_{RC}), \quad (2.42)$$

que son denominadas *autoenergías*, y dan cuenta de la presencia de los electrodos sobre la muestra. Así, podemos obtener una expresión explícita para el bloque  $G_C$

$$G_C(E) = [\varepsilon_+ S_C - H_C^{\text{eff}}(E)]^{-1}, \quad (2.43)$$

con  $H_C^{\text{eff}}$  el *Hamiltoniano efectivo* de la configuración de transporte

$$H_C^{\text{eff}}(E) \equiv H_C - \Sigma_L(E) - \Sigma_R(E). \quad (2.44)$$

Notemos que todas las matrices de las definiciones de 2.41 y 2.41 involucran matrices de dimensión infinita. Sin embargo, debido a la dispersión de las matrices por bloques que las componen y usando el hecho de que solo capas adyacentes tienen acople, solo necesitamos los sub-bloques  $\tau_{LC/RC}$  y sus adjuntas (ver Fig. 2.4 (b)). Para el caso de las matrices  $(\varepsilon_+ S_{L/R} - H_{L/R})^{-1}$ , podemos calcularlas recurriendo a la misma propiedad de dispersión de  $H_{L/R}$  para generar un Hamiltoniano efectivo de  $[n \times n]$  a través de técnicas recursivas que describiremos en la sección B.1. A la función de Green asociada a este Hamiltoniano efectivo le denominaremos *función de Green superficial* y la denotaremos por  $g_{L/R}$ .

En adelante, asumiremos que estamos trabajando en una base ortonormal, por lo que las matrices de traslape serán contabilizadas como la identidad.

### 2.3.2.1. Relación de Fisher-Lee y fórmula de la traza

La relevancia de las funciones de Green para el transporte está justificada por la existencia de la relación de Fisher-Lee [64, 65, 95], la cual conecta los elementos de la matriz- $\mathcal{S}$  (introducida en la sección 1.4.1) con la función de Green retardada del sistema completo. Un elemento individual de la matriz- $\mathcal{S}$ , para electrodos con muchos modos es

$$\mathcal{S}_{nm} = -\delta_{nm} + i\hbar\sqrt{v_n v_m} \iint \chi_n(y_q) G_{pq}(y_q; y_p) \chi_m(y_p) dy_q dy_p, \quad (2.45)$$

con  $\chi_n(y_p)$  denotando el  $n$ -ésimo modo transversal en la posición  $y_p$  para un electrodo. Las funciones  $\chi_n$  resuelven la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en el interior del electrodo.

Escribiendo esta relación para los elementos tales que  $n \neq m$ , es posible concluir, usando los conceptos anteriores sobre funciones de Green, que [64]

$$T_{R \leftarrow L}(E) = \text{Tr} \left( tt^\dagger \right) = \text{Tr} \left( \Gamma_R G_C \Gamma_L G_C^\dagger \right), \quad (2.46)$$

conocida como *fórmula de la traza* [65], con  $\Gamma_{L/R}$  dadas por

$$\Gamma_{L/R} \equiv i \left( \Sigma_{L/R} - \Sigma_{L/R}^\dagger \right). \quad (2.47)$$

No obstante que tenemos una fórmula concreta para la transmisión, las matrices que la componen siguen teniendo dimensiones infinitas. En las dos secciones siguientes describiremos algoritmos para ejecutar estas inversiones para sistemas infinitos y finitos de manera eficiente usando técnicas de *decimación* [97-99]. Los esquemas computacionales eficientes para tratar estos cálculos son abordados en el Apéndice B.

### 2.3.2.2. Fórmula de la traza para sistemas forzados

Las técnicas descritas anteriormente pueden ser fácilmente extendidas a sistemas forzados al compatibilizar el espacio de Sambe que desarrolla la zona central donde la dispersión ocurre y los electrodos. Para hacerlo, los electrodos, que no están forzados pueden ser escritos en términos de un Hamiltoniano de Floquet sin interacciones entre réplicas. Ilustramos esta situación en la Fig. 2.5.

Así, los coeficientes (1.82) pueden determinarse como [63, 67, 96]

$$T_{L \leftarrow R}^{(p)}(\varepsilon) = \text{Tr} \left( \Gamma_R(\varepsilon) G_C^{(p)}(\varepsilon) \Gamma_L(\varepsilon + p\hbar\Omega) G_C^{(p)}(\varepsilon) \right), \quad (2.48)$$

con  $G_C^{(p)}$  el  $p$ -ésimo armónico de la función de Green. En síntesis, la fórmula de la traza determina las transmisiones parciales mediadas por  $p$  absorciones o emisiones y la técnica de decimación aplica de manera análoga eligiendo de manera adecuada los bloques asociados a los procesos físicos de ingresar por uno de los canales de Floquet habilitados en el electrodo de incidencia y determinar su transmisión en el  $p$ -ésimo canal de salida [15].

### 2.3.3. Hibridización selectiva de estados con el continuo

Para diferentes valores de la frecuencia, el espectro desarrollado por el Hamiltoniano de Floquet en el espacio de Sambe puede adoptar diferentes tipos de formas. En el límite perfecto de desacoplamiento, el cual viene representado por una muy alta frecuencia, cada una de las réplicas no interactúan vía procesos fotónicos. Como consecuencia, el sistema se separa de manera efectiva en los bloques diagonales del Hamiltoniano de Floquet. Finalmente, la estructura del espectro no presenta física nueva, ya que en este caso una radiación de este tipo no favorece ninguna hibridización, como se aprecia en la Fig. (2.6) (a).

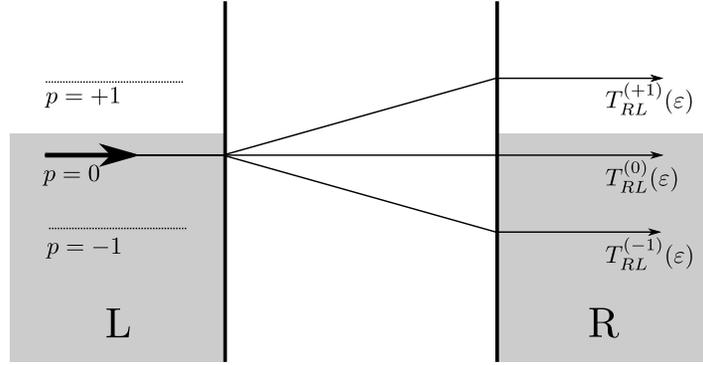


Figura 2.5: Resumen esquemático de una configuración de transporte de dos terminales en el contexto de Floquet. El índice  $p$  denota los canales de Floquet disponibles, o equivalentemente, la réplica de Floquet estática correspondiente a uno de los electrodos. La incidencia en esta figura está definida desde el canal elástico  $p = 0$ , canal de referencia que siempre usaremos a lo largo de esta tesis. La transmisión total corresponde a la suma las transmisiones parciales asociadas a diferentes procesos accesibles  $\epsilon$  en el electrodo de llegada.

La física comienza a hacerse más interesante en cuanto permitimos que la energía  $\hbar\Omega$  es comparable al ancho de banda  $W$  de cada una de las réplicas independientes. En la Fig. (2.6) (b) podemos ver cada una de las estructuras de bandas independientes. Los eventuales traslapes entre las bandas representan los procesos que en este caso, dependiendo de la intensidad de la luz, están ahora permitidos. En particular, si estudiamos la función espectral en la réplica cero para los procesos resonantes que tomarían lugar en la Fig. (2.6) (b), esperaríamos que en el interior de las bandas ocurra nueva física.

Recordando que el objetivo final de este capítulo es modificar las propiedades de conducción de los estados de borde topológicos, podemos adoptar una actitud similar, llevando la energía  $\hbar\Omega$  a un valor menor del ancho de banda  $W$ . Los procesos que ahora pueden tomar lugar están denotados por los traslapes entre la estructura de bandas que representa a la réplica cero, en azul, sobre la cual haremos los experimentos de transporte, y las bandas de color verde y naranja (ver Fig. (2.6) (c)). La manera en que los estados de borde serán modificados por los procesos ahora permitidos no puede ser predicha sin saber la intensidad y el tipo de polarización de la luz, es por ende relevante la discusión provista en la sección 2.2 para generar determinados tipos de espectros.

Suponiendo que poseemos materiales apropiadamente elegidos para la estructura de bandas estática, tenemos la posibilidad de manipular la frecuencia libremente como parámetro externo para generar diversos tipos de regímenes, que como fin último nos pueden entregar propiedades que sean sintonizables.

### 2.3.4. Regla de oro de Fermi en Floquet

Podemos dar cuenta de una expresión cuantitativa para conocer la tasa de transición entre estados a través de la regla de oro de Fermi. Puesto que el espectro de cuasienergías se desarrolla en términos de las réplicas, podemos dar cuenta de las transiciones accesibles en este espacio al generalizar la regla de oro de Fermi para el espacio de

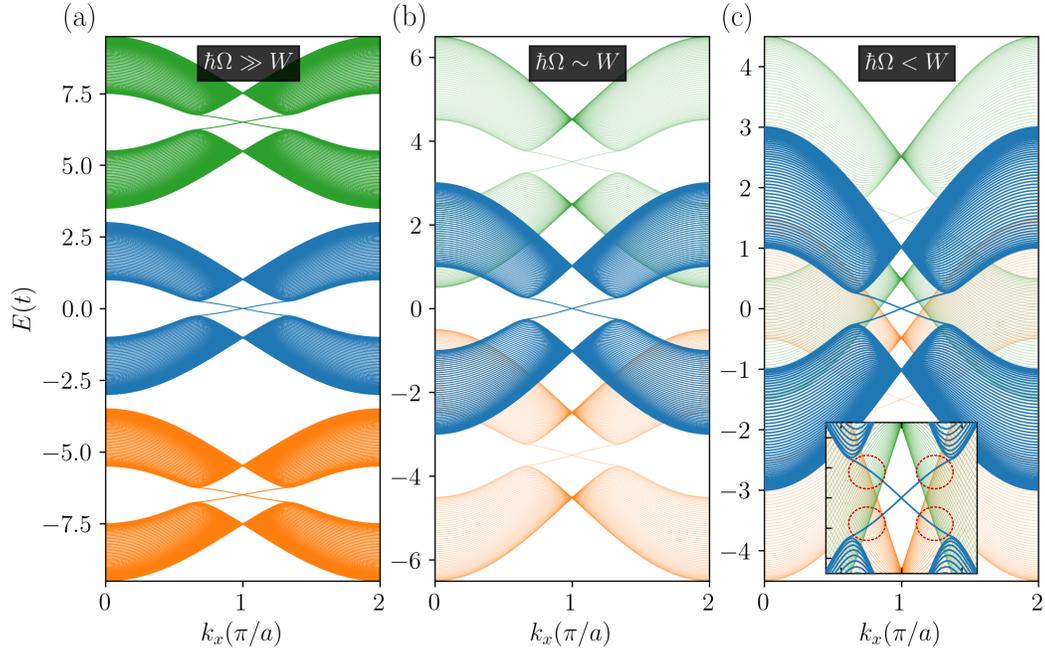


Figura 2.6: Diferentes límites determinados por la frecuencia de la radiación para un espectro del modelo de Haldane (una componente de espín de Kane y Mele). La intensidad está fija a cero, permitiendo identificar inicialmente cuáles son los procesos que se van a activar mediados por la luz. En azul la estructura de bandas que representa a la réplica cero **(a)** Límite de frecuencias muy altas, en donde el acople entre réplicas se vuelve despreciable debido a la separación en cuasienergías. El espectro se comporta de manera efectiva como un sistema estático. **(b)** Caso intermedio en que la frecuencia es comparable al ancho de banda  $W$  de la estructura de bandas estática. Procesos de acople entre la réplica de color naranja y verde ahora pueden hibridizarse con la de color azul. **(c)** Límite en que los estados de la brecha ahora pueden hibridizarse, así como procesos entre réplicas también están permitidos.

Sambe en el que trabajamos. Para una perturbación  $V$  que encendemos a tiempo  $t = 0$ , la tasa de transición entre estados viene dada por [100]

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i), \quad (2.49)$$

donde  $|\psi_f\rangle$  es el estado final y  $|\psi_i\rangle$  es el estado inicial. La función delta en este caso da cuenta de que el proceso solo es posible si hay conservación de la energía  $E_f = E_i$ . Si dejamos evolucionar el sistema por tiempo prolongado, de manera que el formalismo de Floquet sea aplicable [63] al haber perdido noción de las condiciones iniciales del sistema, podemos enunciar la regla de oro de Floquet-Fermi como [101]

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_m |\langle \psi_f^m | V | \psi_i^0 \rangle|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_f - m\hbar\Omega), \quad (2.50)$$

donde  $\varepsilon_i$  y  $\varepsilon_f$  son las cuasienergías de los estados iniciales y finales (en la primera zona de Floquet) de los estados de Floquet, respectivamente, y  $\psi_f^m$  es la componente  $m$ -ésima de Floquet de acuerdo a la descomposición dada por (1.58). Es importante notar que el estado inicial ha sido fijado desde su componente de frecuencia cero, denotando procesos de primer orden. Este resultado es similar al caso de la regla de oro de Fermi tradicional salvo el índice de Floquet  $m$ .

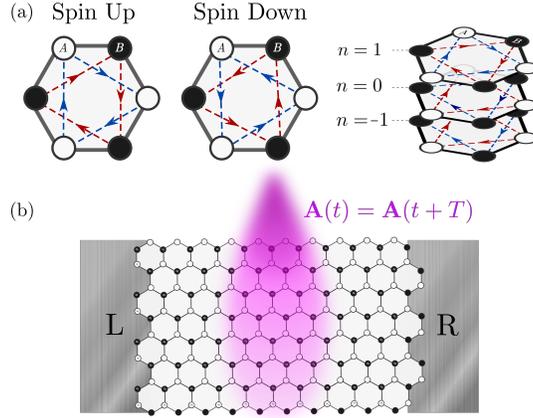


Figura 2.7: Modelo de Kane-Mele irradiado. En ausencia del acople espín-órbita, tenemos dos copias desacopladas del modelo de Haldane para espín up y espín down ((a) izquierda). Bajo iluminación láser se desarrolla el espacio de réplicas que representa los procesos mediados por fotones ((a) derecha). (b) Esquema del dispositivo considerado para el transporte.

## 2.4. Corrientes de bombeo polarizadas en espín

En esta sección abordaremos resultados originales que componen este capítulo sobre cómo controlar externamente propiedades de aislantes topológicos. A través del uso de la teoría de Floquet y su correspondiente formalismo de transporte en modelos atomísticos podemos combinar los elementos que hemos introducido en las secciones anteriores: iluminación láser, el espín y la topología en materiales bidimensionales.

Comenzando desde una fase topológica estática, veremos el efecto de la iluminación láser y cómo esta puede selectivamente modificar los estados de borde en función de su espín a través de la regla de selección óptica, introducida por el dicroísmo circular. Como consecuencia final de estas propiedades, evidenciamos la existencia de una fotocorriente de corrientes puras de espín y corrientes de carga polarizadas en espín bajo polarización lineal y circular asistidas por iluminación láser, respectivamente. Este mecanismo permite la generación y control de corrientes polarizadas en espín.

### 2.4.1. Espectro de cuasienergías

Comenzaremos la discusión analizando el espectro de cuasienergías para una cinta del tipo zig-zag del modelo de Kane-Mele con acoplamiento de espín-órbita intrínseco y

términos de masa tipo Semenoff. La relevancia del acople espín-órbita tipo Rashba para este estudio está sustentada en el análisis que desarrollamos en la sección 2.1.2, y por consiguiente, fijaremos su intensidad como  $\lambda_R = 0$ , pudiendo tratar de manera efectiva el problema como dos copias independientes del modelo de Haldane. Incorporamos la presencia de la luz externa mediante la sustitución de Peierls y podemos describir el Hamiltoniano de Floquet a través de (1.66).

Sistemas similares han sido considerados anteriormente con algunas diferencias: en [84] se estudió la influencia de un láser sobre un TDMC (metal de transición - dicalcogenuro) sin acoplamiento de espín-órbita, el cual consideramos en este estudio. Además, en [102] y en [103] se estudiaron germaneno y siliceno para polarización lineal y circular en el régimen de alta frecuencia mientras que aquí nos enfocamos en frecuencias más pequeñas que el ancho de banda. Otros estudios que usan la teoría de Floquet se enfocan en estados topológicos inducidos por la luz [104, 105] en vez de la modificación de estados nativos, lo que tratamos aquí.

Sin radiación, cuando el acople espín-órbita domina sobre el término Semenoff encontramos estados de borde topológicos que cruzan la brecha, como se ha mostrado en el caso del modelo de Kane-Mele. El término de masa Semenoff es responsable de la asimetría entre los valles, mientras que la simetría de reversión temporal fuerza la existencia de simetría de espejo entre las diferentes componentes de espín Fig. 2.7. La escala de color indica la contribución de cada estado a la función espectral promediada en el tiempo sobre la réplica cero [17] la cual es igual a la unidad en ausencia de radiación. Para polarización lineal y circular, los tonos más claros (en la figura, en escala logarítmica) muestran las regiones con estados debido a otras réplicas (cada una trasladada por  $\hbar\Omega$ ). La radiación inducirá acople entre las réplicas (o en otras palabras, un acople entre el estado con un dado momento  $k$  y energía  $\varepsilon$  y otros estados al mismo  $k$  con energía  $\varepsilon + n\hbar\Omega$ ). El efecto de tal acople es la hibridización de los estados topológicos nativos de este sistema con el continuo provisto por las réplicas. En la figura esto es evidenciado en las regiones donde las líneas que atraviesan la brecha se vuelven difusas (la escala logarítmica enfatiza estas regiones que en escala normal serían poco visibles). En la sección 2.3.3 veremos cómo el transporte se ve afectado debido a esta hibridización.

Es importante notar que la hibridización con el continuo que aparece aquí es diferente a lo estudiado en [106, 107], donde el continuo es provisto por los estados de una segunda capa en grafeno bicapa. En contraste, aquí se debe al acople con el continuo en otras réplicas a través de procesos asistidos por fotones. Adicionalmente, el espín juega un rol crucial en las reglas de selección, como destacaremos más adelante.

Cuando comparamos los resultados para polarización lineal y circular en la Fig. 2.8, encontramos una interesante asimetría: mientras que con luz linealmente polarizada la simetría de reversión temporal es preservada, la luz circularmente polarizada la rompe. Los paneles para espín up y espín down en la Fig. 2.8 (c) no son pares de reflexión especular, y la respuesta es entonces esperada como selectiva en espín. Este comportamiento está justificado debido a una regla de selección arraigada en un efecto de dicroísmo circular dependiente de espín, como indica la relación (2.11)

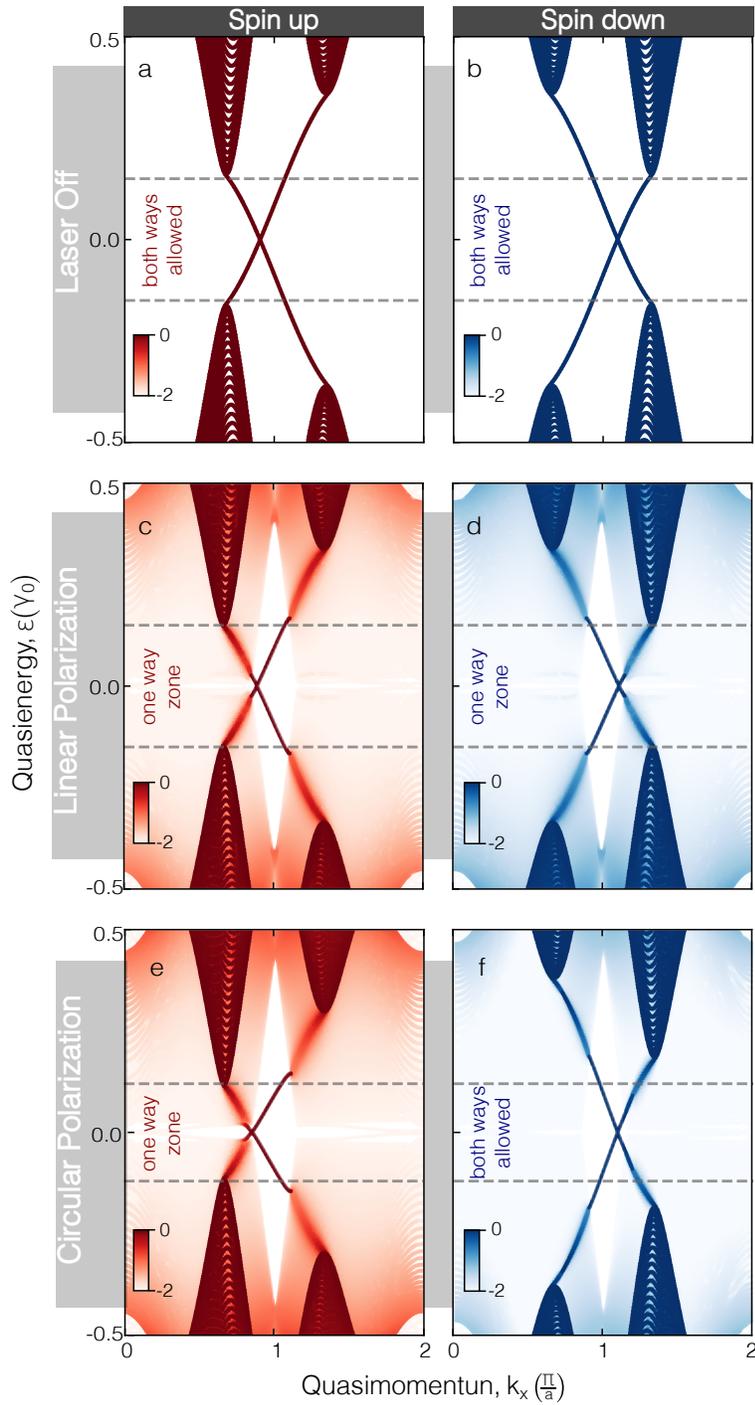


Figura 2.8: Estructura de bandas resuelta en espín para una nanocita zig-zag de grafeno con acople espín-órbita,  $W = 100a$  ( $\sim 25$  nm),  $\lambda_v = 0.1$ ,  $\lambda_{SO} = 0.05$ ,  $\hbar\Omega = 1.5$  y  $\bar{z}_x = 2\pi A_x/\Phi_0 = \bar{z}_y = 2\pi A_y/\Phi_0 = 0.15$ . Paneles (a) y (b) son sin radiación. Paneles (c), (d) y (e), (f) son para radiación con polarización lineal y circular, respectivamente. Rojo (azul) denota espín up (down). Las regiones de transporte unidireccional o bidireccional están destacadas para los estados de borde que pasan por la brecha. La escala de color muestra la función espectral en escala logarítmica.

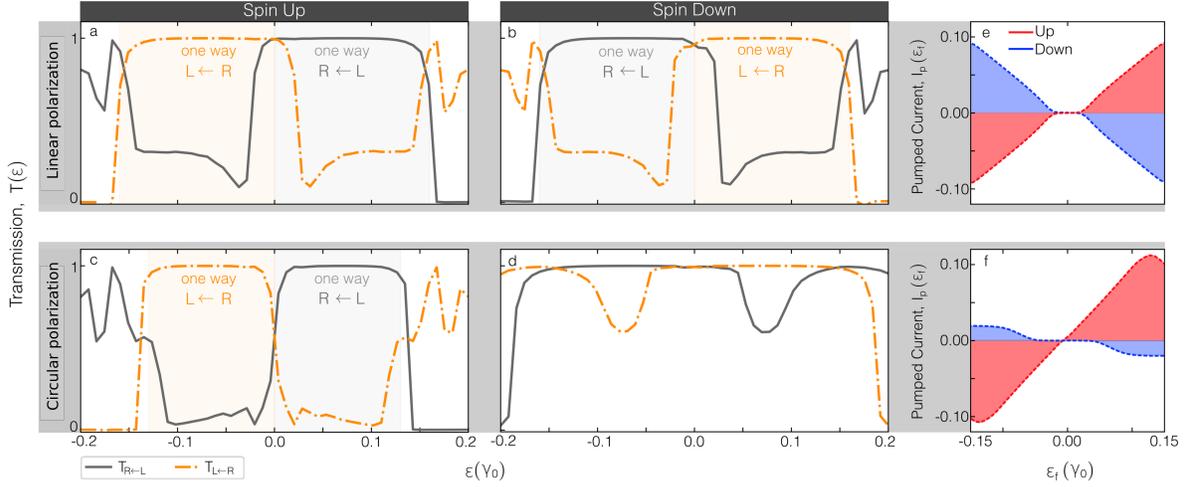


Figura 2.9: Los paneles (a)-(d) muestra las probabilidades de transmisión desde izquierda a derecha y viceversa en el rango de la brecha nativa. Transporte de carga unidireccional es logrado en (a), (b), y (c), mientras en (d) no hay efecto unidireccional. En los paneles (e) y (f) se presenta la fotocorriente resuelta en espín obtenida para polarización lineal y circular. Debido a la presencia de las corrientes de bombeo en el contexto de Floquet, este comportamiento se traduce en corrientes de carga nulas con polarización lineal, dando paso a corrientes de espín puras (e) mientras que en polarización circular (f) permite corrientes de carga polarizadas en espín. La última puede ser modificada al cambiar la dirección de la polarización circular.

## 2.4.2. Propiedades de transporte

Consideremos un sistema de dos terminales en donde la región central está iluminada mientras que los electrodos permanecen en equilibrio. Todos los parámetros del Hamiltoniano de la región de dispersión y los electrodos son iguales. Al usar la teoría de Floquet para transporte, descrita en 1.4.3, calculamos las probabilidades de transmisión totales como función de la energía de los electrones incidentes ( $\epsilon$ ). Adicionalmente, podemos resolver las contribuciones de cada una de las componentes de espín como se muestra en la Fig. 2.9. Mientras que sin la iluminación láser uno debería esperar una transmisión perfecta igual a la unidad para energías dentro de la brecha, aquí vemos un comportamiento diferente. Primero, desde la izquierda a la derecha y la derecha a izquierda las probabilidades de transmisión difieren, como es usual en sistemas forzados con simetrías quebradas. Pero de manera interesante, la respuesta es también altamente sensible a la componente de espín para luz con polarización circular: los resultados muestran que una componente de espín tiene dispersión más fuerte (desviaciones de la unidad) mientras que la otra es menos afectada.

Los resultados para las corrientes, las cuales podemos resolver en sus componentes de espín son mostradas en la Fig. 2.9 (e) (polarización lineal) y Fig. 2.9 (f) (polarización circular). Debido a la no reciprocidad, aparecen una corriente de bombeo (o también llamada fotocorriente) [61, 108] dada por (1.84) que aparece incluso en la ausencia de diferencia de potencial. Este tipo de corrientes está conectada con la ruptura de simetría inducida por los diferentes términos del Hamiltoniano. Como la ruptura de la simetría de inversión está rota en todos los casos (debido al término Semenoff), para

polarización lineal la simetría de reversión temporal está preservada y por lo tanto no hay corriente neta de carga fluyendo cuando contabilizamos ambas componentes de espín. La corriente por componente de espín no es nula como se muestra en la Fig. 2.9 (e) y ambas componentes juntas dan una corriente pura de espín.

En contraste, la polarización circular tiene una corriente de carga que no es nula y que resulta ser polarizada en espín (Fig. 2.9 (f)). La polarización depende en la energía de Fermi, siendo casi perfecta cerca del punto de neutralidad de carga y cerca de un 83% a altas/bajas energías. La no reciprocidad selectiva en espín Fig. 2.9 bajo polarización circular junto con las fotocorrientes polarizadas son los principales resultados numéricos de este trabajo. Notamos que la polarización de espín puede ser invertida al cambiar la dirección del láser a favor/en o contra de las manecillas del reloj.

### 2.4.3. Racionalizando las medidas de transporte

Para entender las señales de transporte exhibidas en la sección anterior, necesitamos discutir puntos técnicos descritos en 2.3.3 en este contexto. Para ello inicialmente estudiaremos de manera más profunda el transporte analizando diferentes contribuciones a la transmisión total, mostradas en la Fig. 2.10. Un electrón entrando a la región iluminada con energía  $\varepsilon$  puede salir elásticamente (sin emitir o absorber un número neto de fotones) o inelásticamente. Los recuadros en la Fig. 2.10 muestran los elementos de transición entre los estados iniciales y los perturbados. Estos recuadros confirman nuestras observaciones previas de que los estados propagantes con espín down que atraviesan el dispositivo son menos afectados por la luz circularmente polarizada que el otro.

Los siguientes puntos explican las observaciones numéricas

1. *Simetría generalizada en espacio de Floquet*: La siguiente relación se cumple entre las probabilidades de transición

$$T_{\beta\alpha}^{(n)}(\varepsilon) = T_{\alpha\beta}^{(-n)}(-\varepsilon), \quad (2.51)$$

la cual está restringida por el hecho de que el Hamiltoniano en el espacio de Floquet cumple

$$\Gamma H(\mathbf{k}) \Gamma^\dagger = -H^*(\mathbf{k}), \quad (2.52)$$

donde  $\Gamma = \sigma_y K$ , con  $K$  siendo el operador de conjugación compleja. Esta simetría generalizada entonces invierte el signo de la energía mientras que genera la reflexión especular del espacio y las coordenadas de las réplicas. Como esta simetría se cumple en nuestro dispositivo, entonces enlaza a las probabilidades de transmisión en los diferentes paneles de las Fig. 2.10, lo cual sirve como chequeo numérico de nuestros resultados. Notamos que similares relaciones han sido usadas en diferentes contextos en sistemas de Floquet [109].

2. *Dicroísmo selectivo en espín*: una regla de selección que enlaza al número de Chern, polarización circular y su dirección: bajo la iluminación con luz circularmente polarizada, observamos una nítida asimetría en las propiedades de transporte entre diferentes componentes de espín y también en el mismo espacio de

espín cuando la dirección de la polarización cambia. El efecto anterior se conoce comúnmente como dicroísmo circular. La existencia del dicroísmo circular en presencia de términos de segundos vecinos complejos y términos tipo Semenoff para sistemas completamente invariantes de traslación es discutida en [89]. En este trabajo, Ghalamkari y sus colaboradores demostraron que hay una regla de selección que conecta al número de Chern con las fases topológicas encontradas en el modelo de Haldane, como hemos descrito en detalle la sección 2.2.

En nuestro caso, cuando miramos cada una de las componentes de forma separada, nuestros resultados numéricos indican que la regla de selección persiste para un sistema finito cuando las transiciones incluyen un estado de borde y un estado de las bandas del espectro. Además, el hecho de que ambas componentes de espín estén relacionadas por simetría de reversión temporal en el Hamiltoniano estático produce una inversión del dicroísmo circular cuando se intercambian de rol las especies de espín. Aquí observamos que esta inversión del dicroísmo circular es también satisfecha para un sistema finito, un hecho que se puede asociar de manera intuitiva a la correspondencia de interior-frontera.

3. *Hibridización de los estados de borde con el continuo provisto por una replica de Floquet diferente:* la regla de selección descrita en el punto 2 juega un rol crucial en establecer las posibles transiciones inducidas por luz entre los estados electrónicos. Para energías de Fermi dentro del interior de la brecha de la muestra, gracias a los procesos asistidos por fotones, los estados de borde topológicos en  $\varepsilon$  tienen permitidas transiciones hacia el continuo de estados en  $\varepsilon + n\hbar\Omega$  (donde el sistema no tiene brecha). Basados en el punto 2, esta hibridización con los estados de una réplica diferente se espera que sea insensible al espín para polarización lineal, pero no para polarización circular. Esto se verificó numéricamente calculando el módulo cuadrado del elemento de matriz en la perturbación entre el estado inicial y los finales, como se muestra en los recuadros de la Fig. 2.10.

Para nuestros resultados numéricos empleamos un modelo general con términos Semenoff y acoplamiento espín-órbita compatible con el del germaneno y el estano, pero notamos que la conjunción entre la intensidad del término Semenoff, el acople de espín-órbita y la frecuencia del láser permiten un amplio rango de materiales donde las fotocorrientes predichas pueden ser observadas. De hecho, requerimos de un sistema con simetría de inversión rota que albergue estados topológicos. Dentro del modelo de Kane-Mele esto significa que  $2\Delta/\lambda_{SO} < 3/\sqrt{3}$  [5, 11]. Además, para la hibridización de los estados topológicos con el continuo de réplicas de Floquet ocurra,  $\hbar\Omega$  no debe ser menor que la brecha del sistema no irradiado y tampoco mayor de modo que los procesos de hibridización no ocurran, como descrito en la sección 2.3.3, por ende la frecuencia debe situarse en un régimen intermedio adecuadamente seleccionado. Afortunadamente estas condiciones no imponen una restricción en el régimen experimental relevante para frecuencias de láser que van desde el infrarrojo medio al rango visible. Por otro lado, la temperatura necesaria para la realización experimental y el ajuste fino de las condiciones de la radiación dependen de la brecha energética del material sin perturbar. Las intensidades de láser requeridas son menores que aquellas requeridas para ver estados de Floquet-Bloch, puesto que tenemos suficiente acople con los estados del continuo. A partir de nuestros resultados numéricos, para una longitud de onda del infrarrojo medio ( $\sim 160$  meV) estimamos que intensidades en el rango de  $1 - 1$  mW/ $\mu\text{m}^2$

es suficiente.

El acoplamiento de tipo Rashba induce procesos de espín-flip que puede tener influencia disruptiva en el efecto. Sin embargo, nuestros resultados numéricos evidencian robustez de las fotocorrientes respecto de este término. Esto, porque el mecanismo está basado en la existencia de estados topológicamente protegidos en el material estático, los cuales son originados por acoplamiento espín-órbita intrínseco y que persisten para moderados valores de acoplamiento espín-órbita tipo Rashba, tal como hemos mencionado de manera detallada en la sección 2.1.2.

La protección topológica garantiza que los elementos de matriz entre estados topológicos contrapropagantes en un borde bajo una perturbación que preserva simetría de reversión temporal es nulo. En nuestro caso la polarización circular no preserva la simetría de reversión temporal, pero en vez de introducir un elemento de matriz entre los estados contrapropagantes, esta introduce una hibridización selectiva de los estados de borde con el continuo a energías que difieren en múltiplos enteros de  $\hbar\Omega$  de ellos. Por esta razón, nuestros resultados son robustos ante términos que no conserven espín en un amplio rango de parámetros.

#### 2.4.4. Comentarios finales de la sección 2.4

Usando la teoría de Floquet para transporte, mostramos cómo la iluminación láser puede selectivamente modificar los estados de borde de un material dos dimensional que es un aislante topológico con dependencia en el espín. Esta selectividad, la cual aparece por la conjunción de una regla de selección que depende del espín junto con la hibridización de los estados de borde con el continuo de otras réplicas de Floquet, se manifiesta a través de la generación de fotocorrientes de espín puras y corrientes de carga polarizadas en espín bajo polarización lineal y circular, respectivamente. Enfatizamos que en ambos casos, las corrientes de carga y espín fluyen incluso sin diferencia de potencial. Además, la dirección y polarización del espín puede ser sintonizada al modificar la dirección de polarización, proveyendo control sobre las fotocorrientes. En este sentido, dada la generalidad de nuestro modelo, esperamos que las fotocorrientes predichas aquí sean accesibles experimentalmente en materiales de dos dimensiones usando iluminación láser en el infrarrojo medio. Estos resultados comprenden resultados originales publicados en [83].

## 2.5. Corrientes de bombeo de espín-*flip*

En el estudio mencionado en la sección anterior, prescindimos de un análisis profundo del acoplamiento de espín-órbita tipo Rashba, esto porque el mecanismo de protección topológica para los estados nativos no depende de este parámetro. Sin embargo, este coeficiente sí tiene injerencia cuando entramos en el continuo de las bandas, modificando la *polarización de espín*. Si bien en situaciones en donde los estados incidentes no están polarizados en espín la situación es la descrita en la sección 2.4, y el acople Rashba no juega un rol preponderante [83], cuando incidimos en la muestra con estados con polarización de espín fija, podemos corroborar que la hibridización con el continuo de las bandas puede aportar transmisiones vía procesos de espín-flip.

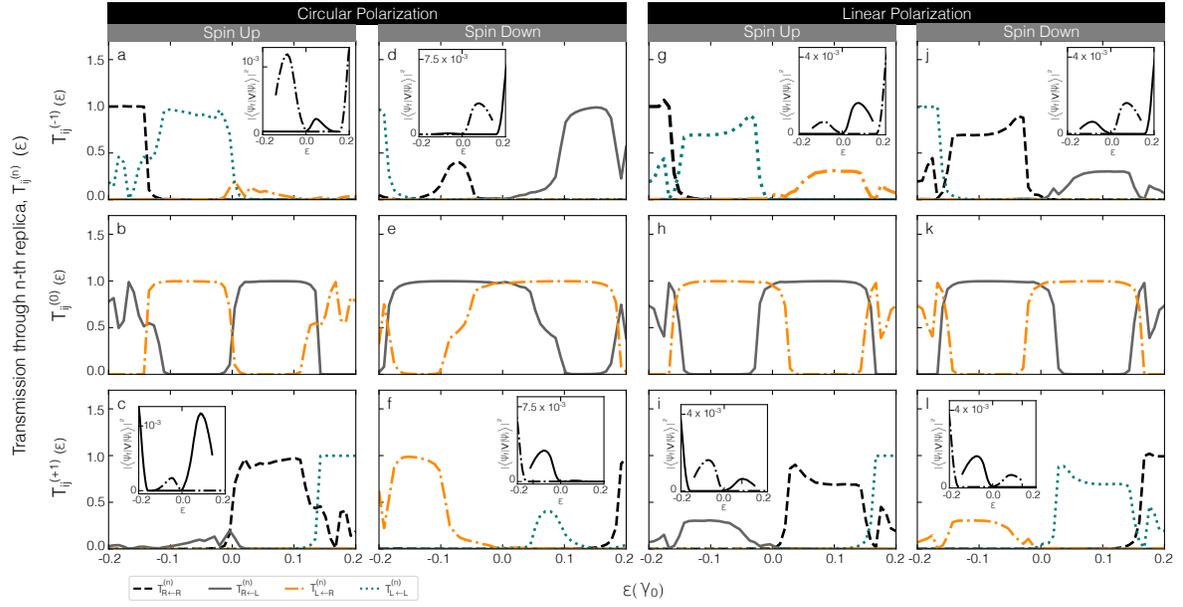


Figura 2.10:  $T_{ij}^{(n)}(\varepsilon)$  es la probabilidad de transmisión a través de un canal mediado por el intercambio de  $n$  fotones con una electrón con energía de incidencia  $\varepsilon$ . Desde los paneles (a) al (f) se muestra  $T_{ij}^{(n)}(\varepsilon)$  bajo polarización circular, describiendo el proceso completo para cada canal de espín independientemente. Desde los paneles (g) a (l), la misma información se describe para polarización lineal. Los canales elásticos prueban ser la principal fuente de transmisión, mientras que los procesos de reflexión que dan paso a transporte unidireccional en regiones dentro del interior de las bandas, están completamente mediados por procesos de intercambio de fotones, una señal distintiva de la hibridación de los estados con el continuo. Los recuadros en cada panel cuantifican el grado de acople de un estado topológico nativo y el interior de las bandas inducido por los acoplos con réplicas de orden superior, dados por (2.50). En los recuadros, las líneas continuas y discontinuas representan diferentes estados de borde quirales.

En este apartado, estudiaremos el problema de obtener de manera explícita cuál es la contribución al transporte total que es debido a procesos de espín-flip cuando el acoplamiento de espín-órbita tipo Rashba es importante, lo cual puede ser aplicable a materiales como el estaneno o siliceno [84].

Hasta ahora, problemas similares en que se considere el problema de hibridación con el continuo de réplicas superiores, contabilizando procesos de transporte de espín que sean conservativos o no, y asistidos por luz, no han sido abordados en la literatura. Mediciones experimentales han sido reportadas sobre procesos de espín-flip asistidos por luz, pero los mecanismos físicos detrás de estas observaciones no son enunciados en detalle [110], la cual es la brecha a la que buscamos aportar.

### 2.5.1. Medidas de transporte: contribuciones de flip

La despolarización de espín, que se exhibe en el interior de la estructura de bandas, como mostramos en la Fig. 2.1, permite los procesos de espín-flip. En esta oportunidad, buscamos entender cómo el acoplamiento de espín-órbita tipo Rashba, junto con

la radiación afecta las propiedades de transporte de espín. En la Fig. 2.11 (a) y (b) presentamos la transmisión total, sin analizar qué tipo de procesos conducen a este escenario. En la Fig. 2.11 (c) y (d) están detalladas las transmisiones aislando únicamente las contribuciones producto de procesos de espín-flip en trazo azul y los procesos conservativos en gris. En esta situación, para rastrear adecuadamente los procesos, los modos incidentes están completamente polarizados en espín, siendo cada espín representado por línea sólida (discontinua) para los canales down (up).

Los resultados mostrados en la Fig. 2.11 (a) y (b) están muy relacionados a los reportados en [83] en una configuración similar sin selección de espín específica para los modos incidentes. Si el forzamiento no está siendo aplicado al aislante topológico, uno debería esperar transmisión recíproca perfecta y con un valor cuantizado en el número de estados de borde siempre que la energía de Fermi esté dentro de la brecha topológica. En los paneles (a) y (b) de la Fig. 2.11 vemos cómo se modifica el transporte estático de un aislante topológico cuando el sistema es irradiado con luz circularmente polarizada. La selectividad de transporte unidireccional en espín aparece producto de la sinergia entre la ruptura de simetrías del Hamiltoniano, el acople con procesos inelásticos y la selectividad del dicroísmo circular que introdujimos en 2.2.

Ahora nos enfocamos en cómo las transmisiones totales están conformadas. El trazo gris de la Fig. 2.11 (c) y (d) muestra que la transmisión total no puede ser contabilizada solo por procesos que conserven espín (en gris). Las líneas azules muestran que el espín que no sufre supresión de transporte (espín down en este caso) invierte su orientación en el rango de energías  $\approx 0.1t$  a  $\approx 0.18t$  dentro de la brecha, en donde la eficiencia de los procesos de espín-flip son muy cercanas a la cuantización de conductancia (aproximadamente  $0.88 \frac{e^2}{h}$ ). Es importante notar que tanto la polarización de los modos suprimidos e invertidos en espín pueden ser modificados cambiando la dirección de polarización de la luz (en contra o a favor del sentido horario). Este es el resultado central de nuestro trabajo y muestra que la radiación sobre aislantes topológicos puede no solo ser una herramienta para generar fotocorrientes polarizadas en espín como descrito en la sección 2.4, sino que también puede ser una forma de desarrollar dispositivos que alteren la polarización de espín bajo demanda.

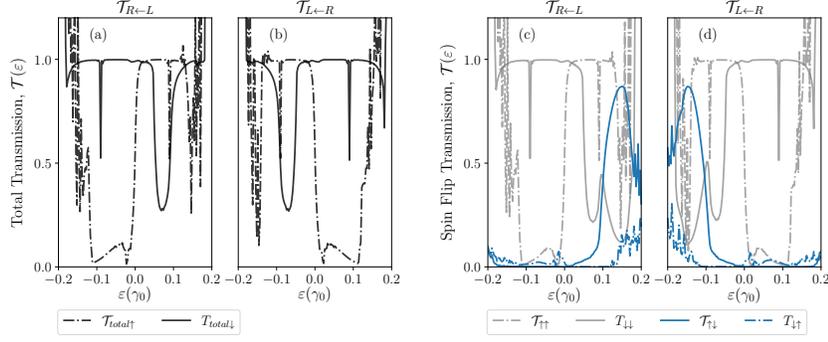


Figura 2.11: Probabilidad de transmisión total en **(a)** y **(b)**, junto con las contribuciones debida a procesos de espín-flip en **(c)** y **(d)**. El tipo de trazo destaca el canal incidente de espín, siendo el sólido (discontinuo) para down (up). En los paneles **(c)** y **(d)** el espín conservado y las de espín-flip son mostradas con trazos grises y azules, respectivamente.

## 2.5.2. Oscilaciones de Rabi: desacople espín-orbital asistido por luz

Podemos entender el mecanismo de transporte de la función de onda, en su parte orbital y de espín a través de la función de onda dispersada por la muestra. En la Fig. 2.13, tenemos la función de onda dispersada resuelta en cada una de las réplicas independientes de Floquet, como también en espín, denotada por la escala de colores detallada en cada panel. Para una energía de Fermi  $E_F \approx -0.15t$ , los procesos elásticos asociados a la incidencia desde la derecha permiten procesos de espín-flip, pero la velocidad de grupo predicha por la estructura de bandas para la vecindad de esta energías muestra ser muy baja, impidiendo la transmisión. Para la réplica  $n = -1$ , los estados de borde no logran cruzar la muestra siendo completamente reflejados. De manera notable, el transporte de carga y de espín es balístico en la réplica  $n = +1$ . Debido a que ahora los estados de borde pueden hibridizarse con el continuo de réplicas de orden superior, el estado de borde incidiendo por el canal elástico logra absorber un fotón permitiendo un transporte balístico describiendo un patrón de oscilaciones de Rabi, pudiendo ser este un transporte íntegramente de espín-flip o de espín-conservado.

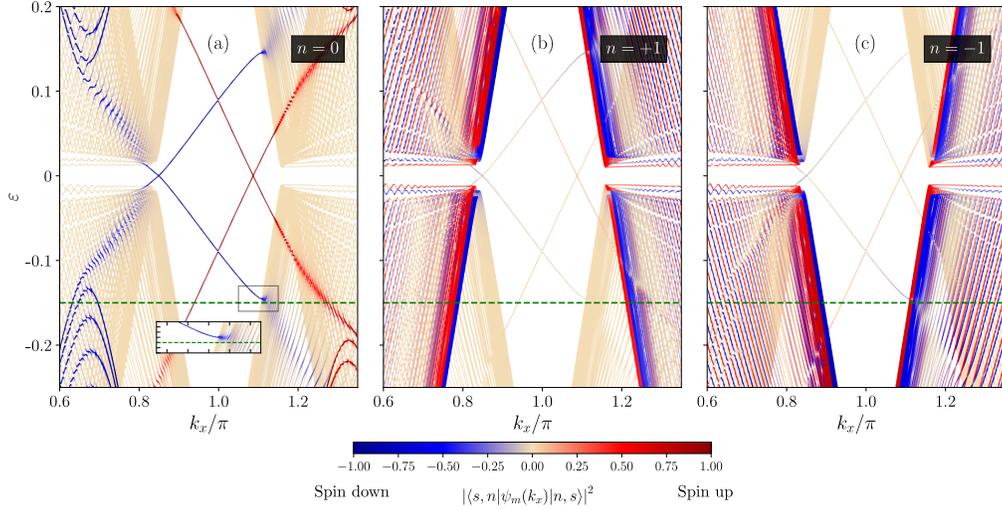


Figura 2.12: Espectro de cuasienergías para el modelo de Kane-Mele bajo luz circularmente polarizada con acoplamiento Rashba. El color codifica el peso de la función de onda por réplica y espín. La polarización de espín se pierde en el continuo de las bandas debido al acoplamiento de tipo Rashba, tal como mostramos en la Fig. 2.1. Para  $E_F \approx -0.15$ , la velocidad de propagación del estado de borde de espín down es cercana a nula mientras que el espín up se hibridiza con el continuo con velocidad no nula. Los parámetros usados son  $\lambda_R = 0.0074$ ,  $W = 100a$  ( $\sim 25$  nm),  $\lambda_v = 0.1$ ,  $\lambda_{SO} = 0.05$ ,  $\hbar\Omega = 1.5$  y  $\bar{z}_x = 2\pi A_x/\Phi_0 = \bar{z}_y = 2\pi A_y/\Phi_0 = 0.15$ .

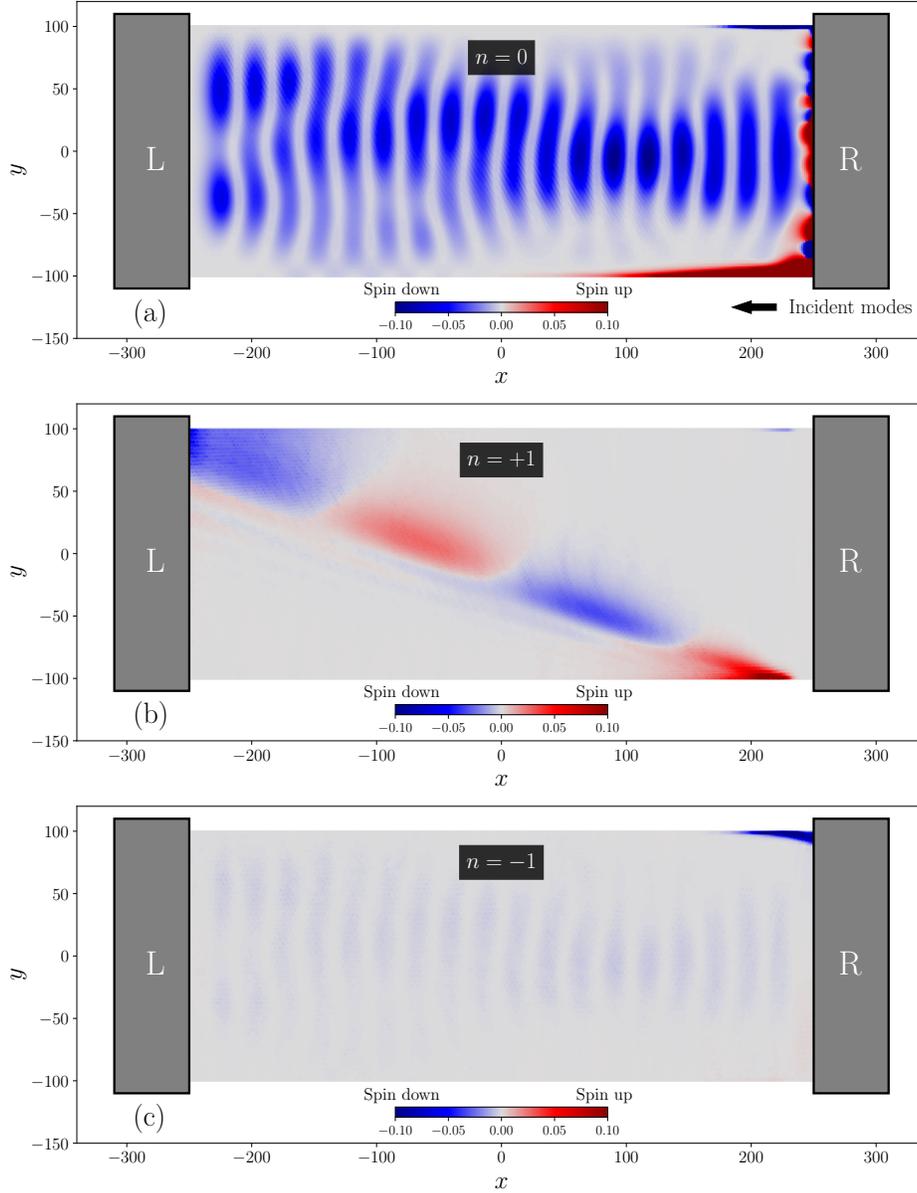


Figura 2.13: Densidad asociada a la función de onda dispersada en una configuración de dos terminales para una energía de Fermi  $E_F \approx -0.15$ . El color codifica la polarización de espín y  $n$  denota el índice de réplica. En la vecindad de esta energía, encontramos que los procesos elásticos están suprimidos, ya que los estados de borde se hibridizan de manera completa con las réplicas de orden superior. El proceso asociado a  $n = +1$  permite transmisión por todo el dispositivo cambiando el espín con una longitud de onda característica al viajar por la muestra. La velocidad de grupo del modo de espín down es nula en correspondencia a la estructura de bandas asociada en la Fig. 2.12.

Las medidas de transporte que enunciamos en la Fig. 2.11 corresponden a esta configuración de transporte, permitiendo una alta eficiencia para los procesos de espín-flip. No obstante que este fenómeno de inversión de espín sucede, la concurrencia entre la longitud de onda que exhiben las oscilaciones de Rabi con el tamaño del dispositivo sugiere que incluso ante la presencia de Rashba podemos diseñar dispositivos prepara-

dos para espín-flip o para procesos conservativos de espín. Así mismo, esto otorga una forma de control extra, siendo posible controlar la longitud de onda de las oscilaciones mediante exclusivo control del acoplamiento tipo Rashba utilizando campos externos u efectos de proximidad [84], o fijar de manera rígida si el dispositivo será eminentemente un inversor o preservador de espín usando su geometría. Esta observación está sustentada al contrastar de manera explícita dos longitudes de onda apropiadamente diseñadas para generar dos dispositivos conceptualmente diferentes, como se muestra en la Fig. 2.14. Para el caso en que el espín es efectivamente invertido, logramos la eficiencia que describimos en la sección 2.5.1, sin embargo al permitir un acople Rashba tal que la longitud de onda sea concurrente con un pico del espín incidente, la contribución al transporte de espín por procesos de inversión disminuye de manera drástica, como se ve en Fig. 2.14 (b).

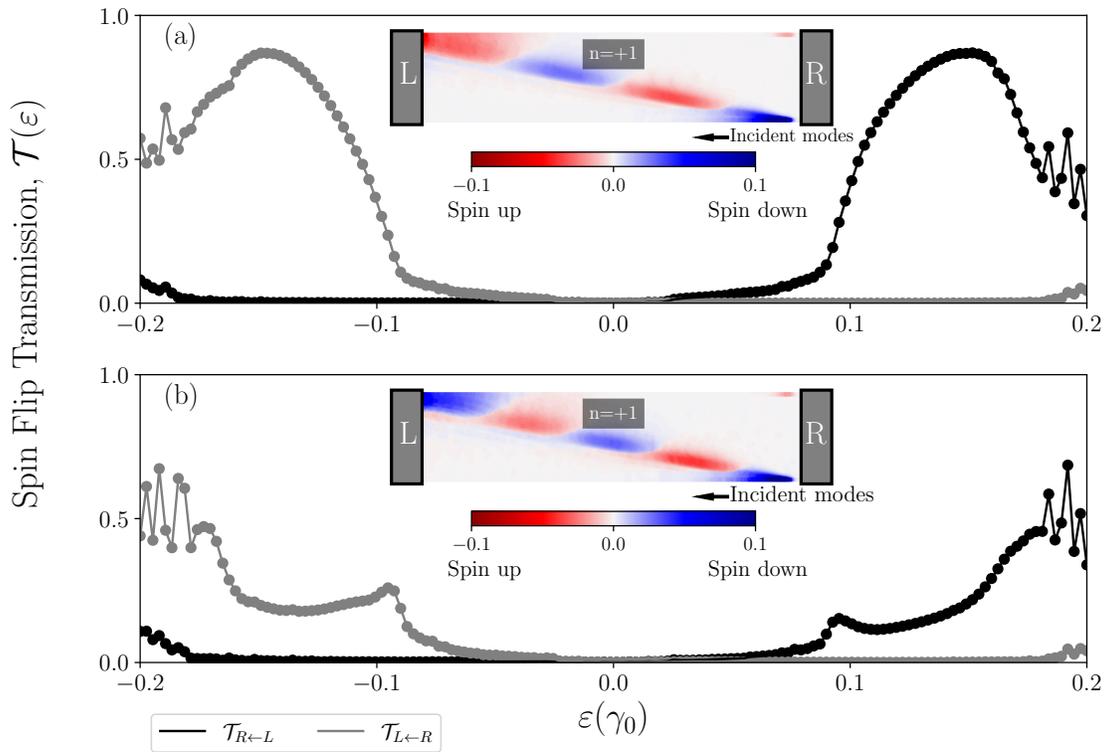


Figura 2.14: Contraste para escenarios en que la longitud de onda está ajustada para generar un dispositivo que exhiba espín-flip (a) y su contraparte (b). La influencia de la frecuencia espacial de oscilación muestra de manera elocuente que la contribución a procesos de espín-flip casi del orden el cuanto de transmisión, en cambio cuando el proceso de flip no está correctamente sintonizado, la probabilidad de transmisión disminuye a  $\approx 0.2$ .

### 2.5.3. Estimación de longitud de onda

A continuación, para poder diseñar un dispositivo bajo demanda cuya contribución a la transmisión sea de inversión de espín o no, necesitamos determinar la dependencia con la longitud de onda de las oscilaciones de Rabi en la réplica  $n = +1$ , como se

muestra en la Fig. 2.13 (b). Si consideramos que un paquete de ondas que viaja por la muestra, este desacopla de manera efectiva sus grados de libertad orbitales y de espín, como las funciones de onda dispersadas sugieren, por lo que deberíamos visualizar una dependencia lineal entre el número de onda y el acople espín-órbita tipo Rashba. Dado que  $\lambda_R$  es el único coeficiente que mezcla los dos grados de libertad de espín, el sistema se comporta de manera efectiva como uno de dos niveles.

Para validar nuestras ideas, determinamos numéricamente la longitud de onda de la función de onda dispersada en la muestra y determinamos los coeficientes que se ajusten a una dependencia lineal. En la Fig. 2.15 determinamos las funciones de onda medida desde el eje paralelo a la muestra,  $\lambda_{\parallel}$  y también desde el eje perpendicular,  $\lambda_{\perp}$ . Ambas cantidades se ajustan linealmente al variar el acople de espín-órbita tipo Rashba, proveyendo una primera comprobación de nuestra hipótesis.

Una segunda prueba que validará numéricamente nuestro ajuste, corresponde a comparar los coeficientes de ajuste lineal con las ecuaciones que describen la propagación de la onda sobre la muestra. Podemos estimar la longitud de onda utilizando que

$$\hbar \frac{2\pi}{T} \sim \lambda_R, \quad (2.53)$$

donde  $T$  el período temporal de oscilación. Estimando la rapidez de traslación  $\langle v \rangle$  como constante, la longitud de onda  $\Lambda$  se puede relacionar con el período,  $\Lambda = \langle v \rangle \pi \hbar / \lambda_R$ . Sin embargo, esta relación es válida en la dirección de propagación indicada por  $\hat{v}$ , el vector unitario caracterizando la velocidad de grupo de la onda. A partir de  $\Lambda$  podemos plantear relaciones análogas para cada una de las direcciones, perpendiculares y paralelas a la muestra

$$\frac{\langle v \rangle_{\perp} \pi \hbar}{\lambda_R} = \Lambda_{\perp} \quad \text{y} \quad \frac{\langle v \rangle_{\parallel} \pi \hbar}{\lambda_R} = \Lambda_{\parallel}. \quad (2.54)$$

Podemos expresar estas relaciones en términos del número de onda  $\kappa_{\perp/\parallel}$ , el inverso de la longitud de onda, para obtener un ajuste lineal cuya constante de ajuste sea  $C_{\perp/\parallel} = 1 / (\pi \hbar \langle v \rangle_{\perp/\parallel})$ . Este ajuste se muestra en la Fig. 2.15 para ambas componentes de la longitud de onda, entregando las rectas  $\kappa_{\parallel} \approx 1.57 \lambda_R$  y  $\kappa_{\perp} \approx 0.72 \lambda_R$  con prácticamente todos los puntos ciñéndose a la relación lineal junto a las barras de error, que en el caso perpendicular son mayores debido a que los estados de borde al intercambiar un fotón no tienen su máximo de manera exacta sobre el borde de la muestra en la réplica  $n = +1$ .

Una comprobación de la validez de este ajuste puede hacerse al comparar la velocidad obtenida por los ajustes respecto a la velocidad media de los modos propagantes de una cinta de modelo de Kane-Mele con acoplamiento tipo Rashba sobre la réplica  $n = +1$ . Así, a partir de la presunción de que la energía cinética de los modos propagantes de la cinta es comparable a la de la función de onda dispersada por la muestra, definimos

el coeficiente  $R$  que funcionará como figura de mérito de la precisión de la predicción como

$$R \equiv \sqrt{\frac{C_{\parallel}^2 + C_{\perp}^2}{\frac{\pi^2 \hbar^2}{\langle v \rangle_{\text{prop}}^2}}}, \quad (2.55)$$

con  $\langle v \rangle_{\text{prop}}$  la velocidad promedio de los modos propagantes calculada a partir de una cinta del modelo de Kane-Mele irradiada e invariante ante traslaciones sobre la réplica  $n = +1$ . En el límite que nuestra estimación es perfectamente válida, este coeficiente debe aproximarse a  $R \rightarrow 1$ . Nuestras estimaciones numéricas demuestran que  $R = 0.78 \pm 0.23$ , en donde contabilizamos el error absoluto en el cómputo de la longitud de onda debido a pequeñas desviaciones del máximo al incidir.

Dado que el valor del coeficiente  $R$  presenta un acuerdo razonable respecto a nuestras estimaciones, y por ende validando los ajustes, podemos determinar una fórmula para generar dispositivos que favorezcan procesos de espín-flip o que los conserven con acoplamiento tipo Rashba fijo. Consideraremos como aproximación que la función de onda dispersada siempre comienza en un máximo local en la componente de espín desde el electrodo de incidencia. Podemos emplear para este cálculo tanto la longitud de onda transversal o paralela al dispositivo de igual forma. Para ilustrar este concepto, utilizaremos la fórmula conocida [111] para el ancho de una cinta zig-zag  $W$  en término del número de dímeros de ancho  $N$

$$W(N) = a_{\text{CC}} \left( \frac{3N}{2} - 1 \right), \quad (2.56)$$

y definimos el coeficiente

$$\chi \equiv \frac{W(N)}{\Lambda_{\perp}}. \quad (2.57)$$

Si este  $\chi$  es aproximadamente un número entero, entonces la longitud de onda es concurrente con el ancho del sistema por lo que el sistema conserva espín. Para el caso más general, si el coeficiente  $\chi$  se expresa como un entero  $n$  más una contribución decimal, el dispositivo será un inversor de espín cuando se cumpla la condición

$$n + 0.25 < \chi < n + 0.5, \quad (2.58)$$

debido a que un cuarto del ciclo frustrado preserva la componente de espín original. Las relaciones (2.57) y (2.58) definen el ancho necesario para crear un dispositivo con  $\lambda_R$  fijo. Una relación análoga puede ser estimada para la componente paralela recurriendo a la geometría del dispositivo.

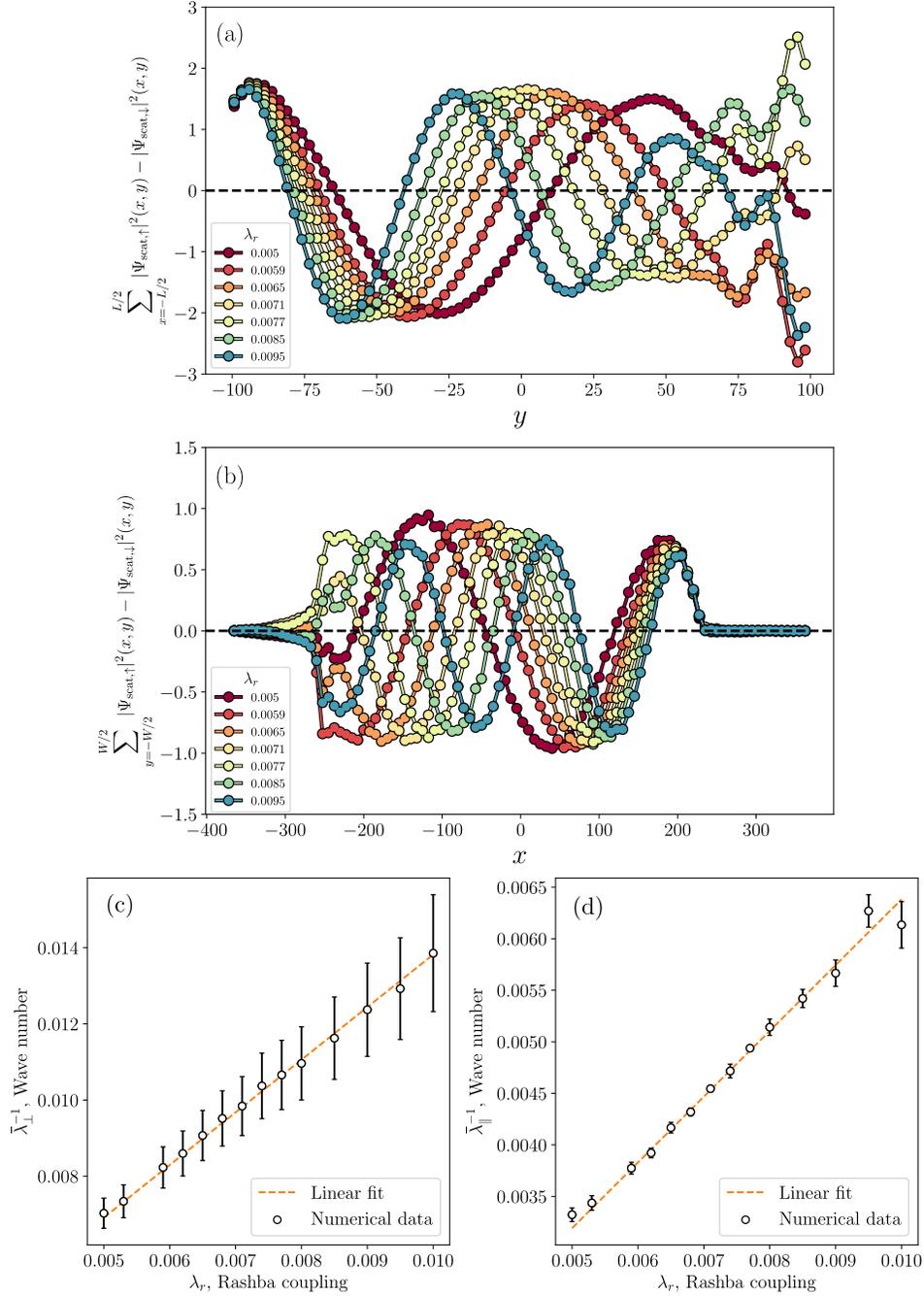


Figura 2.15: Vista lateral **(a)** y vista frontal **(b)** de la función de onda dispersada y sumada sobre un eje fijo, cantidad mostrada en los ejes como función del acople Rashba. Las oscilaciones se muestran de manera clara exhibiendo un patrón tipo oscilación de Rabi para el espín, esto sobre la réplica  $n = +1$ . Las oscilaciones se detienen una vez que el terminal opuesto es alcanzado. Las oscilaciones de alta frecuencia han sido filtradas porque están asociadas a longitudes de onda comparables al espaciamiento entre átomos, mucho más pequeñas que la escala de longitud relevante. En los paneles **(c)** y **(d)** se muestran los ajustes lineales, los cuales prueban que el sistema se comporta de manera efectiva como sistema de dos niveles. Esto nos otorgará un argumento heurístico para saber si el sistema hará flip en una configuración de transporte.

### 2.5.4. Comentarios finales de la sección 2.5

De manera similar a los resultados planteados en la sección 2.4 y publicados en [83], es posible mostrar que con los mismos ingredientes, y esta vez utilizando una ruptura de simetría adicional inducida por el acople Rashba, que podemos generar dispositivos que conserven o inviertan espín de manera controlada, teniendo la base de que el acople tipo Rashba pueda ser controlado por potenciales externos o por efectos de proximidad. Los resultados contenidos en esta sección están todavía en preparación para su publicación y constituyen una extensión natural de los resultados planteados en la sección 2.4, en donde el acople de espín-órbita tiene un rol relevante en cada una de las contribuciones al transporte.

La idea del uso de la depolarización de espín de las bandas del continuo inducidos por la radiación no es un concepto que ha sido analizado en la literatura hasta ahora, puesto que la pérdida de una dirección definida del espín en el interior de las bandas ha permanecido como una consecuencia espuria del acople Rashba, mas no un recurso utilizable para espíntrónica; noción que puede ser revaluada a la luz de nuestros resultados.

## 2.6. Conclusiones

Los estados de borde de un aislante topológico son sistemas con física extensamente estudiada en la literatura, con una de sus propiedades más destacables el hecho de que los estados metálicos que conectan las bandas de valencia y de conducción son inusualmente robustos ante una gran cantidad de perturbaciones. En las secciones anteriores, hemos planteado dos nuevas formas de manipular estos estados: cómo generar fotocorrientes polarizadas en espín ya sea de carga o de espín, y cómo determinar de manera concreta las contribuciones de procesos que conservan espín o los invierte y así mismo poder controlarlas. Los trabajos originales que emanan de este proyecto [83] se distinguen de la vertiente de generación de estados topológicos; los resultados propuestos en las secciones 2.4 y 2.5.1 buscan modificar y aprovechar la ruptura de simetrías y la disrupción de estados que son muy difíciles de manipular para generar respuestas de transporte microscópicas bajo demanda. Otro trabajo reciente en esta línea está dirigido al estudio del efecto de la iluminación intensa en grafeno en el régimen Hall cuántico para manipular la quiralidad de los estados [112]. Nuestros resultados fueron llevados a cabo con códigos computacionales originales, así como la librería de transporte cuántico Kwant y librerías estadísticas también basadas en Python.

## Capítulo 3

# Transporte en aislantes topológicos anómalos de Floquet-Anderson

La incorporación de potenciales periódicos en el tiempo en sistemas cuánticos puede controlar propiedades topológicas nativas, haciendo la física de sistemas estáticos más rica y con propiedades que se pueden aprovechar en configuraciones de transporte, como hemos discutido en el capítulo 2. Por otra parte, términos que sean periódicos en el tiempo en el Hamiltoniano también son capaces de inducir propiedades topológicas, que en algunos casos, no tienen contraparte estática [16, 21, 113].

En este capítulo introduciremos tres tipos de fenómenos relacionados con topología inducida por potenciales periódicos: un análisis superficial de cómo el grafeno puede presentar la física del modelo de Haldane, los aislantes topológicos anómalos de Floquet y el modelo de aislante anómalo de Floquet-Anderson, sistema sobre el cual se elaboraron resultados originales en esta tesis [114].

El aislante anómalo de Floquet-Anderson (en adelante AFAI) es una fase que conjuga términos periódicos en el tiempo como la localización inducida por un potencial aleatorio en la red, con la propiedad especial de que *todos* los estados en el interior de las bandas están completamente localizados, característica que no es posible lograr en sistemas estáticos [20]. Utilizando el formalismo de Landauer-Büttiker para sistemas forzados, determinaremos firmas topológicas basadas en señales de transporte en el AFAI.

La formulación original del modelo tight-binding en donde fue propuesta la fase AFAI [20], que será presentada en secciones posteriores, no parece tener una realización natural en un sistema electrónico, de manera similar al caso del modelo de Haldane. Sin embargo, existen configuraciones experimentales en redes fotónicas que parecen próximas a albergar esta física [22, 115, 116].

## 3.1. Topología y desorden en sistemas cuánticos

Para entender la peculiaridad de la fase de aislante topológico de Floquet-Anderson es necesario revisar conceptos sobre cómo el desorden localiza estados y sus consecuencias. Adicionalmente, enunciaremos porqué la existencia de estados de borde topológicos deben necesariamente estar acompañados por un estado del interior de las bandas que sea delocalizado. Esta restricción, argumentada por Halperin [39], puede ser levantada en el caso de un Hamiltoniano  $T$ -periódico, otorgando física que no tiene contraparte estática [19].

### 3.1.1. Desorden y localización

Desde la perspectiva semiclásica para el transporte, es posible demostrar que la conductividad en un material viene dada por la relación de Einstein

$$\sigma = e^2 \frac{dn}{dE} D, \quad (3.1)$$

donde  $D$  es la constante de difusión,  $dn/dE$  es la densidad de estados por unidad de volumen en el nivel de Fermi para electrones a temperatura cero [117]. Típicamente un aislante es definido como un material que tiene  $\sigma = 0$ . En este esquema, un aislante ideal solo puede ocurrir a temperatura cero, puesto que cualquier temperatura finita aportaría fluctuaciones de energía capaces de modificar la densidad de estados y/o el coeficiente de difusión [118].

Las estructuras de bandas que hemos estudiado en capítulos anteriores basan la noción de aislante de modo que la densidad de estados en la brecha es nula, y en consecuencia el coeficiente de difusión (en la perspectiva semiclásica) podría ser una cantidad no nula. Sin embargo, existe otro tipo de aislantes los cuales presentan densidad de estados en la brecha (en este contexto conocida como *brecha móvil*) tal que  $dn/dE > 0$  pero  $D = 0$ , debido al hecho que los autoestados electrónicos, en el nivel de Fermi, han sido localizados por la presencia de desorden aleatorio impidiendo que la carga pueda difundir en la muestra [117, 119], como se muestra en Fig. 3.1.

El estudio de la presencia de desorden es clave, puesto que para cualquier sistema real, las impurezas de especies externas y defectos en la formación de la red son inexorables [117]. En este sentido, la aparición de los aislantes topológicos proveen de una física con firmas muy particulares, pues sus características más evidentes son inusualmente resistentes ante determinados tipos de desorden [36, 117].

Los sistemas con desorden tienen a localizarse exponencialmente, en un fenómeno conocido como *localización de Anderson* [121], introducido por Philip W. Anderson a finales de la década del 1950. La localización de Anderson indica que en presencia de suficiente desorden, sin importar la dimensión del sistema, los autoestados del sistema se localizan exponencialmente. Es decir, en espacio real

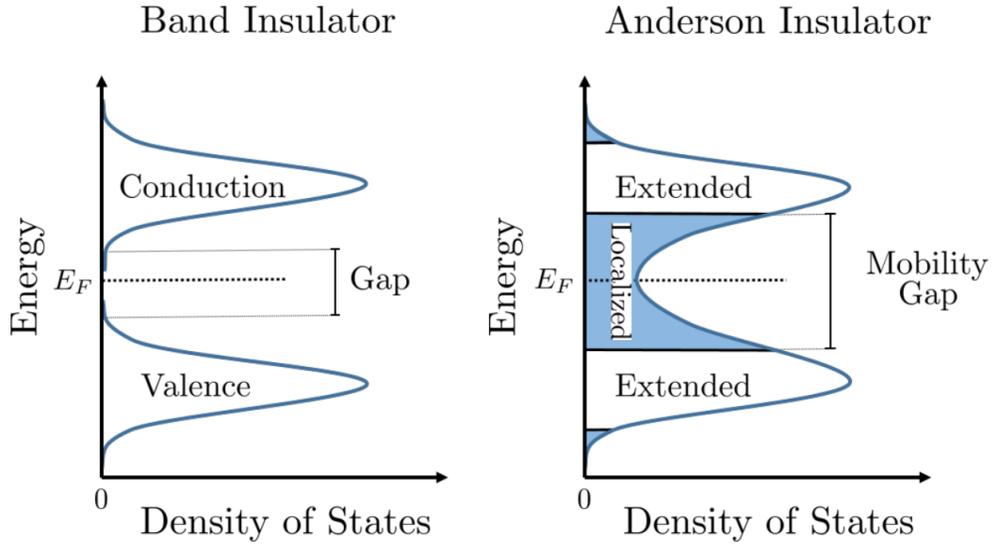


Figura 3.1: Contraste en la densidad de estados de un aislante en el que la brecha no tiene densidad de estados (aislante de bandas) y un aislante de Anderson, en los cuales existe densidad de estados finita entre dos regiones con estados extendidos, pero donde la localización exponencial no permite a la carga atravesar la región sombreada en azul. Por ende, mientras la energía de Fermi esté en la brecha móvil no existirá conducción. Imagen extraída de [120].

$$\psi(\mathbf{r}) \sim \exp(-|\mathbf{r}|/\xi), \quad (3.2)$$

siendo  $\xi$  la longitud característica de la localización. Puede ser probado que para dimensión  $d = 1$  la localización debe ocurrir sin importar cuán intenso el desorden es. Para el caso de  $d = 2$  no hay solución exacta, mientras que para  $d = 3$  la existencia de delocalización es posible y la localización completa depende la energía del autoestado [122, 123].

### 3.1.2. Rol del desorden en régimen de efecto Hall cuántico

Para poder describir los estados de borde del efecto Hall cuántico, podemos recurrir a resolver la ecuación de Schrödinger en el gauge de Landau y determinar su distribución espacial. Para una cinta finita del gas bidimensional de electrones, el campo magnético produce el espectro de los denominados *niveles de Landau*, los cuales se muestran en la Fig. (3.2) (a).

Para entender la existencia de los estados extendidos en sistemas desordenados, Halperin [39] extiende el argumento de Laughlin [3] para la cuantización de la conductancia Hall. Su trabajo provee una forma de comprender porqué cuando el desorden es incorporado en el sistema, estados extendidos deben existir incluso en el interior de las bandas. Sin embargo, recurriremos a una imagen semiclásica que permitirá extraer las mismas conclusiones físicas y utilizaremos los términos *percolación* y *argumento de Halperin* de manera intercambiable.

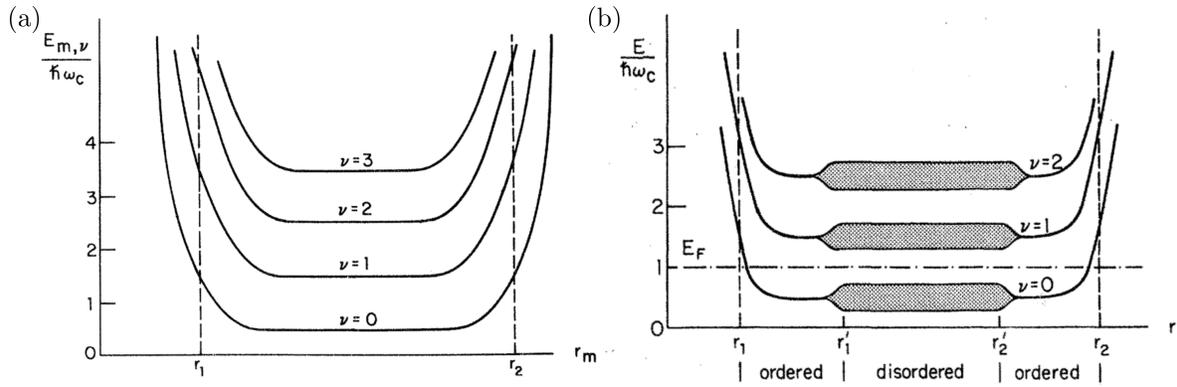


Figura 3.2: Niveles de Landau para un sistema prístino y para un sistema con desorden. Si el nivel de Fermi cae dentro del espaciamento entre los diferentes niveles, los estados de borde contrapropagantes aparecen en la frontera de la muestra **(a)**. Esta conclusión se preserva en el caso **(b)**, con la diferencia de que ahora los niveles se ensanchan producto de la presencia de desorden. Imágenes extraídas de [39].

Supondremos que el campo magnético es muy grande, de manera que la longitud magnética es pequeña en la escala donde el potencial desordenado varía,  $V \ll \hbar \omega_B$ , con  $\omega_B$  la frecuencia ciclotrónica. Debido a que el potencial desordenado rompe la simetría de traslación, es razonable pensar que en el interior de la muestra los niveles de Landau se ensanchan. En la Fig. (3.2) se muestra una comparativa en el caso en que la cinta es limpia y cuando está desordenada, respectivamente. Equivalentemente, esto significa que la densidad de estados se vuelve finita para una energía de Fermi dentro del interior de las bandas.

La naturaleza de los autoestados puede ser descrita recurriendo a la imagen semiclassical conocida como *percolación* [117, 124]. En el caso del sistema limpio, las autoestados del Hamiltoniano son ondas planas a lo largo de líneas de energía potencial constante con una longitud de localización perpendicular al borde muy pequeña del orden de la longitud magnética. Así, la órbita ciclotrónica ocurre en un lugar en donde esencialmente la energía potencial es constante. Al incorporar desorden, los autoestados deberían tener soporte cerca de las líneas de potencial constante permitiendo que algunos estados de baja energía queden localizados cerca de los mínimos locales quedando atrapados y al mismo tiempo, los estados de energías más altas permanecen rodeando los máximos locales del potencial. En ambos casos la localización se produce en puntos extremos del potencial. En la Fig. (3.3) (a) y (c) se muestran estos casos.

Para entender la naturaleza de energías intermedias, que viven dentro del interior de las bandas en la densidad de estados provista por el desorden, el esquema de percolación hace una analogía con el llenado de agua (nivel de Fermi) de un estanque que representa el potencial desordenado en la muestra. Cuando una pequeña cantidad de agua es añadida, los mínimos quedan llenos formando lagos. Al seguir incrementando el nivel del agua, se forman líneas costeras que toman formas más complejas. A cierto valor crítico del agua, una transición de fase ocurre en donde las líneas de costa *percolan* entre los bordes de la muestra (Fig. (3.3)(b)), mostrando que existe un estado extendido conectando ambos bordes de la muestra, para alguna energía de Fermi. Finalmente, al

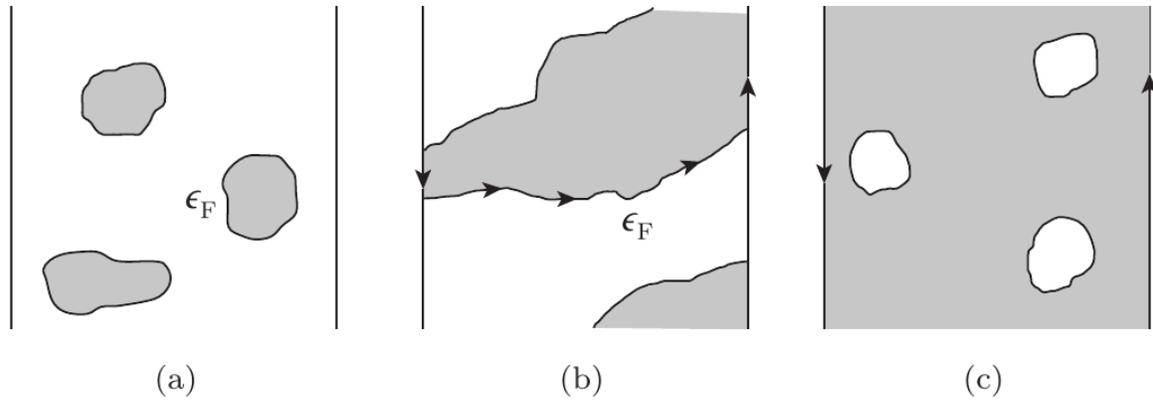


Figura 3.3: Ilustración del llenado de los niveles de Landau en la analogía del llenado con electrones. Las líneas denotan las equipotenciales llenadas al nivel de Fermi  $\epsilon_F$ . (a) Está bajo el umbral de percolación, (b) es justo cuando percolan los estados entre los bordes, mientras que (c) es sobre el umbral. Imágenes extraídas de [117].

seguir llenando el estanque con agua la percolación se detiene conectando de manera efectiva grandes porciones de la muestra con algunos estados localizados en torno a los máximos [117].

A partir de esta analogía, podemos comprender que los estados que están en los extremos de las bandas están localizados, y que necesariamente al interior de las bandas existen estados delocalizados que conectan ambos bordes de la muestra [39]. Esto se resume esquemáticamente en la densidad de estados mostrada en Fig. (3.4).

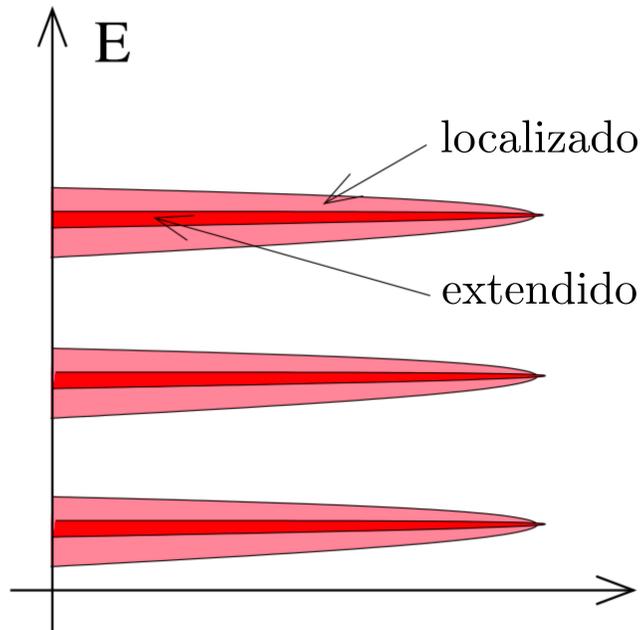


Figura 3.4: Representación esquemática de la densidad de estados para un aislante. Dado el argumento de la percolación, algunos estados extendidos existen al interior de las bandas.

## 3.2. Aislantes topológicos de Floquet

En el capítulo 1 hemos mencionado las propiedades únicas que los aislantes topológicos estáticos ofrecen para ser explotadas. En algunos casos sus propiedades pueden ser manipuladas para lograr determinados tipos de fenómenos, como transporte unidireccional de carga o espín [16, 19, 83, 106], como hemos discutido de manera extensiva en el capítulo 2. Históricamente una dificultad para llevar el campo a aplicaciones tecnológicas ha sido la carencia de materiales candidatos para albergar física topológica [19, 125]. Muy recientemente, apareció una propuesta listando una gran cantidad de materiales candidatos por Bernevig y colaboradores [126], sin embargo el análisis experimental de esta propuesta, a la fecha, no ha sido llevado a cabo.

Una forma de lograrlo es inducir la física de estados topológicos en sistemas que de manera nativa no lo son, como hemos mencionado al inicio de este capítulo. Un ejemplo que inspira gran parte del desarrollo de esta tesis es el caso del grafeno irradiado [46, 48].

A continuación, visitaremos tres conceptos relacionados a la física topológica inducida por potenciales periódicos: el grafeno irradiado con luz circularmente polarizada, que se comporta de manera efectiva como el modelo de Haldane [101], la fase de aislante anómalo de Floquet y de Floquet-Anderson, fases que son únicamente accesibles en sistemas forzados que se basan en la periodicidad del espectro de cuasienergías [20].

### 3.2.1. Grafeno irradiado con luz circularmente polarizada

En esta sección recrearemos un resultado conocido en la literatura [17, 19, 40, 46-48, 101] y que servirá de soporte conceptual para justificar la introducción de potenciales periódicos en el tiempo: la inducción del efecto Hall cuántico en el grafeno bajo iluminación láser.

La incorporación de luz circularmente polarizada induce un término de masa tipo Haldane en el grafeno irradiado [17, 40, 101]. Para demostrarlo, comenzamos recordando el Hamiltoniano a orden lineal del momento del grafeno en torno a los conos de Dirac como introdujimos en la sección 1.2.2. Podemos expresar el grado de libertad de valle mediante las matrices de Pauli  $\tau_i$  para indicar si estamos en torno  $\mathbf{K}$  o  $\mathbf{K}'$ , de manera que el espacio vectorial completo es el espacio producto del índice de subred, denotado por las matrices de Pauli  $\sigma_i$  y de valle  $\tau_i$ , así (1.12) se escribe por

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}) = v(\tau_x \otimes \sigma_x p_x + \tau_y \otimes \sigma_y p_y) + M\tau_z \otimes \sigma_z, \quad (3.3)$$

$$= \begin{bmatrix} M & v(p_x - ip_y) & 0 & 0 \\ v(p_x + ip_y) & -M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M & v(-p_x - ip_y) \\ 0 & 0 & v(-p_x + ip_y) & -M \end{bmatrix}, \quad (3.4)$$

con  $v \equiv -\frac{\sqrt{3}}{2}ta$  y en donde hemos agregado un término de masa trivial tipo Semenoff que ayudará a ensanchar la brecha. En adelante omitiremos la notación de producto

externo por simplicidad. Introducimos explícitamente la luz circularmente polarizada utilizando el potencial vector

$$\mathbf{A}(t) = A_0 (\sin \Omega t \hat{x} + \cos \Omega t \hat{y}), \quad (3.5)$$

del cual podemos dar cuenta de sus efectos a través de la sustitución canónica en (3.3)

$$\mathcal{H}' = v (\tau_z \sigma_x (p_x - A_x) + \tau_0 \sigma_y (p_y - A_y)) + M \tau_0 \sigma_z, \quad (3.6)$$

$$= v (\tau_z \sigma_x p_x - \tau_z \sigma_x A_x + \tau_0 \sigma_y p_y - \tau_0 \sigma_y A_y) + M \tau_0 \sigma_z, \quad (3.7)$$

$$= \mathcal{H} - (\tau_z \sigma_x v A_x + \tau_0 \sigma_y v A_y) + M \tau_0 \sigma_z. \quad (3.8)$$

Esta última expresión puede ser escrita en términos de exponenciales complejas, las cuales nos ayudarán a enlazar con el formalismo de Floquet, y poder determinar los bloques de acoples entre réplicas

$$\tau_z \sigma_x v A_x + \tau_0 \sigma_y v A_y = \tau_z \sigma_x v A_0 \sin \Omega t + \tau_0 \sigma_y v A_0 \cos \Omega t, \quad (3.9)$$

$$= v A_0 \tau_z \sigma_x \left( \frac{e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}}{2i} \right) + v A_0 \tau_0 \sigma_y \left( \frac{e^{i\Omega t} + e^{-i\Omega t}}{2} \right), \quad (3.10)$$

$$= v A_0 \frac{e^{i\Omega t}}{2} \left( \frac{1}{i} \tau_z \sigma_x + \tau_0 \sigma_y \right) + v A_0 \frac{e^{-i\Omega t}}{2} \left( \frac{-1}{i} \tau_z \sigma_x + \tau_0 \sigma_y \right), \quad (3.11)$$

por lo tanto tenemos

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + v A_0 \frac{e^{i\Omega t}}{2} \left( -\frac{1}{i} \tau_z \sigma_x - \tau_0 \sigma_y \right) + v A_0 \frac{e^{-i\Omega t}}{2} \left( \frac{1}{i} \tau_z \sigma_x - \tau_0 \sigma_y \right), \quad (3.12)$$

$$= \mathcal{H} + v A_0 e^{i\Omega t} \left( \frac{i \tau_z \sigma_x}{2} - \frac{\tau_0 \sigma_y}{2} \right) + v A_0 \frac{e^{-i\Omega t}}{2} \left( \frac{-i \tau_z \sigma_x}{2} - \frac{\tau_0 \sigma_y}{2} \right), \quad (3.13)$$

obteniéndose

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + V e^{i\Omega t} + V^\dagger e^{-i\Omega t}, \quad (3.14)$$

donde

$$V \equiv v A_0 \left( \frac{i \tau_z \sigma_x}{2} - \frac{\tau_0 \sigma_y}{2} \right). \quad (3.15)$$

El Hamiltoniano  $\mathcal{H}'$  dado por (3.14) constituye la expresión explícitamente dependiente del tiempo para el grafeno irradiado a orden lineal en momento en torno a los

conos de Dirac y por lo tanto al ser una aproximación perturbativa de baja energía, este resultado es válido solo cuando  $A_0 \ll 1$ .

Para determinar las correcciones en el espectro debido a la presencia al campo eléctrico  $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$  debido a la luz circularmente polarizada, podemos describir la física de tiempos largos en términos del operador de evolución temporal estroboscópico [19] (con  $\hbar = 1$ )

$$U(T) = \mathcal{T} \exp \left( -i \int_0^T H(t) dt \right), \quad (3.16)$$

con  $\mathcal{T}$  el operador de ordenamiento temporal. Este operador describe toda la evolución temporal en un ciclo. Esta relación puede también ser entendida como [20]

$$H_{\text{eff}} = \frac{i}{T} \ln U, \quad (3.17)$$

$$U(T) = \mathcal{T} \exp (-iT H_{\text{eff}}). \quad (3.18)$$

El operador  $H_{\text{eff}}$  puede ser expandido como una serie de Magnus involucrando diferentes integrales temporales del Hamiltoniano que depende explícitamente del tiempo [40]. A primer orden en  $1/\Omega$  se puede demostrar que

$$H_{\text{eff}} = H_{0\Omega} + H_{1\Omega} + \mathcal{O} \left( \frac{1}{\Omega^2} \right), \quad (3.19)$$

con

$$H_{0\Omega} = H_0, \quad (3.20)$$

$$H_{1\Omega} = \frac{1}{\Omega} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n} [H_n, H_{-n}], \quad (3.21)$$

con las matrices  $H_0$  el Hamiltoniano estático y  $H_n$  dadas por la descomposición

$$H(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} H_n e^{in\Omega t}. \quad (3.22)$$

A partir de la expresión (3.14), es posible reconocer  $H_1 = V$  y  $H_{-1} = V^\dagger$ , por lo que el Hamiltoniano efectivo descrito por (3.19) para  $\mathcal{H}'$  viene dado por

$$\mathcal{H}'_{\text{eff}} = \mathcal{H} + \frac{1}{\Omega} [V, V^\dagger] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Omega^2}\right), \quad (3.23)$$

$$\approx v(\tau_z \sigma_x p_x + \tau_0 \sigma_y p_y) + M \tau_0 \sigma_z + \frac{A_0^2 v^2}{\Omega} \tau_z \sigma_z, \quad (3.24)$$

siendo esta la expresión a orden lineal en momento en torno a los conos de Dirac para el modelo de Haldane [101]. Por lo tanto concluimos que la presencia de la luz circularmente polarizada sobre el grafeno induce un término de masa de tipo Haldane proporcional a  $A_0^2 v^2 / \Omega$ , y que por lo tanto, para cierto rango de parámetros permite la existencia de estados de borde quirales que conectan la banda de conducción y de valencia. Las conclusiones asociadas a este enfoque perturbativo son también válidas fuera de las zonas tipo Dirac [14, 46-48], como se muestra en la Fig. 3.5 para el caso de grafeno sin irradiar y bajo radiación intensa.

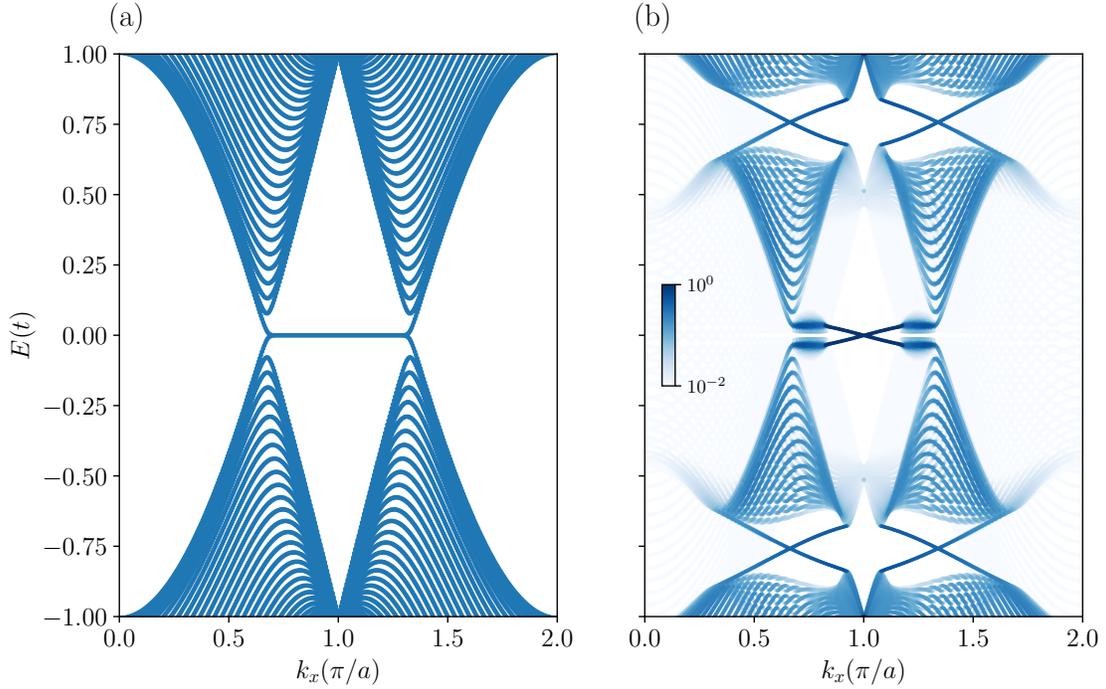


Figura 3.5: Comparativa del espectro de una cinta de grafeno zig-zag **(a)** y su versión bajo la acción de luz circularmente polarizada **(b)**, mostrando estados de borde quirales en la brecha entorno al punto de neutralidad de carga. La escala de color indica el valor de la función espectral (1.69) en la réplica  $m = 0$ , relevante para estudiar el transporte al acoplarse a electrodos no forzados. El espectro para el caso forzado es fuera de la aproximación a orden lineal en momento y con amplitud de láser intensa. La frecuencia en este caso es comparable al ancho de banda permitiendo procesos de absorción-emisión entre réplicas de orden superior. El acople a primeros vecinos está fijo a la unidad, y en el caso irradiado  $z_x = z_y = 0.15$ ,  $\hbar\Omega = 1.5$  con tres réplicas en total.

### 3.2.2. Aislantes topológicos de Floquet anómalos (AFTI)

Luego del advenimiento de las fases topológicas inducidas por un Hamiltoniano  $T$ -periódico, comenzaron a identificarse fases que eran exclusivas de estos sistemas que no tenían análogos estáticos; una diferencia clave que el espectro de sistemas de Floquet es periódico en las cuasienergías, lo cual tiene consecuencias críticas [19], como enunciamos en la sección 1.3.

Debido a la periodicidad del espectro de cuasienergías, los aislantes topológicos de Floquet pueden exhibir estados no triviales con bandas cuyos números de Chern son nulos [125]. Para sistemas estáticos esta situación no es posible puesto que la existencia de estados de borde en una brecha depende de los números de Chern de las bandas vecinas, mediante la correspondencia de interior y frontera. En la Fig. (3.6) se ilustra cómo la periodicidad del espectro en el eje de cuasienergías permite la existencia de estados de borde no triviales.

En consecuencia, para construir una correspondencia de interior y frontera capaz de predecir física topológica nueva, nuevos invariantes topológicos deben ser introducidos [19, 21, 49, 125]. Diversas formulaciones para estos números existen en el contexto de modelos tight-binding, caminatas cuánticas y los modelos de redes de dispersores [53, 54, 125].

El trabajo precursor que inspira la descripción en términos de índices topológicos es el de Rudner y colaboradores [125], que presenta un modelo de tight-binding con un particular protocolo de forzamiento el cual servirá de inspiración a lo largo de todo este capítulo. Este modelo se presenta en la Fig. (3.8) y viene explícitamente dado por

$$H(t) = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A}^\dagger & c_{\mathbf{k}B}^\dagger \end{pmatrix} H(\mathbf{k}, t) \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}A} \\ c_{\mathbf{k}B} \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

$$H(\mathbf{k}, t) = - \sum_{n=1}^4 J_n(t) \left( e^{i\mathbf{b}_n \cdot \mathbf{k}} \sigma^+ + e^{-i\mathbf{b}_n \cdot \mathbf{k}} \sigma^- \right) + \delta_{AB} \sigma_z, \quad (3.26)$$

donde  $c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger$  crea una partícula con cuasimomento  $\mathbf{k}$  en la subred  $\alpha \in \{A, B\}$ ,  $J_n$  controla el acople de primeros vecinos entre los sitios  $A$  y  $B$  mediante las líneas destacadas en color. Se ha definido  $\sigma^\pm \equiv (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ . Los vectores de red  $\{\mathbf{b}_i\}$  están dados por  $\mathbf{b}_1 = -\mathbf{b}_3 = (a, 0)$  y  $\mathbf{b}_2 = -\mathbf{b}_4 = (0, 4)$ . El último término corresponde a un término de masa Semenoff con amplitud  $\delta_{AB}$ .

Cada periodo del ciclo consta de cinco segmentos de duración  $T/5$ , donde  $T$  es el período. Durante cada una de estas cinco etapas, la amplitud  $J_n = J$  con  $JT = \pi/2$ , mientras que los otros acoples que no están encendidos se mantienen con amplitud nula, generando estados de borde quirales y un interior completamente aislante. La elección particular de esta amplitud de acoples de primeros vecinos garantiza que la partícula se mueve con probabilidad 1 entre sitios vecinos. Durante la etapa 5, todos los acoples son apagados como artefacto de conveniencia que ayudará a definir su invariante topológico. Los detalles de la construcción del invariante topológico escapan de los alcances

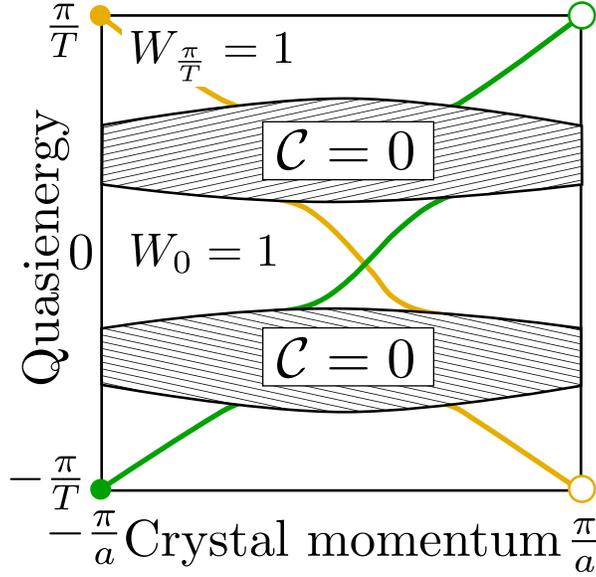


Figura 3.6: Estados de borde no triviales pueden ser exhibidos en sistemas de Floquet incluso en el caso en que los números de Chern de las bandas son nulos. Debido a la periodicidad del espectro de cuasienergías y de cuasimomento, los estados de borde pueden conectar extremos del espectro de Floquet-Bloch de manera continua (entre los puntos vacíos y llenos). De manera efectiva, el espectro vive entonces en un toro . Imagen extraída de [20].

de nuestros estudios por lo que enunciaremos únicamente la fórmula de calcularlo en términos del operador de evolución temporal en un ciclo

$$W[U_\epsilon] = \frac{1}{8\pi^2} \int dt dk_x dk_y \text{Tr} \left( U^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U \left[ U^{-1} \frac{\partial U}{\partial k_x}, U^{-1} \frac{\partial U}{\partial k_y} \right] \right), \quad (3.27)$$

$$U_\epsilon(\mathbf{k}, t) = \begin{cases} U(\mathbf{k}, t) & 0 \leq t \leq T/2 \\ V_\epsilon(\mathbf{k}, 2T - 2t) & T/2 \leq t \leq T \end{cases} \quad (3.28)$$

$$V_\epsilon(\mathbf{k}, t) \equiv e^{-iH_{\text{eff}}(\mathbf{k})t}, \quad (3.29)$$

con  $H_{\text{eff}}$  dado por (3.17). Este índice es capaz de predecir el número de estados de borde no triviales en cada brecha, a determinada cuasienergía  $\epsilon$ , incluso en el caso en que todos los números de Chern de las bandas sean nulos, situación que no es posible en sistemas estáticos.

### 3.2.3. Aislantes topológicos de Floquet-Anderson (AFAI)

Utilizando el modelo de aislante topológico de Floquet anómalo de la sección anterior, Titum y colaboradores [20] introducen desorden de tipo Anderson en todos los sitios del sistema dado por (3.26) aplicando un potencial de sitio del tipo

$$V = \sum_{\mathbf{r}} V_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}}^{\dagger} c_{\mathbf{r}}, \quad (3.30)$$

donde  $V_{\mathbf{r}}$  es una variable aleatoria uniformemente distribuida en el rango  $[-\delta V, \delta V]$ . En adelante, llamaremos  $dS \equiv \delta VT$  la *intensidad de desorden*. La fase de aislante de Floquet-Anderson anómalo se define a través de la siguiente propiedad: en dos dimensiones estados de borde quirales pueden coexistir con el interior de las bandas totalmente localizado.

De acuerdo al argumento que detallamos en la sección 3.1.2, esto no es posible en sistemas estáticos: cuando existen estados de borde topológicos en sistemas estáticos estos deben estar acompañados por estados delocalizados en el interior de las bandas. En contraste, en el caso de sistemas forzados, el espectro de cuasienergías es periódico, por ende, la energía del sistema no posee puntos extremos, haciendo que la imagen de percolación no imponga una restricción sobre el espectro, permitiendo como posibilidad que todos los estados en el interior puedan localizarse. En el trabajo de Titum, diferentes consecuencias son destacadas, como la definición del invariante topológico asociado a la fase con desorden, consecuencias sobre el transporte y dinámica de un paquete de ondas localizados en el borde, mostrando física no trivial.

Una propiedad de transporte predicha es el bombeo de carga cuantizado para un régimen no adiabático [20], lo cual se demostró inicialmente en una configuración de transporte en el caso de diferencia de potencial alta entre contactos [127].

La fase AFAI también ha sido estudiada en el contexto de sistemas que tienen *onsite kicks* periódicos, en donde existen argumentos para predecirla recurriendo al concepto de levitación-anihilación entre bandas con número de Chern no trivial, mostrando si la brecha móvil permite la aparición de AFAI o de aislante de Anderson trivial [128], como se muestra en la Fig. (3.7). Otras propuestas teóricas relacionadas con caminatas cuánticas también han mostrado la física del AFAI [129].

### 3.3. Transporte cuántico en AFAI

El modelo de AFAI descrito por Titum y colaboradores [20] muestran el estudio de la fase determinando un invariante topológico, asociando el número de estados de pares de estados de borde en la brecha con la cuantización de la conductividad.

Una de las interrogantes posibles para este sistema, cuya realización parece más natural en sistemas fotónicos o redes ópticas, es qué señales pueden medirse para evidenciar esta fase que combina desorden y forzamiento. Uno de los trabajos publicados que conforma esta tesis busca aportar en esta dirección: buscar firmas topológicas en configuraciones de transporte [114]. Analizamos la respuesta de transporte del AFAI en un sistema de dos terminales y multiterminal y visualizamos, usando el formalismo de Landauer-Büttiker modificado para sistemas forzados, la robustez de la cuantización del transporte tanto en la brecha energética del sistema prístino como al interior de las bandas, además de exhibir las transiciones de fase entre la fase de AFAI a la de

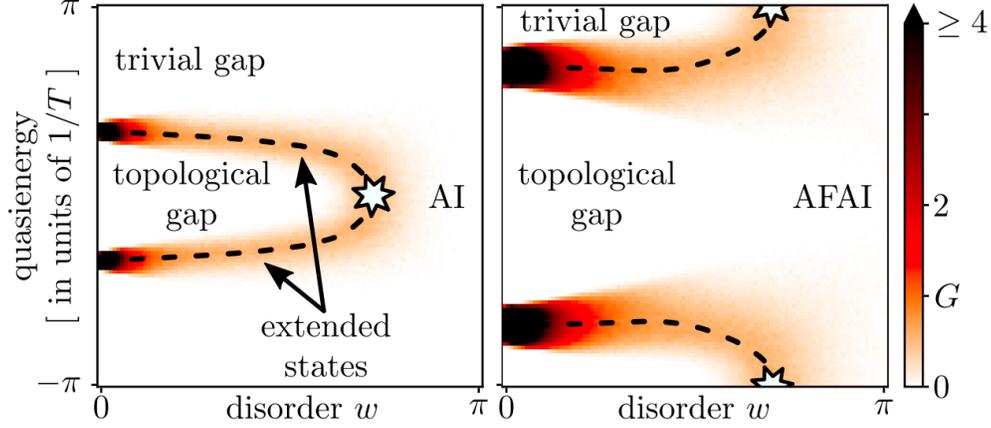


Figura 3.7: Al incrementar el desorden, los estados extendidos que separan las brechas en cuasienergías pueden separarse en dos casos: la aniquilación o levitación. El segundo escenario es únicamente posible en el caso de los sistemas forzados debido a la periodicidad del espectro de cuasienergías. Como resultado del proceso, el sistema se comporta como un aislante de Anderson trivial o como un AFAI. En el segundo caso los estados topológicos en las brechas continúan conduciendo por los bordes. En escala de color se muestra la conductividad de dos terminales. Imagen extraída de [128].

localización fuerte.

### 3.3.1. Espectro del modelo prístino

Para estudiar las propiedades de transporte de un aislante anómalo de Floquet-Anderson resulta útil determinar su espectro. Esto es únicamente posible en el caso en que el sistema no tiene desorden para garantizar la validez del momento como buen número cuántico. Utilizando el formalismo de Floquet introducido en la sección 1.3, podemos calcular los elementos de matriz que definen los acoples de primeros vecinos

$$j^{(a)}(t) = \sum_n j_n^{(a)} e^{-in\Omega t}, \quad (3.31)$$

$$j^{(a)}(t) e^{im\Omega t} = \sum_n j_n^{(a)} e^{i(m-n)\Omega t}, \quad (3.32)$$

en donde el super-índice denota el tiempo inicial de la etapa de encendido del acople, así  $a \in \{0, T/4, 2T/4, 3T/4\}$ . En donde hemos utilizado las relaciones de ortogonalidad para las exponenciales complejas

$$\frac{1}{T} \int_0^T e^{i(m-n)\Omega t} dt = \delta_{mn}, \quad (3.33)$$

con  $\delta_{mn}$  la delta de Kronecker.

Notando que cada uno de los acoples de primeros vecinos existe durante un cuarto de cada uno de los intervalos, podemos escribir en general

$$j(t) = \begin{cases} J & \in [aT, bT] \\ 0 & \sim \end{cases} \quad (3.34)$$

entonces los coeficientes pueden ser escritos para el acople que inicia desde el tiempo  $aT$  hasta  $bT$ , con la restricción de  $b - a = 1/4$  puesto que cada intervalo dura  $T/4$ <sup>1</sup>. Por ende, podemos escribir

$$j_m = \frac{J}{im\Omega T} (e^{im\Omega bT} - e^{im\Omega aT}), \quad (3.35)$$

$$= \frac{J}{im\Omega T} (e^{im\Omega(a+1/4)T} - e^{im\Omega aT}), \quad (3.36)$$

$$= \frac{J}{im\Omega T} e^{i\Omega aT} (e^{im\Omega T/4} - 1). \quad (3.37)$$

Finalmente podemos resumir los elementos de matriz del Hamiltoniano de Floquet para los acoples solamente en términos del tiempo de inicio de la etapa del forzamiento como

$$j_m^{(a)} = \begin{cases} \frac{J}{i2\pi m} e^{im2\pi a} (e^{i2\pi m/4} - 1) & \forall m \neq 0 \\ J/4 & m = 0 \end{cases}.$$

Para estudiar la localización de los estados es posible recurrir a la *razón de participación inversa* (IPR). Matemáticamente se define como el  $p$ -ésimo momento de la función de densidad de probabilidad [130, 131]. Para un sistema discreto podemos escribirlo como

$$\text{IPR}_p = \sum_{\mathbf{r}} |\psi(\mathbf{r})|^{2p}, \quad (3.38)$$

donde  $p = 1$  corresponde a la función de densidad de probabilidad que para un estado normalizado es uno. Para los estados de borde, el inverso del IPR corresponde a la dispersión promedio (respecto al borde de la muestra) mientras que para estados extendidos del interior de las bandas, el inverso del IPR es proporcional a  $\xi^d$  (con  $d$  la dimensión espacial). Por ende la escala va desde los estados completamente extendidos (color claro) a localizado (color oscuro). Los estados de borde topológicos son quirales y conectan el interior de las bandas a través de estados extendidos (la Fig. (3.8) muestra un acercamiento de la estructura de bandas del espectro de Floquet-Bloch cerca de

---

<sup>1</sup>Notar que en la sección 3.2.2 cada etapa del protocolo fue definida por  $T/5$ . En nuestro estudio original, sin embargo, utilizamos  $T/4$  puesto que no requerimos ese artificio ya que no lidiamos directamente con la definición del invariante topológico, sino con sus consecuencias.

una de las brechas). En este punto, los estados topológicos se encuentran con estados extendidos una vez que llegan a los estados que residen en las bandas, como es usual. En las secciones siguientes, veremos que los estados en las bandas se localizarán cuando el desorden llega a un umbral.

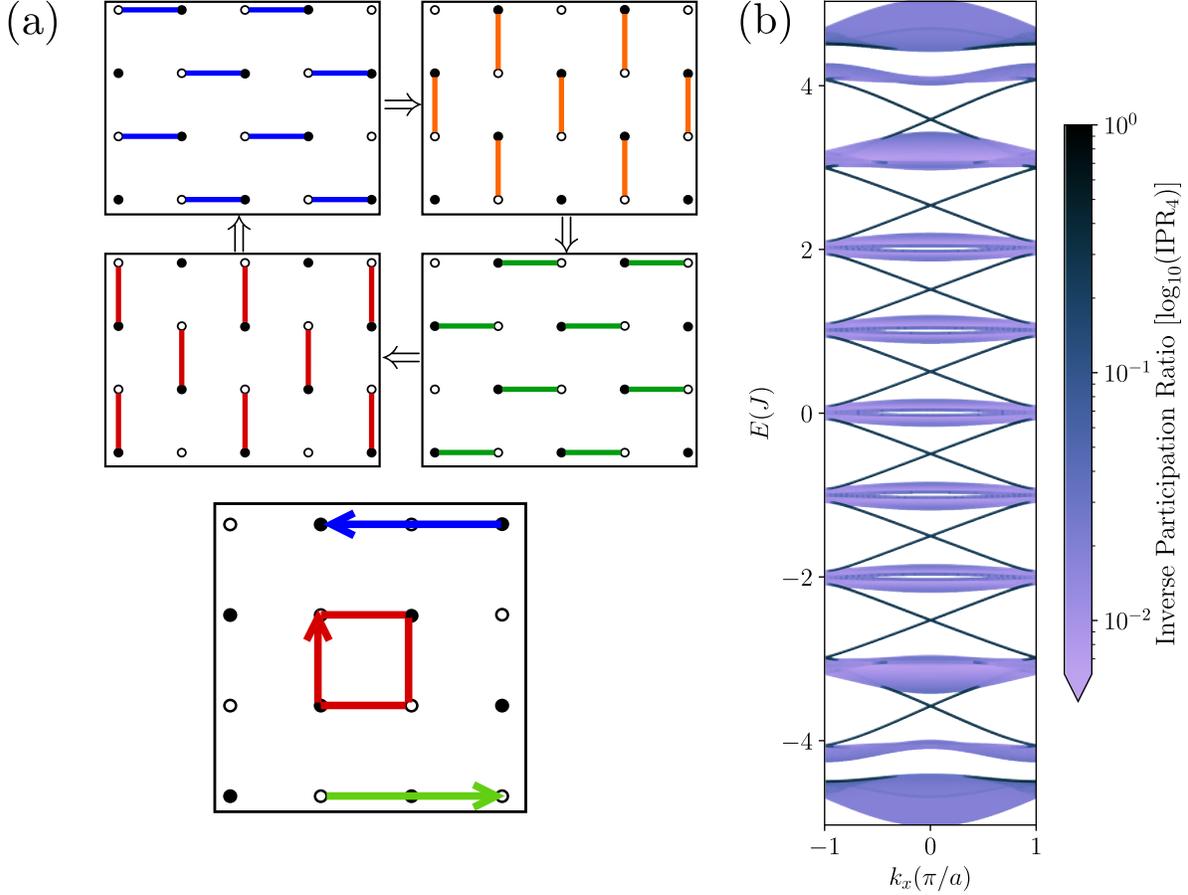


Figura 3.8: (a) Protocolo de forzamiento en el modelo de aislante anómalo de Floquet-Anderson en una red cuadrada. Los acoples de primeros vecinos (líneas sólidas que conectan los sitios representados por círculos) son encendidos y apagados en la secuencia indicada en los cuatro paneles. La magnitud del acople es  $J$ , elegida de tal manera que la probabilidad de salto de un sitio al otro sea igual a uno. Este protocolo de forzamiento produce estados de borde quirales en la frontera de la cinta sin efecto en el interior. (b) Espectro de cuasienergías en términos del cuasimomento en la primera zona de Brillouin. Los cálculos consideraron réplicas desde  $-4$  a  $+4$ . La escala de color indica la razón de participación inversa en escala logarítmica mostrando fuerte localización de los modos quirales que pasan por la brecha. Los estados en las bandas permanecen localizados.

### 3.3.2. Configuración de dos terminales

Para poder determinar la robustez de los estados de borde en presencia de desorden, medimos las propiedades de transporte utilizando un esquema de transporte para sistemas forzados como descrito en la sección 1.4.3. Una muestra de longitud  $L$  y ancho  $W$

se conecta a electrodos sin forzar. Dichos electrodos están hechos por una red cuadrada con la misma geometría de la muestra de AFAI y cuyos parámetros están ajustados para minimizar las reflexiones entre la zona forzada y la no forzada, y al mismo tiempo asegurando la existencia de una densidad de estados no nula que permita transporte de modos tanto en la brecha de energía como en el bulto de las bandas.

La Fig. (3.9)(b) muestra la conductancia de dos terminales en función de la energía de Fermi de los electrodos. Cada curva se corresponde con un valor de la intensidad del desorden. En la región correspondiente a la brecha energética del sistema limpio (marcada con líneas rojas en la Fig. (3.9)(a)-(b)) la conductancia promedio presenta una meseta a  $(0.94 \pm 0.04)2e^2/h$ ,  $(0.92 \pm 0.05)2e^2/h$  y  $(0.84 \pm 0.08)2e^2/h$  para  $dS = 0.0, 0.8$  y  $7.0$ , respectivamente. Estos valores son cercanos al límite teórico de  $2e^2/h$  esperado para un canal balístico contabilizando su degeneración de espín. Las desviaciones respecto al valor exacto se atribuyen a imperfección en el empalme entre la interfaz de los cables y la muestra, problema que ha sido presenciado en configuraciones de transporte para sistemas forzados [14, 132]. En tanto la intensidad del desorden incrementa, la meseta de conductancia permanece inalterada, lo cual constituye una de las huellas de las características topológicas de los estados de borde. Finalmente, para intensidades de desorden muy altas la conductancia cae a cero en correspondencia con el fenómeno de localización de Anderson.

Sin embargo, a diferencia de otras fases topológicas, la característica más interesante del AFAI aparece en el rango de energías del bulto de las bandas, en las regiones más extremas del rango de energías como se muestra en la Fig. (3.9). La conductancia baja rápidamente alcanzando una meseta cercana al límite cuántico  $2e^2/h$  para  $dS \gtrsim 1$ , el cual permanece hasta  $dS \gtrsim 12$  cuando la fase topológica finalmente deja de manifestarse. La Fig. (3.10) muestra la conductancia de dos terminales en función del desorden para energías de Fermi en la brecha del sistema limpio  $E = 0.5J$  y en el interior de las bandas para  $E = 0.9J$ , las transiciones están señaladas. Los puntos de transición reflejan la primera transición de fase desde el sistema prístino a la fase AFAI, y la segunda desde AFAI al régimen de localización de Anderson.

En los recuadros dentro de la Fig. (3.10) se muestra la función de onda dispersada por la muestra para algunos valores seleccionados del desorden. A pesar del comportamiento disímil entre las funciones de onda en el caso de Fig. (3.10)(i), la densidad asociada a la función de onda dispersada se vuelven similares conforme el desorden aumenta a una intensidad moderada, evidenciando una señal de que el sistema está en régimen AFAI. El hecho de que la conductancia es algo menor para el interior de las bandas puede ser debido a la presencia de canales débiles que puentean los bordes, creando estados localizados o por reflexiones provocadas por la interfaz. Un escrutinio detallado de nuestros resultados numéricos en un sistema de tres terminales indica que el segundo caso es el que ocurre. Cuando el desorden es suficientemente intenso, la localización aparece en el transporte impidiendo el transporte independientemente del valor de la energía de Fermi.

Otra característica que es visible en el caso de dos terminales es la existencia de corrientes de bombeo [61, 67], producto de la asimetría de los coeficientes de transmisión

$T_{RL}(E) \neq T_{LR}(E)$  el cual puede dar paso a una corriente finita incluso para voltaje nulo. Aunque la definición de conductancia  $G$  en el contexto de sistemas forzados da cuenta de esta asimetría, es interesante notar cuán grande es. La asimetría  $\delta T = (T_{RL} - T_{LR})/2$  se muestra en la Fig. (3.9)(c) para los mismos valores de desorden que en Fig. (3.9)(b). Para el sistema prístino no hay bombeo, puesto que ambos electrodos son equivalentes, lo cual cambia al introducirse el desorden.

Como notado en [20], en el límite sin desorden el sistema exhibe la fase de aislante anómalo de Floquet, en donde el número de pares de estados de borde  $W_\epsilon$ , dado por (3.27), es igual a uno cuando la energía  $\epsilon$  está en alguna de las brechas. Esto otorga un límite superior para la conductancia de dos terminales en unidades de  $2e^2/h$ , como se muestra en la Fig. (3.10).

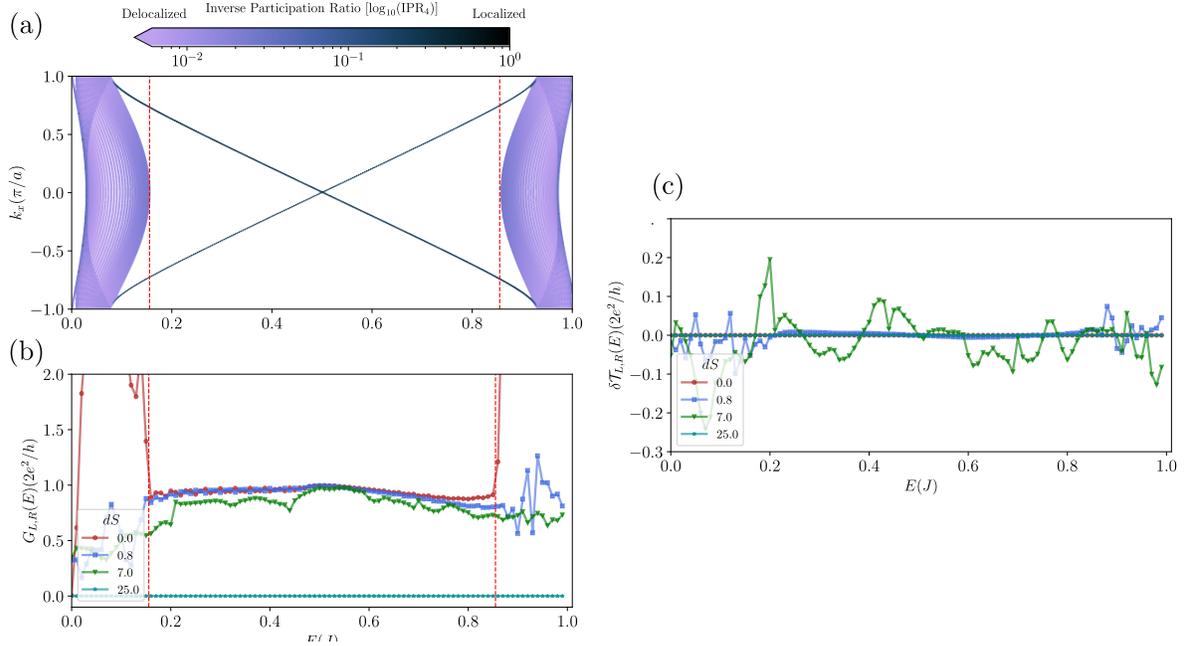


Figura 3.9: **(a)** Cuasienergía como función del cuasimomento a lo largo de la dirección de traslación espacial para el modelo de AFAI sin desorden. El estudio de transporte se focaliza en la primera región no trivial (denotada con líneas verticales rojas discontinuas) en donde existen estados de borde contrapropagantes que cruzan la brecha. **(b)** Conductancia diferencial de dos terminales como función de la energía de Fermi en los electrodos no forzados. La conductancia llega a valores cercanos al cuanto de conductancia  $2e^2/h$  para energías dentro de la brecha no trivial. La conductancia de dos terminales en las bandas comienza a atenuarse al aumentar la intensidad del desorden hasta que el régimen de AFAI aparece, saturando la conductancia a un valor ligeramente inferior al límite teórico de  $2e^2/h$ . Para alta intensidad de desorden el sistema alcanza la localización fuerte. En el panel **(c)** se muestra la asimetría de la transmisión  $\delta T = \frac{1}{2}(T_{RL} - T_{LR})$  responsable de la corriente de bombeo. Los cálculos corresponden a  $W = 40$  celdas unidad con los parámetros del electrodo ajustados a  $J_{\text{electrodo}} = 0.258J$  y  $E_{\text{electrodo}} = 0.528J$ .

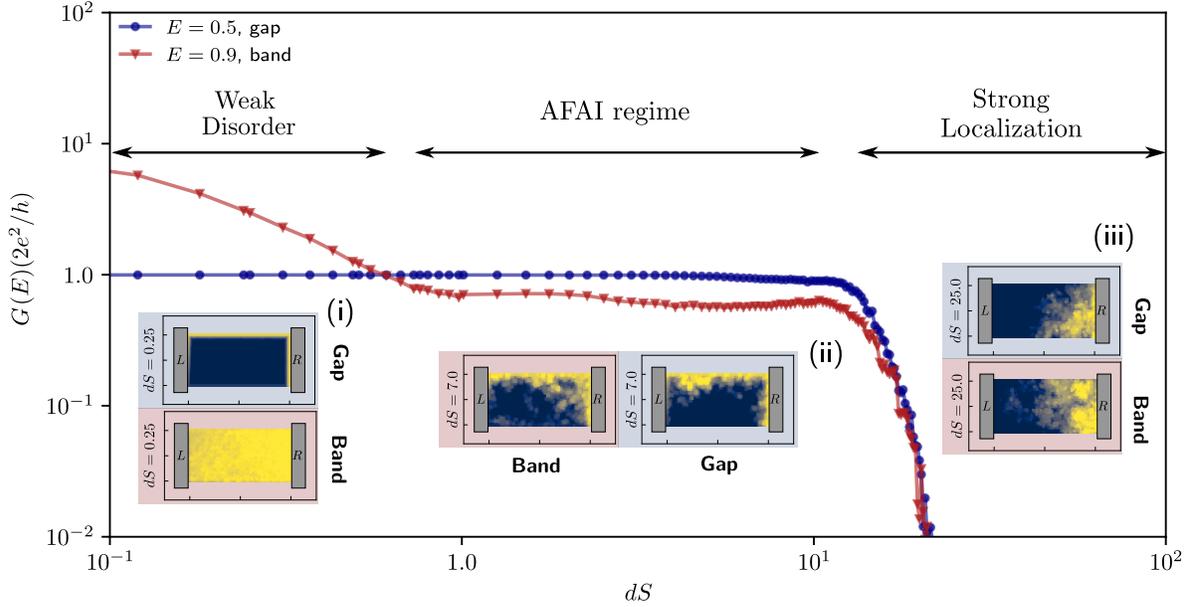


Figura 3.10: Variación de la conductancia de dos terminales en función de la intensidad del desorden  $dS$ . En rojo se muestra para un valor de energía dentro del interior de las bandas y en azul para un valor de energía dentro de la brecha. La conductancia prueba ser constante para intensidades de desorden moderadas (región etiquetada como *régimen AFAI*) para los casos dentro de las bandas como de la brecha. Para intensidades de desorden muy altas la localización fuerte se manifiesta atenuando la conductancia fuertemente. El cómputo se hizo en un promedio de cincuenta realizaciones de desorden.

### 3.3.3. Configuración multiterminal

Señales adicionales de firmas topológicas pueden ser encontradas, esta vez en un sistema multiterminal. La respuesta Hall es una firma arquetípica de estados topológicos quirales, como sucede con el efecto Hall cuántico [1]. En nuestro caso, la exploración numérica de la resistencia Hall es engorrosa debido a la existencia de respuesta no nula cuando el voltaje es nulo/débil debido a la existencia de las corrientes de bombeo presentes en sistemas forzados como hemos descrito en 1.4.3. Una forma de superar esa dificultad es ejecutar un procedimiento de autoconsistencia para asegurar que la corriente en el electrodo que se usa como voltímetro sea nula, análisis que escapa al alcance de este estudio.

Definimos la conductancia diferencial como la sensibilidad de la corriente entrando en el electrodo  $\alpha$  a variaciones del potencial químico  $\mu_\beta$  del electrodo  $\beta$  como propuesto en [96]

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon_F) \equiv -e \frac{d\bar{I}}{d\mu_\beta} = \frac{2e^2}{h} T_{\alpha\beta}(\varepsilon_F), \quad (3.39)$$

con  $\bar{I}$  la corriente promediada en un ciclo como introducido en (1.84). La relación (3.39) es válida para diferencia de potencial baja y temperaturas bajas. Esta definición de conductancia diferencial no es simétrica en varios potenciales químicos. Experimen-

talmente, un protocolo para determinar esta conductancia diferencial requeriría medir el cambio de la corriente promediada en un ciclo en el electrodo  $\alpha$  cuando un pequeño cambio se aplica en el potencial químico del cable  $\beta$ . Es importante notar que esta configuración puede calcular o simular la conductancia y no la conductividad. Por ende, esta cantidad no está directamente relacionada con invariantes topológicos ya que puede estar afectada por efectos de empalme entre regiones forzadas y no forzadas [14].

La quiralidad de los estados en el AFAI puede ser apreciada comparando  $G_{LT}$  y  $G_{RT}$  ( $L$ ,  $T$  y  $R$  refiriéndose a los electrodos izquierdo, superior y derecho, respectivamente como se muestra en la Fig. (3.11)), las conductancias diferenciales en una configuración con tres terminales como el mostrado en las Fig. (3.11)(a) y (b) respectivamente como función de la energía de Fermi. Desde el sistema limpio a moderadamente desordenado ( $dS = 0$  y  $dS = 0.8$ ) y dentro de la brecha, la transmisión es casi perfecta desde  $T$  a  $R$  mientras que es nula desde  $T$  a  $L$ . Para desorden más intenso  $dS = 7$ , la conductancia  $G_{RT}$  de degrada ligeramente para energías en la brecha pero mejora dentro de la primera banda (y a la vez  $G_{LT}$  casi desaparece en este rango), indicando que los estados del interior de las bandas han experimentado localización de Anderson. Esta es una característica crucial del régimen de la fase anómala de Floquet-Anderson.

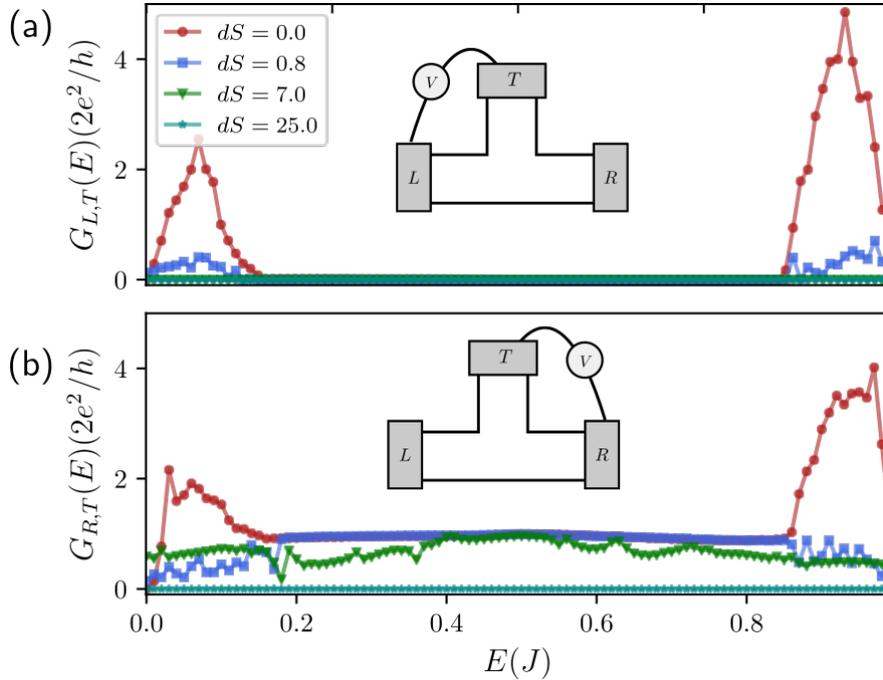


Figura 3.11: Conductancia diferencial de tres terminales para un sistema con forma de T, en función de la energía de Fermi. Dependiendo de la energía de los modos incidentes, la quiralidad esperada desde el modelo de AFAI empieza a desarrollarse. El inicio de esta fase comienza a ser visto de manera más clara para energías dentro del interior de las bandas cuando  $dS = 7.0$ .

Desviaciones desde el comportamiento perfecto, esto es, desviaciones del cuanto de conductancia a  $dS = 7.0$  son atribuidas a los problemas de empalme. Esto ofrece un esquema más realista de qué podría ser visto en experimentos en sistemas ópticos y

fotónicos.

La Fig. (3.12) provee evidencia adicional de la quiralidad de los estados de borde y de la transición entre localización débil a AFAI. Los paneles (a)-(c) y (d)-(f) muestran la función de onda dispersada para estados en  $E = 0.5$  y  $E = 0.9$  incidiendo desde el electrodo de la izquierda. El régimen AFAI se vuelve evidente para  $dS = 7.0$  en acuerdo con la discusión de la Fig. (3.11). Aunque la función de onda dispersada está más allá de nuestro alcance en sistemas de materia condensada, esta medida puede ser probada en sistemas fotónicos o materia ultrafría.

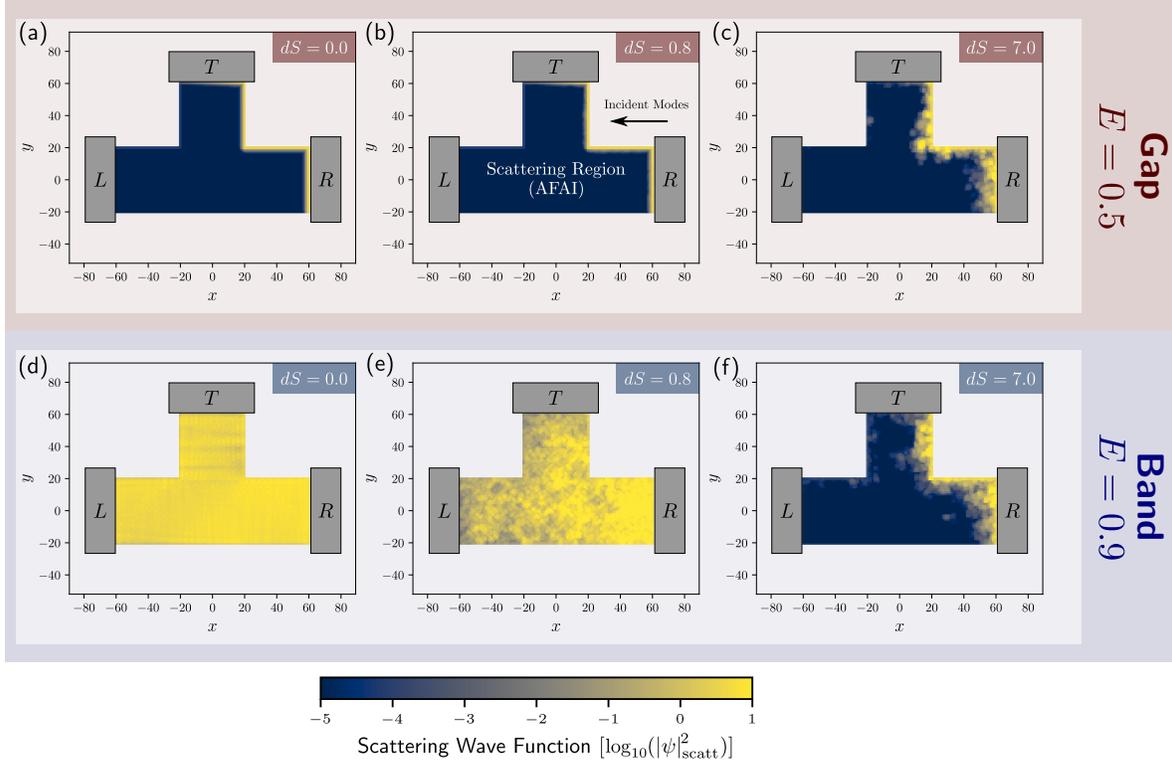


Figura 3.12: Función de onda dispersada en la muestra para la configuración de tres terminales para energías  $E = 0.5$  (dentro del interior las brecha)  $E = 0.9$  (dentro del interior de las bandas) para diferentes valores del desorden. Al incrementarse el desorden, los estados del interior se localizan hasta que uno de los estados de borde quirales permanece (f), indicando el régimen de aislante de Floquet-Anderson anómalo.

### 3.4. Conclusión

Los aislantes anómalos de Floquet-Anderson representan uno de los tipos de sistemas que presentan estados topológicos inducidos por el potencial periódico y que no tiene contraparte estática, puesto que levanta las restricciones impuestas por el argumento de Halperin para la existencia de estados delocalizados y adicionalmente el desorden localiza a los estados en las bandas. El trabajo original que desarrollamos en torno al transporte en estos sistemas deja en evidencia comportamiento propio de sistemas topológicos, a través de estudios de conductancia en sistemas de dos y tres terminales

en el régimen de respuesta lineal. La quiralidad de los estados se manifiesta de manera clara en sistemas de tres terminales y evidencia adicional puede ser vista en espacio real mediante la observación de las funciones de onda dispersadas por la muestra [114], la cual parece ser accesible en experimentos relacionados con redes ópticas o experimentos de materia ultrafría [22, 115, 116] . Estas conclusiones dieron lugar a una de las publicaciones que conforman esta tesis en [114]. Todos los resultados numéricos fueron llevados a cabo con la librería de transporte cuántico Kwant [133]

# Capítulo 4

## Comentarios finales

Nuestros estudios combinan tres ingredientes principales que han logrado madurez en la literatura: física de aislantes topológicos, sistemas forzados periódicamente en el tiempo y transporte cuántico. La física de aislantes topológicos ha sentado sus bases firmemente: estudios recientes muestran que gran parte de los materiales en realidad pueden albergar física topológica [126], por ende la relevancia de nuestros estudios los cuales determinan firmas y cómo controlarlas suman un precedente importante para estimular la generación de aplicaciones o caracterización de estas.

Las fases topológicas de Floquet ya han ganado terreno en el escenario de la materia condensada y en experimentos relacionados a sistemas análogos, siendo habitual la emergencia de nuevas propuestas en modelos de redes dispersivas, caminatas cuánticas [52-54, 128, 129]etc, e incluso generando nuevas vertientes que incluyen la interacción entre la física topológica no hermitiana con los sistemas de Floquet [19]. En su génesis, la inclusión de los potenciales externos fue principalmente alentada para generar nuevos estados [17, 49], como en el caso relevante del aislante topológico de Floquet-Anderson [20], que tratamos en el capítulo 3. A su vez, esta línea impone la dificultad de portar los conceptos de invariantes topológicos y la correspondencia de interior frontera a los sistemas forzados, y que se ha demostrado que ser una tarea altamente no trivial [19-21, 125]. Las simulaciones de transporte que hemos efectuado en el capítulo 3 ayudan a validar las predicciones teóricas y a comprender si el transporte realmente es debido a topología, entendiendo estas señales en analogía a fenómenos relacionados a la física del efecto Hall cuántico entero o de espín, como la cuantización de las probabilidades de transmisión producto del número de estados topológicos habilitados.

Los sistemas nuevos de Floquet, como los aislantes topológicos de Floquet anómalos o el aislante topológico de Floquet-Anderson, el cual emerge por un juego entre el desorden y el forzamiento, han sido analizados experimentalmente [22, 115, 116, 134] y además han servido como sustrato conceptual para generar fases topológicas en otros contextos, como sistemas bosónicos o superconductividad asistida por potenciales periódicos, aportando a la investigación fundamental [19]. Las nuevas fases exclusivas para los sistemas de Floquet no siempre tienen un correlato sencillo sobre sistemas electrónicos. En particular, el modelo estudiado en la sección 3.3 es prueba de esta

dificultad. Sin embargo, estos modelos exóticos han podido ser recreados en sistemas de redes fotónicas, átomos fríos y redes acústicas [22-24, 56], sustentando una descripción efectiva al tratamiento electrónico que hemos efectuado en el capítulo 3, por lo que nuestros resultados pueden ayudar encontrar firmas de consistencia con las fases predichas.

Muy recientemente ha emergido evidencia experimental concreta del efecto Hall cuántico inducido por luz en grafeno utilizando luz circularmente polarizada en pulsos del orden de los femtosegundos [57]. Este trabajo es un hito importante para el área, ya que viene a validar la idea de la generación de los estados topológicos de Floquet en grafeno [14, 46-48, 80], así como la idea de que la estructura de bandas de los sistemas puede ser apropiadamente modificada externamente para generar diversas señales de transporte. Estimamos que la comprobación de estas ideas es relevante para la validación de nuestras predicciones numéricas del capítulo 2, en donde materiales de dos dimensiones tipo panal de abejas similares al grafeno monocapa, como el siliceno, estaneno o germaneno podrían ser también sometidos a experimentos similares.

Nuestros estudios no están exentos de posibles dificultades en su comprobación experimental, puesto que la teoría de Floquet está diseñada para estudiar la dinámica cuando los sistemas han perdido noción de las condiciones iniciales, por lo que no podemos predecir el comportamiento a tiempos cortos, para lo cual un enfoque de ecuaciones maestras podría resultar más adecuado. Adicionalmente, el problema de las ocupaciones y la termodinámica de los sistemas de Floquet es un tópico que ha sido abordado en la literatura [135, 136], puesto que las funciones de ocupación no pueden ser definidas de manera sencilla como en el caso estático ya que las energías ahora son promovidas a ser cuasienergías. Este problema tiene propuestas de resolución mediante un apropiado diseño de los reservorios a través de la modificación de los métodos de relajación de las interacciones de electrones y fotones [137, 138].

En esta tesis hemos estudiado evidencias de física topológica de sistemas forzados de dos dimensiones, así como formas en que la topología puede modificarse para generar respuestas de transporte cuántico específicas. Nuestra contribución original constituye entonces un precedente orientado a la comprensión, mediante el uso de potenciales externos de las firmas de topología nativa o inducida en señales de transporte. Esperamos que nuestros aportes contribuyan al estímulo de pruebas experimentales de las fases topológicas exclusivas a sistemas forzados así como proveer nuevas perspectivas en el desarrollo de dispositivos basados en aislantes topológicos para aplicaciones electrónicas o de computación cuántica.

# Apéndice A

## Modelos Tight-Binding usando Kwant

Para calcular la estructura de bandas de un modelo de Kane-Mele estático con borde zig-zag, podemos emplear la librería para Python llamada `kwant` [133]. Este software permite el cálculo numérico de propiedades de transporte y de propiedades espectrales de sistemas tipo tight-binding.

Aprovechando la expresividad de Python, podemos declarar de manera secuencial cada uno de los atributos de la red así mismo como su geometría.

```
1 import kwant as kw
2 import numpy as np
3 from matplotlib import pyplot as plt
4
5 # Usamos la notacion de la ecuacion (1), arXiv: 0506581, Kane-Mele - 2005
6 W = 40
7 t = -1.0
8 lambda_so = 0.06
9 lambda_r = 0.01
10 lambda_v = 0.05
11
12 # Matrices de Pauli
13 sigma_0 = np.array([[1, 0], [0, 1]]) ; sigma_x = np.array([[0, 1], [1, 0]])
14 sigma_y = np.array([[0, -1j], [1j, 0]]) ; sigma_z = np.array([[1, 0], [0, -1]])
15 r3h = np.sqrt(3.0)/2.0
16
17 # Declaramos la geometria (vectores de red y base)
18 graphene = kw.lattice.general([(1, 0), (1/2, np.sqrt(3)/2)],
19                               [(0, -1/(np.sqrt(3))), (1/2, -1/(2*np.sqrt(3)))]])
20 a, b = graphene.sublattices
21
22 def kane_mele_ribbon():
23     """Funcion que genera un sistema de Kwant que describe
24     una nanocita de modelo de Kane-Mele"""
25
26     def rectangulo(pos):
27         return (-W/2 <= pos[1] <= W/2)
28
29     def energia_sitio(site):
30         if site.family == a:
31             return lambda_v*sigma_0
32         elif site.family == b:
33             return -lambda_v*sigma_0
```

```

34
35 # Declarar simetria de traslacion y geometria
36 sym = kw.TranslationalSymmetry(graphene.vec((1, 0)))
37 sys = kw.Builder(sym)
38 sys[graphene.shape(rectangulo, (0,0))] = energia_sitio
39
40 # Primeros vecinos Rashba
41 sys[kw.HoppingKind((0, 0), b, a)] = t*sigma_0 + 1.j*lambda_r*( 0.5*sigma_x - r3h*sigma_y)
42 sys[kw.HoppingKind((-1, 0), b, a)] = t*sigma_0 + 1.j*lambda_r*( 0.5*sigma_x + r3h*sigma_y)
43 sys[kw.HoppingKind((0, -1), b, a)] = t*sigma_0 + 1.j*lambda_r*(-1.0*sigma_x)
44
45 # Segundos vecinos
46 hoppings2a = (((1, 0), a, a), ((0, -1), a, a), ((-1, 1), a, a))
47 hoppings2b = (((-1, 0), b, b), ((0, 1), b, b), ((1, -1), b, b))
48
49 sys[[kw.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings2a]] = 1j*lambda_so*sigma_z
50 sys[[kw.builder.HoppingKind(*hopping) for hopping in hoppings2b]] = 1j*lambda_so*sigma_z
51
52 sys.eradicate_dangling()
53
54 return sys
55
56
57 class Bands_and_Vecs(object):
58     """Clase que permite determinar la matriz de acoples (dependiente de k)
59     y de energia de sitio"""
60
61     def __init__(self, sys, args=()):
62         self.ham = sys.cell_hamiltonian(args)
63         if not np.allclose(self.ham, self.ham.T.conj()):
64             raise ValueError('The cell Hamiltonian is not Hermitian.')
65         hop = sys.inter_cell_hopping(args)
66         self.hop = np.empty(self.ham.shape, dtype=complex)
67         self.hop[:, : hop.shape[1]] = hop
68         self.hop[:, hop.shape[1]:] = 0
69
70     def __call__(self, k):
71         mat = self.hop * complex(np.cos(k), np.sin(k))
72         mat += mat.conjugate().transpose() + self.ham
73         return np.linalg.eigh(mat)
74
75
76 def estructura_de_bandas(sys, momenta, filename='bandas.dat'):
77     """Funcion que determina el espectro en terminos del momento,
78     e imprime la informacion en columnas en el archivo bandas.dat"""
79
80     evals_evecs = Bands_and_Vecs(sys)
81
82     # Seleccionamos los sitios dentro de la supercelda
83     indices_seleccionados = np.array([jj for jj, site in enumerate(sys.sites) if site.tag[0]==0])
84
85     k_arr, E_arr, peso_spin = [], [], []
86
87     for k in momenta:
88         (energies, eig) = evals_evecs(k)
89         for ii, energy in enumerate(energies):
90
91             eig_up = eig[:,2, ii] # Subespacio spin up
92             eig_down = eig[1:,2, ii] # Subespacio spin down
93
94             weight_up = np.sum(np.abs(eig_up[indices_seleccionados])**2)
95             weight_down = np.sum(np.abs(eig_down[indices_seleccionados])**2)
96
97             k_arr.append(k) ; E_arr.append(energy)
98             peso_spin.append(weight_up - weight_down)
99
100     # El archivo tendra las columnas k, E, peso_spin
101     bandas = np.array([k_arr, E_arr, peso_spin])
102
103     # Guardar
104     np.savetxt(filename, np.transpose(bandas), delimiter='\t')

```

```

105
106 # Ribbon
107 ribbon = kane_mele_ribbon()
108
109 # Graficar la supercelda
110 kw.plot(ribbon)
111
112 # Finalizar el sistema para calcular espectro
113 ribbon = ribbon.finalized()
114
115 # Estructura de bandas
116 momenta = np.linspace(0, 2*np.pi, num=500)
117 bandas = estructura_de_bandas(ribbon, momenta)

```

Este programa es fácilmente adaptable para calcular cualquier peso de la función de onda, ya sea espacial, en espín, entre otros. Lógica similar ha sido empleada para determinar la estructura de bandas en problemas que involucran sistemas periódicos en el tiempo, en donde hay que contabilizar ahora el espacio de réplicas.

El archivo que este programa entrega como producto, contiene columnas que pueden ser fácilmente visualizadas en un *scatter plot* de la librería `matplotlib` o en tablas de la librería `pandas`.



$$A_{\text{eff}} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{13} \\ B_{31} & B_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & \mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

donde las entradas de  $A_{\text{eff}}$  podemos escribirlas en base a las ecuaciones definidas por (B.2)

$$A_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} A_{11} + A_{12}A_{22}^{-1}A_{21} & A_{13} + A_{12}A_{22}^{-1}A_{23} \\ A_{31} + A_{32}A_{22}^{-1}A_{21} & A_{33} + A_{32}A_{22}^{-1}A_{23} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

En particular, para nuestro problema siempre tendremos que  $A_{13} = A_{31} = 0$ , puesto que el acople entre celdas unidades que no son adyacentes es siempre nulo. Un electrodo con  $2^k + 1$  celdas unidad ( $k$  suficientemente grande para asegurar convergencia) es considerado y cada segunda celda es decimada en cada paso hasta que solo quedan tres, las cuales corresponden a las funciones de Green superficiales  $\mathcal{G}_{L/R}$  y la del interior del electrodo  $\mathcal{G}_B$ . Esto entrega un conjunto iterativo de ecuaciones:

$$\mathcal{G}_{L/B/R}^{(i)} = [\varepsilon_+ - H_{L/B/R}^{(i)}]^{-1} \quad \text{con} \quad H_{L/B/R}^{(0)} = H, \quad (\text{B.5})$$

$$\alpha^{(i+1)} = \alpha^{(i)} \mathcal{G}_B^{(i)} \alpha^{(i)} \quad \text{con} \quad \alpha^{(0)} = \tau, \quad (\text{B.6})$$

$$\beta^{(i+1)} = \beta^{(i)} \mathcal{G}_B^{(i)} \beta^{(i)} \quad \text{con} \quad \beta^{(0)} = \tau^\dagger, \quad (\text{B.7})$$

$$H_L^{(i+1)} = H_L^{(i)} + \alpha^{(i)} \mathcal{G}_B^{(i)} \beta^{(i)}, \quad (\text{B.8})$$

$$H_B^{(i+1)} = H_B^{(i)} + \alpha^{(i)} \mathcal{G}_B^{(i)} \beta^{(i)} + \beta^{(i)} \mathcal{G}_B^{(i)} \alpha^{(i)}, \quad (\text{B.9})$$

$$H_R^{(i+1)} = H_R^{(i)} + \beta^{(i)} \mathcal{G}_B^{(i)} \alpha^{(i)}, \quad (\text{B.10})$$

donde  $H_{L/R}^{(i)}$  es el Hamiltoniano efectivo en el paso  $i$ -ésimo que corresponde a las entradas de la primera/última diagonal de (B.4). Las matrices de acople efectivo  $\alpha^{(i)}$  y  $\beta^{(i)}$  se corresponden a las entradas de la primera/última antidiagonal. El proceso iterativo para  $H_{L/B/R}^{(i)}$  continúa hasta que el criterio de convergencia  $\|\alpha\| + \|\beta\| \rightarrow 0$  se cumple. Finalmente, la función de Green superficial se calcula como (desde el punto de vista del electrodo)

$$\mathcal{G}_{L/B/R} = [\varepsilon_+ - H_{L/B/R}^{(+\infty)}]^{-1},$$

entonces, volviendo al punto de vista de la configuración de transporte

$$g_{L/R} = \mathcal{G}_{R/L}. \quad (\text{B.11})$$

## B.2. Decimación de un sistema finito

Una opción, para determinar las funciones de Green asociadas al sistema central, con la influencia de las autoenergías, sería invertir directamente (2.44) una vez corregido por las autoenergías [15, 139]. Esto es muy costoso computacionalmente (orden  $m^3$  en tiempo y  $m^2$  en memoria), por ende vamos a invertir solamente los bloques que nos interesan empleando una técnica de decimación similar a la de la sección anterior.

Consideremos el Hamiltoniano de la región central con su respectiva función de Green como

$$H_C = \begin{pmatrix} h_1 & \tau_{12} & & & \\ \tau_{21} & h_2 & \tau_{23} & & \\ & \tau_{32} & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & h_{m-1} & \tau_{m-1,m} \\ & & & \tau_{m,m-1} & h_m \end{pmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

$$G_C = \begin{pmatrix} G_1 & G_{12} & & & G_{1,N} \\ G_{21} & G_2 & G_{23} & & \\ & G_{32} & G_3 & \ddots & \\ & & \ddots & G_{N-1} & G_{N-1,N} \\ G_{m,1} & & & G_{N,N-1} & G_N \end{pmatrix}, \quad (\text{B.13})$$

En este caso estamos interesados en las funciones de Green  $G_1$ ,  $G_N$  que son las de las superficies y  $G_{1,N}$  y  $G_{N,1}$  que son el resultado final que captura el Hamiltoniano efectivo debido a los extremos. Análogamente a la sección anterior, podemos plantear el problema como

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & \mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.14})$$

que implica las siguientes ecuaciones

$$\left( A_{11} - A_{12} A_{22}^{-1} A_{21} \right) B_{11} = \mathbb{I}, \quad (\text{B.15})$$

$$-A_{22}^{-1} A_{21} B_{11} = B_{21} \quad (\text{B.16})$$

por lo que hemos reducido de manera efectiva el problema para encontrar  $B_{11}$ . Comenzaremos decimando la segunda celda. Aplicando iterativamente estas ecuaciones al problema definido por (B.12), tenemos, para  $n = 0, 1, \dots, N - 2$

$$G_{xx}^{(n)} = \left( \varepsilon_+ - h_{n+2}^{(n)} \right)^{-1}, \quad \text{con } h_{ij}^{(0)} = (H_C)_{ij} \quad (\text{B.17})$$

$$h_1^{(n+1)} = h_1^{(n)} + \tau_{1,n+2}^{(n)} G_{xx}^{(n)} \tau_{n+2,1}^{(n)}, \quad (\text{B.18})$$

$$\tau_{1,n+2}^{(n+1)} = \tau_{1,n+2}^{(n)} G_{xx}^{(n)} \tau_{n+1,n+2}^{(0)}, \quad (\text{B.19})$$

$$\tau_{n+2,1}^{(n+1)} = \tau_{n+2,n+1}^{(0)} G_{xx}^{(n)} \tau_{n+2,1}^{(n)}, \quad (\text{B.20})$$

$$h_{n+2}^{(n)} = h_{n+2}^{(0)} + \tau_{n+2,n+1}^{(0)} G_{xx}^{(n)} \tau_{n+1,n+2}^{(0)}. \quad (\text{B.21})$$

por lo que llegamos a

$$\begin{pmatrix} h_1^{\text{eff}} & \tau_{1,N}^{\text{eff}} \\ h_{N,1}^{\text{eff}} & h_N^{\text{eff}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1^{(N-2)} & \tau_{1,N}^{(N-2)} \\ \tau_{N,1}^{(N-2)} & h_N^{(N-2)} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.22})$$

Finalmente, podemos extraer el bloque necesario de la función de Green al invertir  $\varepsilon_+ - h_{N,1}^{\text{eff}}$ . Concluimos el cálculo de la transmisión mediante la fórmula simplificada [139]

$$T_{R \leftarrow L}(E) = \text{Tr} \left( \Gamma'_R G_{N,1} \Gamma'_L G_{N,1}^\dagger \right), \quad (\text{B.23})$$

con  $G_{N,1} = \left( \varepsilon_+ - h_{N,1}^{\text{eff}} \right)^{-1}$  y con  $\Gamma'_{R/L}$  las funciones (2.47) reducidas a la función de Green superficial y los bloques  $\tau_{LC/RC/CL/CR}$ .

# Bibliografía

- [1] K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper. New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance. *Physical Review Letters*, 45:494, 1980.
- [2] K. v. Klitzing. 25 Years of Quantum Hall Effect (QHE) A Personal View on the Discovery, Physics and Applications of this Quantum Effect. En *The Quantum Hall Effect: Poincaré Seminar 2004*, Progress in Mathematical Physics. Birkhäuser, 2005.
- [3] R. B. Laughlin. Quantized Hall conductivity in two dimensions. *Physical Review B*, 23:5632, 1981.
- [4] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale y M. den Nijs. Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential. *Physical Review Letters*, 49:405, 1982.
- [5] F. D. M. Haldane. Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed Matter Realization of the “Parity Anomaly”. *Physical Review Letters*, 61, 1988.
- [6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva y A. A. Firsov. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306:666, 2004.
- [7] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos y A. A. Firsov. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, 438:197, 2005.
- [8] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov y A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, 81:109, 2009.
- [9] Liangzhi Kou, Yandong Ma, Ziqi Sun, Thomas Heine y Changfeng Chen. Two-Dimensional Topological Insulators: Progress and Prospects. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 8:1905, 2017.
- [10] C. L. Kane y E. J. Mele.  $\mathbb{Z}_2$  Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect. *Physical Review Letters*, 95:146802, 2005.
- [11] C. L. Kane y E. J. Mele. Quantum Spin Hall Effect in Graphene. *Physical Review Letters*, 95:226801, 2005.
- [12] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Qi y Shou-Cheng Zhang. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells. *Science*, 318:766, 2007.
- [13] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes y Shou-Cheng Zhang. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells. *Science*, 314:1757, 2006.

- [14] L. E. F. Foa Torres, P. M. Perez-Piskunow, C. A. Balseiro y Gonzalo Usaj. Multiterminal Conductance of a Floquet Topological Insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 113:266801, 2014.
- [15] Luis E. F. Foa Torres, Stephan Roche y Jean-Christophe Charlier. *Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport*. Cambridge University Press, 2020.
- [16] Feliciano Giustino, Jin Hong Lee, Felix Trier, Manuel Bibes, Stephen M Winter, Roser Valentí, Young-Woo Son, Louis Taillefer, Christoph Heil, Adriana I Figueroa, Bernard Plaçais, QuanSheng Wu, Oleg V Yazyev, Erik P A M Bakkers, Jesper Nygård, Pol Forn-Díaz, Silvano De Franceschi, J W McIver, L E F Foa Torres, Tony Low, Anshuman Kumar, Regina Galceran, Sergio O Valenzuela, Marius V Costache, Aurélien Manchon, Eun-Ah Kim, Gabriel R Schleder, Adalberto Fazzio y Stephan Roche. The 2021 quantum materials roadmap. *Journal of Physics: Materials*, 3:042006, 2021.
- [17] Takashi Oka e Hideo Aoki. Photovoltaic Hall effect in graphene. *Physical Review B*, 79:081406, 2009.
- [18] Takashi Oka y Sota Kitamura. Floquet Engineering of Quantum Materials. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 10:387, 2019.
- [19] Mark S. Rudner y Netanel H. Lindner. Band structure engineering and non-equilibrium dynamics in Floquet topological insulators. *Nature Reviews Physics*, 2:229, 2020.
- [20] Paraj Titum, Erez Berg, Mark S. Rudner, Gil Refael y Netanel H. Lindner. Anomalous Floquet-Anderson Insulator as a Nonadiabatic Quantized Charge Pump. *Physical Review X*, 6:021013, 2016.
- [21] Frederik Nathan, Dmitry Abanin, Erez Berg, Netanel H. Lindner y Mark S. Rudner. Anomalous Floquet insulators. *Physical Review B*, 99:195133, 2019.
- [22] Karen Wintersperger, Christoph Braun, F. Nur Ünal, André Eckardt, Marco Di Liberto, Nathan Goldman, Immanuel Bloch y Monika Aidelsburger. Realization of an anomalous Floquet topological system with ultracold atoms. *Nature Physics*, 16:1058, 2020.
- [23] Yu-Gui Peng, Cheng-Zhi Qin, De-Gang Zhao, Ya-Xi Shen, Xiang-Yuan Xu, Ming Bao, Han Jia y Xue-Feng Zhu. Experimental demonstration of anomalous Floquet topological insulator for sound. *Nature Communications*, 7:13368, 2016.
- [24] Qingqing Cheng, Yiming Pan, Huaiqiang Wang, Chaoshi Zhang, Dong Yu, Avi Gover, Haijun Zhang, Tao Li, Lei Zhou y Shining Zhu. Observation of Anomalous  $\pi$  Modes in Photonic Floquet Engineering. *Physical Review Letters*, 122:173901, 2019.
- [25] B. Keimer y J. E. Moore. The physics of quantum materials. *Nature Physics*, 13:1045, 2017.
- [26] Chun Ning Lau, Fengnian Xia y Linyou Cao. Emergent quantum materials. *MRS Bulletin*, 45:340, 2020.
- [27] Yoshinori Tokura, Masashi Kawasaki y Naoto Nagaosa. Emergent functions of quantum materials. *Nature Physics*, 13:1056, 2017.
- [28] D. N. Basov, R. D. Averitt y D. Hsieh. Towards properties on demand in quantum materials. *Nature Materials*, 16:1077, 2017.
- [29] MoS2 and semiconductors in the flatland. *Materials Today*, 18:20, 2015.

- [30] Xiaolong Liu y Mark C. Hersam. 2D materials for quantum information science. *Nature Reviews Materials*, 4:669, 2019.
- [31] A. Avsar, J. Y. Tan, T. Taychatanapat, J. Balakrishnan, G. K. W. Koon, Y. Yeo, J. Lahiri, A. Carvalho, A. S. Rodin, E. C. T. O’Farrell, G. Eda, A. H. Castro Neto y B. Özyilmaz. Spin-orbit proximity effect in graphene. *Nature Communications*, 5:4875, 2014.
- [32] Xuewen Wang, Yinghui Sun y Kai Liu. Chemical and structural stability of 2D layered materials. *2D Materials*, 6:042001, 2019.
- [33] C. W. J. Beenakker. Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene. *Reviews of Modern Physics*, 80:1337, 2008.
- [34] Michel Fruchart. *Topological phases of periodically driven crystals*. These de doctorat, Lyon, 2016.
- [35] B. Andrei Bernevig y Taylor L. Hughes. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, 2013.
- [36] Tudor D. Stanescu. *Introduction to Topological Quantum Matter & Quantum Computation*. CRC Press, 2016.
- [37] Joel E. Moore. The birth of topological insulators. *Nature*, 464:194, 2010.
- [38] Klaus von Klitzing. Essay: Quantum Hall Effect and the New International System of Units. *Physical Review Letters*, 122:200001, 2019.
- [39] B. I. Halperin. Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Physical Review B*, 25:2185, 1982.
- [40] Gregor Jotzu, Michael Messer, Rémi Desbuquois, Martin Lebrat, Thomas Uehlinger, Daniel Greif y Tilman Esslinger. Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions. *Nature*, 515:237, 2014.
- [41] Michel Fruchart y David Carpentier. An introduction to topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, 14:779, 2013.
- [42] János K. Asbóth, László Oroszlány y András Pályi. *A Short Course on Topological Insulators*. Lecture Notes in Physics. Springer International Publishing, 2016.
- [43] Shinsei Ryu, Andreas P Schnyder, Akira Furusaki y Andreas W W Ludwig. Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy. *New Journal of Physics*, 12:065010, 2010.
- [44] Alexei Kitaev. Periodic table for topological insulators and superconductors. *AIP Conference Proceedings*, 1134:22, 2009.
- [45] Andreas P. Schnyder, Shinsei Ryu, Akira Furusaki y Andreas W. W. Ludwig. Classification of topological insulators and superconductors in three spatial dimensions. *Phys. Rev. B*, 78:195125, 2008.
- [46] P. M. Perez-Piskunow, Gonzalo Usaj, C. A. Balseiro y L. E. F. Foa Torres. Floquet chiral edge states in graphene. *Phys. Rev. B*, 89:121401, 2014.
- [47] Gonzalo Usaj, P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres y C. A. Balseiro. Irradiated graphene as a tunable Floquet topological insulator. *Phys. Rev. B*, 90:115423, 2014.
- [48] Hernán L Calvo, Pablo M Perez-Piskunow, Horacio M Pastawski, Stephan Roche y Luis E F Foa Torres. Non-perturbative effects of laser illumination on the electrical properties of graphene nanoribbons. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25:144202, 2013.

- [49] Netanel H. Lindner, Gil Refael y Victor Galitski. Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells. *Nature Physics*, 7:490, 2011.
- [50] G. Floquet. Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques. *Annales scientifiques de l'École normale supérieure*, 12:47, 1883.
- [51] Norman Y. Yao y Chetan Nayak. Time crystals in periodically driven systems. *Physics Today*, 71:40, 2018.
- [52] J. K. Asbóth. Symmetries, topological phases, and bound states in the one-dimensional quantum walk. *Physical Review B*, 86:195414, 2012.
- [53] J. K. Asbóth, B. Tarasinski y P. Delplace. Chiral symmetry and bulk-boundary correspondence in periodically driven one-dimensional systems. *Physical Review B*, 90:125143, 2014.
- [54] Pierre Delplace. Topological chiral modes in random scattering networks. *SciPost Physics*, 8:081, 2020.
- [55] Hong Wu y Jun-Hong An. Floquet topological phases of non-Hermitian systems. *Physical Review B*, 102:041119, 2020.
- [56] Mikael C. Rechtsman, Julia M. Zeuner, Yonatan Plotnik, Yaakov Lumer, Daniel Podolsky, Felix Dreisow, Stefan Nolte, Mordechai Segev y Alexander Szameit. Photonic Floquet topological insulators. *Nature*, 496:196, 2013.
- [57] J. W. McIver, B. Schulte, F.-U. Stein, T. Matsuyama, G. Jotzu, G. Meier y A. Cavalleri. Light-induced anomalous Hall effect in graphene. *Nature Physics*, 16:38, 2020.
- [58] Quantum phases on demand. *Nature Physics*, 16:1, 2020.
- [59] Jon H. Shirley. Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time. *Physical Review*, 138:B979, 1965.
- [60] A. Gómez-León y G. Platero. Floquet-Bloch Theory and Topology in Periodically Driven Lattices. *Physical Review Letters*, 110:200403, 2013.
- [61] Michael V. Moskalets. *Scattering matrix approach to non-stationary quantum transport*. Imperial College Press ; World Scientific Publishing, 2012.
- [62] Hideo Sambe. Steady States and Quasienergies of a Quantum-Mechanical System in an Oscillating Field. *Physical Review A*, 7:2203, 1973.
- [63] G. Stefanucci, S. Kurth, A. Rubio y E. K. U. Gross. Time-dependent approach to electron pumping in open quantum systems. *Phys. Rev. B*, 77:075339, 2008.
- [64] Massimiliano Di Ventra. *Electrical Transport in Nanoscale Systems*. Cambridge University Press, 2008.
- [65] Supriyo Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1997.
- [66] T. Dittrich, P. Hänggi, G.-L. Ingold, Bernhard Kramer, G. Schön y Wilhelm Zwerger. *Quantum transport and dissipation*. Wiley-VCH, 1998.
- [67] S Kohler, J Lehmann y P Hanggi. Driven quantum transport on the nanoscale. *Physics Reports*, 406:379, 2005.
- [68] Liang Fu y C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B*, 76:045302, 2007.
- [69] Yafei Ren, Zhenhua Qiao y Qian Niu. Topological phases in two-dimensional materials: a review. *Reports on Progress in Physics*, 79:066501, 2016.
- [70] Desheng Kong y Yi Cui. Opportunities in chemistry and materials science for topological insulators and their nanostructures. *Nature Chemistry*, 3:845, 2011.

- [71] Xiaofeng Qian, Junwei Liu, Liang Fu y Ju Li. Quantum spin Hall effect in two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Science*, 346:1344, 2014.
- [72] William G. Vandenberghe y Massimo V. Fischetti. Imperfect two-dimensional topological insulator field-effect transistors. *Nature Communications*, 8:14184, 2017.
- [73] James L. Collins, Anton Tadich, Weikang Wu, Lidia C. Gomes, Joao N. B. Rodrigues, Chang Liu, Jack Hellerstedt, Hyejin Ryu, Shujie Tang, Sung-Kwan Mo, Shaffique Adam, Shengyuan A. Yang, Michael S. Fuhrer y Mark T. Edmonds. Electric-field-tuned topological phase transition in ultrathin Na<sub>3</sub>Bi. *Nature*, 564:390, 2018.
- [74] Di Xiao, Wang Yao y Qian Niu. Valley-Contrasting Physics in Graphene: Magnetic Moment and Topological Transport. *Physical Review Letters*, 99:236809, 2007.
- [75] Ting Cao, Gang Wang, Wenpeng Han, Huiqi Ye, Chuanrui Zhu, Junren Shi, Qian Niu, Pingheng Tan, Enge Wang, Baoli Liu y Ji Feng. Valley-selective circular dichroism of monolayer molybdenum disulphide. *Nature Communications*, 3:887, 2012.
- [76] Edbert J. Sie, James W. McIver, Yi-Hsien Lee, Liang Fu, Jing Kong y Nuh Gedik. Valley-selective optical Stark effect in monolayer WS<sub>2</sub>. *Nature Materials*, 14:290, 2015.
- [77] Lei Zhang, Kui Gong, Jingzhe Chen, Lei Liu, Yu Zhu, Di Xiao y Hong Guo. Generation and transport of valley-polarized current in transition-metal dichalcogenides. *Physical Review B*, 90:195428, 2014.
- [78] Y. H. Wang, H. Steinberg, P. Jarillo-Herrero y N. Gedik. Observation of Floquet-Bloch States on the Surface of a Topological Insulator. *Science*, 342:453, 2013.
- [79] Fahad Mahmood, Ching-Kit Chan, Zhanybek Alpichshev, Dillon Gardner, Young Lee, Patrick A. Lee y Nuh Gedik. Selective scattering between Floquet–Bloch and Volkov states in a topological insulator. *Nature Physics*, 12:306, 2016.
- [80] H. L. Calvo, L. E. F. Foa Torres, P. M. Perez-Piskunow, C. A. Balseiro y Gonzalo Usaj. Floquet interface states in illuminated three-dimensional topological insulators. *Physical Review B*, 91:241404, 2015.
- [81] Balázs Dóra, Jérôme Cayssol, Ferenc Simon y Roderich Moessner. Optically Engineering the Topological Properties of a Spin Hall Insulator. *Physical Review Letters*, 108:056602, 2012.
- [82] V. Dal Lago, M. Atala y L. E. F. Foa Torres. Floquet topological transitions in a driven one-dimensional topological insulator. *Physical Review A*, 92:023624, 2015.
- [83] Matías Berdakin, Esteban A. Rodríguez-Mena y Luis E. F. Foa Torres. Spin-Polarized Tunable Photocurrents. *Nano Letters*, 21:3177, 2021.
- [84] Motohiko Ezawa. Monolayer Topological Insulators: Silicene, Germanene, and Stanene. *Journal of the Physical Society of Japan*, 84:121003, 2015.
- [85] J Cayssol y J N Fuchs. Topological and geometrical aspects of band theory. *Journal of Physics: Materials*, 4:034007, 2021.
- [86] Jérôme Cayssol. Introduction to Dirac materials and topological insulators. *Comptes Rendus Physique*, 14:760, 2013.

- [87] Yu A Bychkov y E I Rashba. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 17:6039, 1984.
- [88] Kazu Ghalamkari, Yuki Tatsumi y Riichiro Saito. Energy Band Gap Dependence of Valley Polarization of the Hexagonal Lattice. *Journal of the Physical Society of Japan*, 87:024710, 2018.
- [89] Kazu Ghalamkari, Yuki Tatsumi y Riichiro Saito. Perfect Circular Dichroism in the Haldane Model. *Journal of the Physical Society of Japan*, 87:063708, 2018.
- [90] A. Grüneis, R. Saito, Ge. G. Samsonidze, T. Kimura, M. A. Pimenta, A. Jorio, A. G. Souza Filho, G. Dresselhaus y M. S. Dresselhaus. Inhomogeneous optical absorption around the K point in graphite and carbon nanotubes. *Physical Review B*, 67:165402, 2003.
- [91] Andrew Zangwill. *Modern Electrodynamics*. Cambridge University Press, 2012.
- [92] R. Peierls. On the Theory of the Diamagnetism of Conduction Electrons. En *Selected Scientific Papers of Sir Rudolf Peierls*. Volumen 19, página 97. Imperial College Press y World Scientific Publishing, 1997.
- [93] Stegun I.A. Abramowitz M. *Handbook of mathematical functions*. National Bureau of Standards, 1972.
- [94] Eleftherios N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer, 3rd edición, 2006.
- [95] Daniel S. Fisher y Patrick A. Lee. Relation between conductivity and transmission matrix. *Physical Review B*, 23:6851, 1981.
- [96] M. Fruchart, P. Delplace, J. Weston, X. Waintal y D. Carpentier. Probing (topological) Floquet states through DC transport. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 75:287, 2016.
- [97] F. Guinea, C. Tejedor, F. Flores y E. Louis. Effective two-dimensional Hamiltonian at surfaces. *Physical Review B*, 28:4397, 1983.
- [98] M P Lopez Sancho, J M Lopez Sancho, J M L Sancho y J Rubio. Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 15:851, 1985.
- [99] H. M. Pastawski, J. F. Weisz y S. Albornoz. Matrix continued-fraction calculation of localization length. *Physical Review B*, 28:6896, 1983.
- [100] Jim J. Napolitano J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley, 2010.
- [101] Takuya Kitagawa, Takashi Oka, Arne Brataas, Liang Fu y Eugene Demler. Transport properties of nonequilibrium systems under the application of light: Photoinduced quantum Hall insulators without Landau levels. *Physical Review B*, 84:235108, 2011.
- [102] Alexander López, Andreas Scholz, Benjamin Santos y John Schliemann. Photoinduced pseudospin effects in silicene beyond the off-resonant condition. *Physical Review B*, 91:125105, 2015.
- [103] M. Tahir, Q. Y. Zhang y U. Schwingenschlögl. Floquet edge states in germanene nanoribbons. *Scientific Reports*, 6:31821, 2016.
- [104] S A Sato, P Tang, M A Sentef, U De Giovannini, H Hübener y A Rubio. Light-induced anomalous Hall effect in massless Dirac fermion systems and topological insulators with dissipation. *New Journal of Physics*, 21:093005, 2019.

- [105] Utkarsh Bajpai, Mark J. H. Ku y Branislav K. Nikolić. Robustness of quantized transport through edge states of finite length: Imaging current density in Floquet topological versus quantum spin and anomalous Hall insulators. *Physical Review Research*, 2:033438, 2020.
- [106] V. Dal Lago, E. Suárez Morell y L. E. F. Foa Torres. One-way transport in laser-illuminated bilayer graphene: A Floquet isolator. *Physical Review B*, 96:235409, 2017.
- [107] M. Berdakin, J. E. Barrios Vargas y L. E. F. Foa Torres. Directional control of charge and valley currents in a graphene-based device. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20:28720, 2018.
- [108] U Bajpai, B S Popescu, P Plecháč, B K Nikolić, L E F Foa Torres, H Ishizuka y N Nagaosa. Spatio-temporal dynamics of shift current quantum pumping by femtosecond light pulse. *Journal of Physics: Materials*, 2:025004, 2019.
- [109] Oleksandr Balabanov y Henrik Johannesson. Transport signatures of symmetry protection in 1D Floquet topological insulators. 32:015503, 2019.
- [110] Chris Jozwiak, Cheol-Hwan Park, Kenneth Gotlieb, Choongyu Hwang, Dung-Hai Lee, Steven G. Louie, Jonathan D. Denlinger, Costel R. Rotundu, Robert J. Birgeneau, Zahid Hussain y Alessandra Lanzara. Photoelectron spin-flipping and texture manipulation in a topological insulator. en. *Nature Physics*, 9:293, 2013.
- [111] Van Nam Do y Thanh Huy Pham. Graphene and its one-dimensional patterns: from basic properties towards applications. *Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology*, 1:033001, 2010.
- [112] A. Huamán, L. E. F. Foa Torres, C. A. Balseiro y Gonzalo Usaj. Quantum Hall edge states under periodic driving: A Floquet induced chirality switch. *Physical Review Research*, 3:013201, 2021.
- [113] Yoshinori Tokura. Photoinduced Phase Transition: A Tool for Generating a Hidden State of Matter. *Journal of the Physical Society of Japan*, 75:011001, 2006.
- [114] Esteban A. Rodríguez-Mena y L. E. F. Foa Torres. Topological signatures in quantum transport in anomalous Floquet-Anderson insulators. *Physical Review B*, 100:195429, 2019.
- [115] Sebabrata Mukherjee, Alexander Spracklen, Manuel Valiente, Erika Andersson, Patrik Öhberg, Nathan Goldman y Robert R. Thomson. Experimental observation of anomalous topological edge modes in a slowly driven photonic lattice. *Nature Communications*, 8:13918, 2017.
- [116] Lukas J. Maczewsky, Julia M. Zeuner, Stefan Nolte y Alexander Szameit. Observation of photonic anomalous Floquet topological insulators. *Nature Communications*, 8:13756, 2017.
- [117] Kun Yang Steven M. Girvin. *Modern Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 2019.
- [118] James P. Sethna. *Statistical mechanics: Entropy, Order parameters and complexity*. Oxford Master Series in Physics. Oxford University Press, USA, 2006.
- [119] N. David Mermin Neil W. Ashcroft. *Solid State Physics*. Brooks Cole, 1976.
- [120] Paraj Titum. Disorder driven transitions in non-equilibrium quantum systems:182.
- [121] P. W. Anderson. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Physical Review*, 109:1492, 1958.

- [122] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello y T. V. Ramakrishnan. Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. *Physical Review Letters*, 42:673, 1979.
- [123] D J Thouless. A relation between the density of states and range of localization for one dimensional random systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5:77, 1972.
- [124] J T Chalker y P D Coddington. Percolation, quantum tunnelling and the integer Hall effect. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 21:2665, 1988.
- [125] Mark S. Rudner, Netanel H. Lindner, Erez Berg y Michael Levin. Anomalous Edge States and the Bulk-Edge Correspondence for Periodically Driven Two-Dimensional Systems. *Physical Review X*, 3:031005, 2013.
- [126] Maia G. Vergniory, Benjamin J. Wieder, Luis Elcoro, Stuart S. P. Parkin, Claudia Felser, B. Andrei Bernevig y Nicolas Regnault. All Topological Bands of All Stoichiometric Materials. *arXiv*, 2105.09954, 2021.
- [127] Arijit Kundu, Mark Rudner, Erez Berg y Netanel H. Lindner. Quantized large-bias current in the anomalous Floquet-Anderson insulator. *Physical Review B*, 101:041403, 2020.
- [128] Hui Liu, Ion Cosma Fulga y János K. Asbóth. Anomalous levitation and annihilation in Floquet topological insulators. *Physical Review Research*, 2:022048, 2020.
- [129] János K. Asbóth y Arindam Mallick. Topological delocalization in the completely disordered two-dimensional quantum walk. *Physical Review B*, 102:224202, 2020.
- [130] B Kramer y A MacKinnon. Localization: theory and experiment. *Reports on Progress in Physics*, 56:1469, 1993.
- [131] Ferdinand Evers y Alexander D. Mirlin. Anderson transitions. *Reviews of Modern Physics*, 80:1355, 2008.
- [132] Arijit Kundu, H. A. Fertig y Babak Seradjeh. Effective Theory of Floquet Topological Transitions. *Physical Review Letters*, 113:236803, 2014.
- [133] Christoph W Groth, Michael Wimmer, Anton R Akhmerov y Xavier Waintal. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16:063065, 2014.
- [134] Zhe Zhang, Pierre Delplace y Romain Fleury. Superior robustness of anomalous non-reciprocal topological edge states. en. *Nature*, 598:293, 2021.
- [135] Achilleas Lazarides, Arnab Das y Roderich Moessner. Periodic Thermodynamics of Isolated Quantum Systems. *Physical Review Letters*, 112:150401, 2014.
- [136] Hossein Dehghani, Takashi Oka y Aditi Mitra. Dissipative Floquet topological systems. *Physical Review B*, 90:195429, 2014.
- [137] Thomas Iadecola, Titus Neupert y Claudio Chamon. Occupation of topological Floquet bands in open systems. *Physical Review B*, 91:235133, 2015.
- [138] Karthik I. Seetharam, Charles-Edouard Bardyn, Netanel H. Lindner, Mark S. Rudner y Gil Refael. Controlled Population of Floquet-Bloch States via Coupling to Bose and Fermi Baths. *Physical Review X*, 5:041050, 2015.
- [139] Fabian Teichert, Andreas Zienert, Jörg Schuster y Michael Schreiber. Improved recursive Green's function formalism for quasi one-dimensional systems with realistic defects. *Journal of Computational Physics*, 334:607, 2017.