



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTADOS TOPOLOGICOS DE ORDEN SUPERIOR  
SOBRE UNA RED DE SIERPINSKI

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A :

MARCO ANTONIO DÍAZ VILLARREAL

TUTOR

DR. JOSÉ EDUARDO BARRIOS VARGAS



CIUDAD UNIVERSITARIA, Cd. Mx., 2022

*A mis padres,  
a mi familia,  
a mis amigos.*

# Agradecimientos

Agradezco a mis padres, a mis hermanas, a mi tía y mis primos todo el apoyo incondicional, el amor y el apoyo económico otorgado, sin ellos no habría logrado sobrellevar tiempo difíciles, mis estudios. Todo lo que soy se lo debo a ellos.

Agradezco a mis profesores especialmente a mi profesor de preparatoria Juan José Borrego Cadena, que sin su soporte, guía e inspiración no habría escogido una carrera científica. También quisiera agradecer a mi asesor de tesis José Eduardo Barrios Vargas, que sin su paciencia, guía y dedicación este trabajo jamas se habría terminado.

Agradezco a mis amigos, los mejores que uno pudiera desear, que me han acompañado y soportado en los momentos mas difíciles, hemos compartido sueños y experiencias, hemos crecido juntos.

Finalmente, agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México brindarme la oportunidad de tener una educación de calidad publica y gratuita, la contrariedad de la institución en todo sus hábitos ha sido un perfecto ambiente para generar un pensamiento critico, político y científico. También agradezco al programa DGAPA-PAPIIT IA103419 CONACyT Frontera 428214 por el apoyo económico que se me otorgó durante el tiempo de realización de esta tesis.

DGAPA – PAPIIT

# Resumen

# Índice general

|  |            |
|--|------------|
| <b>Agradecimientos</b>   | <b>II</b>  |
| <b>Resumen</b>   | <b>III</b> |
| <b>1. Introducción</b>   | <b>1</b>   |
| <b>2. Marco Teórico</b>  | <b>5</b>   |
| 2.1. Modelo de enlace fuerte (TB) . . . . .  | 5          |
| 2.1.1. Ejemplo . . . . .   | 6          |
| 2.2. Modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) . . . . .                                     | 8          |
| 2.3. Invariantes topológicos (Fase de Berry) . . . . .                               | 11         |
| 2.3.1. Polarización, centros de Wannier y Fase de Berry . . . . .                    | 13         |
| 2.4. Bombeo Adiabático . . . . .   | 18         |
| 2.4.1. Modelo de Rice-Mele . . . . .   | 19         |
| 2.5. Fractales (Sierpinsky Carpet) . . . . .   | 20         |
| <b>3. Descripción del proyecto</b>   | <b>23</b>  |
| 3.1. Objetivo general . . . . .  | 23         |
| 3.2. Objetivo particular . . . . .   | 24         |
| 3.3. Detalles de la implementación . . . . .   | 24         |
| 3.3.1. Modelo BBH en una Red Cuadrada y en una alfombra de Sier-<br>pinski . . . . . | 24         |
| 3.3.2. Centros de Wannier en el espacio real . . . . .                               | 27         |

|  |           |
|--|-----------|
| <b>4. Resultados</b>   | <b>30</b> |
| 4.1. Hoti Cuadrado . . . . .   | 30        |
| 4.2. Hoti Fractal . . . . .  | 34        |
| 4.3. Bombeo en un red cuadrada y en una alfombra de Sierpinski . . . . . | 38        |
| 4.3.1. Bombeo en red Cuadrada . . . . .                                  | 41        |
| 4.3.2. Bombeo en red de Sierpinski . . . . .                             | 50        |
| <b>5. Conclusiones</b>   | <b>58</b> |
| <b>Bibliografía</b>  | <b>60</b> |

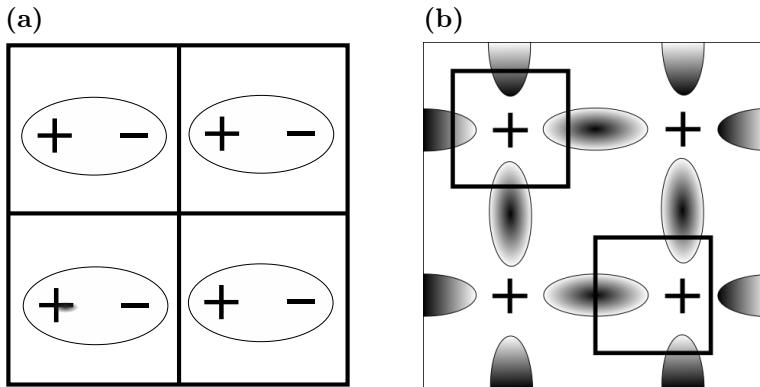
# Capítulo 1

## Introducción

La descripción del comportamiento de los electrones en el estado sólido está construido en dos pilares de la física: el electromagnetismo y la mecánica cuántica. El primero describe las fuerzas de interacción entre los entre los electrones y el núcleo, y el segundo describe los estados energéticos accesibles del sistema, ambas ramas de la física son necesarias para describir sus propiedades macroscópicas. Sin embargo las diferencias clásicas y no clásicas entre las teorías, generan detalles en las definiciones fundamentales, por ejemplo en la polarización [7].

Clásicamente la polarización es la suma de momentos dipolares en una celda dividida entre el volumen de la celda, esto considera que las contribuciones de las cargas están identificadas en localizables *centros de polarización* [Fig. 1.1 (a)]. Sin embargo esto no pasa en los sólidos reales, en estos casos, la carga eléctrica que propicia la polarización tiene una distribución de probabilidad sobre todo el material que no puede ser localizada sin ambigüedad en celdas específicas [Fig. 1.1 (b)]. Este detalle es tan significativo que puede generar diferencias de hasta un orden de magnitud entre la polarización medida y la calculada, como lo es en el caso del silicio [5].[Esta última referencia sería mejor que fuera más específica, es un dato muy puntual para mandar de referencia a un libro.](#)

Con el fin de solucionar estos problemas fue necesaria una nueva teoría que es conocida como "Teoría moderna de la polarización" o "Teoría de la fase de Berry de la polarización" introducida en 1990 por Resta, king-Smith y Vanderbilt en 1990



**Figura 1.1:** (a) Selección de celdas en la polarización clásica donde se asumen los dipolos como unidades empquetadas. (b) Selección arbitraria de celda para calcular el momento dipolar cuando la densidad electrónica esta distribuida por todo el aislante.

[Aregar referencia](#). Esta teoría propone calcular la polarización por medio de las contribuciones de las fases de la función de onda, llamada fase de Berry y da una novedosa solución a los problemas de multivaluación de la polarización en sistemas infinitos [8], las diferencias entre los cálculos teóricos y experimentales de las contribuciones de borde en la polarización en dieléctricos [5], la aparición de fases topológicas en la cadena de poliacetileno como lo es el bombeo de Thouless [Cita Thouless pump](#) y en los últimos años a permitido la clasificación de fases topológicas de orden superior, como la aparición de multipolos eléctricos cuantizados en redes cuadradas [2]. Siendo, estas ultimas dos referencias, la inspiración de este trabajo.

*Las fases topológicas en los sólidos.*— El primer ejemplo de materiales que presentan una fase topológica son los aislantes topológicos. Los aislantes topológicos o TIs (Topological Insulators) son materiales con una fase electrónica no convencional, los cuales se diferencian de los aislantes ordinarios en que aunque sus electrones no conducen en el cuerpo del material; pero, las superficies para un arreglo tridimensional o las aristas para un arreglo bidimensional mantienen estados metálicos o de conducción protegidos por una simetría de inversión del tiempo o TRS (time-reversal symmetry) [7]. La exitosa predicción estos nuevos materiales (TIs), es tal vez el triunfo mas espectacular de la teoría moderna de bandas, basada en primeros principios ([Hohenberg and Kohn 1964](#); [Kohn and Sham 1965](#)). [buscar estas citas](#)

La simetría especial que protege los estados electrónicos en los TIs genera prome-

tedoras expectativas en la creación de nuevas plataformas para el estudio de preguntas fundamentales en la ciencia, como lo son las nuevas texturas del spin y exóticos estados de superconductividad, así como la realización de dispositivos topológicos multifunciones que tienen una serie de aplicaciones en la termoeléctrica, spintrónica, procesamiento de información, etc. Además en los TIs son posibles varios fenómenos cuánticos muy exóticos, por ejemplo, los fermiones de Majorana, axiones, monopolos magnéticos, excitaciones fraccionales, que no se pueden trabajar sobre la base de los primeros principios [4].

Matemáticamente se dice dos aislantes pertenece a la misma clase topológica si y solo si sus Hamiltonianos pueden estar continuamente conectados, en el sentido de que la brecha nunca debe cerrarse en ningún punto a lo largo del camino que los conecta. Es posible hacer una analogía con la clasificación topológica de las superficies geométricas cerradas, por ejemplo, se dice que dos superficies son topológicamente equivalentes si se puede pasar de una a la otra sin ningún “evento violento” en la transformación, como abrir nuevos agujeros o cerrar los viejos. En la clasificación de estos estados encontraremos que un cristal aislante es “*trivial*” si puede ser conectado adiabáticamente sin cerrar la brecha en un límite atómico y que es *topológico* si no cumple esto.

Sin embargo, una nueva clasificación de los TIs ha aparecido en el desarrollo del estudio de los multipolos eléctricos aislantes cuantizados hecho por Benalcazar et al. [2] en el que se generaliza la relación cuerpo-frontera (bulk-boundary). En él se presentan aislantes en dos y tres dimensiones, los cuales no presentan estados sin brecha en las aristas o superficie, respectivamente, sin embargo si poseen estados sin brecha (gapless) los cuales se muestran en las esquinas del cristal, estas excitaciones topológicas en las esquinas corresponden a momentos multipolares cuantizados. La topología del cuerpo el cual contiene estados protegidos, sin brecha en las aristas o aristas y con brecha en el cuerpo y la superficie, asumen un noción de lo que es un aíslante topológico de alto orden o HOTI (High Order Topological Insulator). Un TI de n-simo orden que tiene modos protegidos sin brecha en las fronteras del material de codimensión n. Actualmente se han logrado observar estos estados en arreglos

fonónicos.

Como se puede notar, el comportamiento de un HOTI esta altamente relacionado con la dimensionalidad del volumen del cristal, perímetro y vértices, pero, ¿Qué pasaría si la dimensionalidad de este aislante no es entera, es decir, de dimensión fractal? ¿Los estados de polarización o transporte electrónico se mantendrían robustos en una dimensión fractal? Experimentalmente, los materiales con dimensiones fractales o no enteras pueden aparecer como resultado de un crecimiento fractal, límites aproximados y paredes de dominio, o la fabricación de super-redes artificiales. Recientemente han habido avances interesantes en la fabricación de materiales fractales 2D, como la fabricación de escamas de grafeno con volumen o borde fractal. Esto propicia un campo de estudio fértil sobre los estados electrónicos topológicos sobre redes fractales para futuras aplicaciones.[Aqui tu \(Eduardo\) me comentaste de este articulo pero no lo encuentro. Tambien me hace falta incluir aqui todas las referencias sobre los estudios en las redes fractales.](#)

En este trabajo, se presenta un modelo de aislante multipolo eléctrico cuantizado sobre una red fractal (alfombra Sierpinski) con un modelo de BBH, así mismo se hace una caracterización de las transiciones de fase de topológica a trivial y de trivial a topológica con un modelo de bombeo de densidad de probabilidad a través de un parámetro adiabático cíclico.

La presentación de este trabajo tendrá el siguiente orden: Primero en el **Marco Teórico** se discutirán los elementos teóricos básicos necesarios en los que se basa este estudio como el modelo de SSH, la fase de Berry, el modelo de Rice-Mele, etc. Posteriormente en la **Descripción del proyecto** se plantean los objetivos y se describen los modelos que se usaron, la construcción de la celda unitaria, los hamiltonianos de amarre fuerte y como calcular los centros de Wannier en el espacio real. Finalmente en la sección de **Resultados** se hará una comparación entre el comportamiento del hoti en la red cuadrada y la red de sierpinski, analizaremos el comportamiento del bombeo topológico de orden superior en ambas redes y como estos estados son afectados por las perturbaciones en los parámetros de salto.

# Capítulo 2

## Marco Teórico

**Resumen:** En el presente capítulo introduciremos la aproximación del Hamiltoniano de enlace fuerte. Utilizando dicha aproximación, presentaremos el modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) y describiremos la aparición de estados polarizados en dicho modelo; la aparición de dichos estados estará determinada por un invariante topológico llamado *fase de Berry*. También se discutirá el modelo de Rice-Mele que sustituye los parámetros de salto del modelo SSH por parámetros cílicos y agrega un parámetro de sitio, obteniendo estados de bombeo de carga.

### 2.1. Modelo de enlace fuerte (TB)

El modelo de enlace fuerte (TB, por sus siglas en inglés) es una aproximación semiempírica utilizada para calcular la estructura de bandas electrónica y los estados Bloch de un electrón en un cristal. La aproximación es simple y computacionalmente eficiente por lo que es común utilizarlo para hacer cálculos sobre sistemas muy grandes. El modelo, consiste en expandir los estados de un cristal en combinaciones lineales de orbitales localizados tipo atómicos; y así, en dicha base resolver la ecuación de Schrödinger.

Consideremos la ecuación de Schrödinger  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  de un cristal con un átomo en su celda unitaria, el cual podemos describir por un sólo orbital. El eigenestado de dicho cristal se puede escribir como  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\omega_i\rangle$ , donde  $\omega_i(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \omega_i \rangle$  es una función tipo orbital localizada del  $i$ -ésimo sitio tal que  $\langle \omega_i | \omega_j \rangle = 0$  con  $i \neq j$ . Los

coeficientes  $c_i$  se pueden obtener resolviendo el sistema de ecuaciones:

$$\sum_i c_i \langle \omega_i | H | \omega_j \rangle = E c_j \quad (2.1)$$

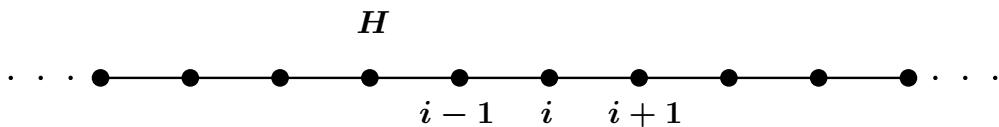
El modelo de enlace fuerte describe las propiedades de electrones fuertemente ligados a los átomos del cristal, por lo que la interacción entre átomos vecinos decae de tal manera que solo se considera la interacción a vecinos cercanos, en consecuencia  $\langle \omega_i | H | \omega_j \rangle = \gamma_{i,j}$  si  $i$  y  $j$  son átomos vecinos cercanos, donde  $\gamma_{i,j}$  se llama integral de salto o *hopping* y  $\langle \omega_i | H | \omega_j \rangle = 0$  si  $i$  y  $j$  no son vecinos cercanos. Dada la hermiticidad de la matriz el parámetro de *hopping* es igual a su complejo conjugado  $\gamma_{i,j} = \gamma_{j,i}^*$ .

Ajustamos la energía de referencia tal  $\langle \omega_j | H | \omega_j \rangle = 0$ . Entonces la ecuación (2.1) esta dada por:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} (\gamma_{i,j} - \delta_{i,j} E) c_j = 0, \quad \forall j \quad (2.2)$$

Con esto hemos convertido el problema de la solución de la ecuación de Schrödinger en un problema de eigenvalores para un matriz (ver 2.1.1 Ejemplo).

### 2.1.1. Ejemplo



**Figura 2.1:** Red cristalina unidimensional de átomos de hidrógeno

Supongamos que tenemos una red unidimensional cristalina de átomo de hidrógeno que se acomodan sobre una línea recta, como se muestra en la figura 2.1. Los traslapes de los orbitales localizados entre vecinos cercanos ayudan al electrón a deslocalizarse de un sitio a otro, saltando de un átomo a otro, este potencial de salto está dado por el potencial de traslape o *hopping* entre dos sitios, denotado por  $\gamma_{i,j}$ , para este sistema el hamiltoniano de amarre fuerte está dado por (2.3):

$$H = - \sum_i \sum_{\langle i,j \rangle} \gamma_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (2.3)$$

donde la primera suma es sobre el índice del sitio y la segunda suma es sobre los vecinos cercanos del átomo.

Dado que tenemos un sistema periódico, empezaremos escribiendo el operador de traslación  $T = |i\rangle\langle i+1|$  el cual denota la traslación del sitio  $i$  al  $i+1$ , si asumimos que los términos de *hopping* dependen únicamente de la distancia entre dos sitios, entonces,  $\gamma_{i,i+n} \equiv \gamma_n$ , entonces ahora podemos escribir el Hamiltoniano de la ecuación (2.3) en función del operador de traslación como  $H = - \sum_n \gamma_n T_n$ , notemos que ahora es posible diagonalizar el hamiltoniano en la base del operador de traslación, la cual sabemos esta compuesta por los estados de onda plana definidas como (2.4):

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} |j\rangle \quad (2.4)$$

con  $k \in \{-\pi/a, \pi/a\}$ .

Si vemos la acción del operador  $T^n$  sobre  $|k\rangle$  tenemos  $T^n|k\rangle = e^{-ikna}|k\rangle$  por lo que es posible obtener la solución al espectro de energías de la ecuación  $H(k)|k\rangle = E(k)|k\rangle$ :

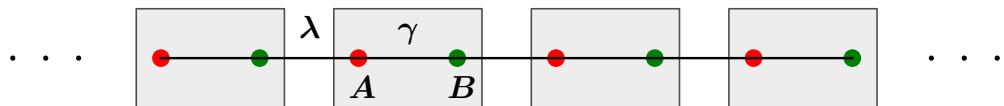
$$\begin{aligned} H(k)|k\rangle &= - \sum_n \gamma_n T_n |k\rangle = E(k)|k\rangle \\ &\rightarrow (\gamma_{j-1} e^{-ik(j-1)} + \gamma_{j-1} e^{-ik(j+1)}) |k\rangle = E(k)|k\rangle \\ &\rightarrow \gamma(e^{-ika} + e^{ika}) = E(k) \end{aligned}$$

Esto recordando que solo se toma la interacción a primeros vecinos y que  $\gamma_{j-1} = \gamma_{j+1} = \gamma$ , por lo tanto la energía estar dada por (2.5):

$$E(k) = 2\gamma \cos(ka) \quad (2.5)$$

## 2.2. Modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH)

El modelo de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) es un modelo de amarre fuerte (TB) que describe un electrón sin espín en una celda unitaria con dos sitios en un red unidimensional, un sitio etiquetado por  $A$  y otro por  $B$  [fig 2.2]. Las interacciones entre los electrones no son consideradas y la dinámica de los electrones esta descrita por el Hamiltoniano de una sola partícula (2.6).



**Figura 2.2:** Modelo SSH para una cadena de poliacetileno, con una calda unitaria conformada por dos sitios  $A$  y  $B$ , conectadas por parametros de salto intracelda ( $\gamma$ ) e intercelda ( $\lambda$ )

$$H = \gamma \sum_{i=1}^N (|i, A\rangle\langle i, B| + h.c.) + \lambda \sum_{i=1}^{N-1} (|i+1, A\rangle\langle i, B| + h.c.) \quad (2.6)$$

Donde  $|i, A\rangle$  y  $|i, B\rangle$  denotan el estado de la cadena donde el electrón se encuentra en el  $i$ -ésima celda, con  $i \in 1, 2, \dots, N$  y en el sitio  $A$  o  $B$ , respectivamente. El parametro de salto intracelda esta dado por  $\gamma$  y el intercelda por  $\gamma$ . El sumando  $h.c.$  representa el hermitiano conjugado.

La matriz del modelo SSH para una cadena con  $N = 4$  celdas unitarias en el espacio real, se ve como la ecuación (2.7).

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

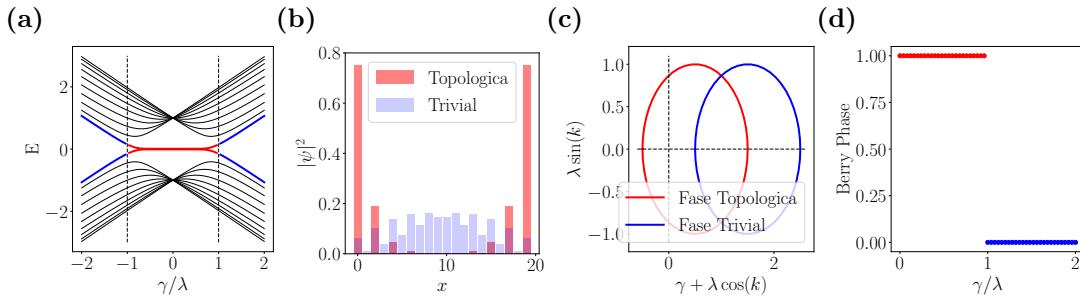
Suponiendo que nuestro sistema tiene periodicidad posicional, podemos utilizar el teorema de Bloch  $\Psi_{n,k}(\mathbf{r}) = e^{ik\mathbf{r}} u_{n,k}(\mathbf{r})$  con:

$$H(k + 2\pi) = H(k); \quad |u(k + 2\pi)\rangle = |u(k)\rangle \quad (2.8)$$

de tal forma que la ecuación de Shrödinger (2.6) definida por el hamiltoniano escrito en el espacio de momentos para el cuerpo de la cadena, esta dado por:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \gamma + \lambda e^{-ik} \\ \gamma + \lambda e^{ik} & 0 \end{pmatrix}; \quad H(k) \begin{pmatrix} a(k) \\ b(k) \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} a(k) \\ b(k) \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Esta forma simplifica mucho el calculo de los invariantes topológicos que definen los estados electrónicos de estos aislantes topológicos.



**Figura 2.3:** (a) Variación del espectro de energías conforme cambian los parámetros de salto  $\gamma/\lambda$ . (b) Proyección de la densidad de probabilidad de los estados de borde en la fase topológica (rojo) y en la fase trivial (azul). (c) Representación grafica del número de Winding con valor 1 en fase topológica (rojo) y 0 en la fase trivial (azul). (d) Fase de Berry dependiente de los parametros de salto  $\gamma/\lambda$  con valor 1 en fase topológica (rojo) y 0 en la fase trivial (azul)

Al resolver el sistema de los hamiltonianos (2.7) y (2.9) con  $N = 20$  obtenemos los resultados de la figura 2.3. En la figura 2.3 (a) tenemos el comportamiento del espectro de energías conforme los parámetros de salto cambian, las líneas negras corresponden a las energías del cuerpo o bullo de la cadena y las líneas rojas con azul muestran las energías de borde que aparecen debido a la finitud de la cadena y son las energías más cercanas a la energía de Fermi. Notemos que para los parámetros de salto  $|\gamma/\lambda| < 1$  las energías de los estados de borde se localizan en la energía de Fermi, a estos estados se le conoce como estados topológicos o fase topológica. Al proyectar la densidad de probabilidad de los estados correspondientes a estas energías en el espacio real [Fig. 2.3 (b)], obtenemos para los parámetros entre los que  $\gamma/\lambda < 1$  tenemos la densidad principalmente concentrada en los extremos del material, lo que indicaría un estado de polarización de la cadena, por otro lado, para los parámetros  $|\gamma/\lambda| > 1$  se puede ver en la proyección de los estados de borde la densidad de probabilidad está distribuida uniformemente en la cadena, como un aislante común, a este estado se le conoce como fase trivial.

Una forma de estudiar el comportamiento de los estados topológicos y triviales de esta cadena, es a través de la información que se puede obtener de la relación de dispersión.

Supongamos que el hamiltoniano de Bloch de nuestro modelo se puede escribir como una combinación lineal de las matrices de Pauli:

$$H(k) = d_0(k)\hat{\sigma}_0 + d_x(k)\hat{\sigma}_x + d_y(k)\hat{\sigma}_y + d_z(k)\hat{\sigma}_z = d_0(k)\hat{\sigma}_0 + \mathbf{d}(k)\hat{\sigma}_{\mathbf{0}} \quad (2.10)$$

En el modelo SSH, tenemos que:

$$d_0(k) = 0, \quad d_x(k) = \gamma + \lambda \cos(k), \quad d_y(k) = \lambda \sin(k), \quad d_z(k) = 0 \quad (2.11)$$

La estructura interna de los estados con momento  $k$  está dada por la dirección del vector  $\mathbf{d}(k)$ , como el número de onda  $k \in [0, 2\pi]$ , la ruta que traza  $\mathbf{d}(k)$  es un circuito cerrado de radio  $\lambda$  en el plano  $dx, dy$  y centrado en el punto  $(\gamma, 0)$ . Para que

este hamiltoniano describa un aislante es necesario que los círculos que se forman no incluyan el origen [1]. La topología de estos ciclos pueden ser caracterizados por un entero, que cuenta el número de veces que el ciclo rodea el origen, esta cantidad es conocida como el número de vueltas (Winding), que es un invariante topológico.

En el modelo SSH el número de Winding puede ser 0 o 1, dependiendo de los parámetros, como se puede ver en la figura 2.3 (c), donde se puede notar mas a detalle como los ciclos encierran o no el origen dependiendo de los parametros, cambiando las el estado del material entre topológico (rojo) y el trivial (azul). Sin embargo el número de Winding no es el único número que caracteriza la topología de la cadena de poliacetileno, en la figura 2.3 (d) se puede observar el comportamiento de la fase de Zak o fase de Berry, que es un invariante topológico que surge de la observación del cambio de fase de la funciones de bloch conforme se recorre de manera cíclica la zona de Brillouin. Este invariante describe como los estados, cuando son topológicos, ganan una fase de  $\pi$ , es decir, los estados no regresan a su estado inicial después de un ciclo. La fase de Zak como otros invariantes, es un caso particular de la fase de Berry donde el parametro ciclico es  $k$ .

### 2.3. Invariantes topológicos (Fase de Berry)

Se le llama Invariante topológico a cualquier número que caracterice a el hamiltoniano de un aislante y que no cambie a través de variaciones adiabáticas. Como consecuencia de estarán variaciones el invariante topológico cumple con dos características claves:

- Sólo está bien definido en el límite termodinámico.
- Depende de las simetrías que tenga el Hamiltoniano.

Donde se entiende por variación adiabática que los parámetros cambian de forma continua , las simetrías mas importantes del sistema se mantienen y que el gap del bullo o cuerpo de la geometría que están cerca de las energías  $E = 0$  permanezca abierto.

Existe un gran número de invariantes topológicos que caracterizan diferentes propiedades físicas de las estructuras geométricas de los materiales, por ejemplo: el número de Winding, la cantidad de estados de borde, el Willson loop, el número de Chern, etc. Siendo estos ultimos ejemplos de la fase de Berry, de la cual, hablaremos de ella para los fines de este trabajo, pues es responsable de una gran gamma de fenómenos interesantes en las propiedades de los materiales, tales como la ferroelectricidad, el magnetismo orbital, el efecto hall cuantico, el bombeo de cargas y la polarización.

En mecánica cuántica la función de onda normalmente se define con una fase que no tiene sentido físico ya que desaparece al tomar el valor de expectación. Sin embargo la fase de Berry mostró en 1984 que esta fase tiene efectos físicos observables si el sistema se transforma de manera adiabática y cíclica. En ausencia de degeneración, el sistema regresara este mismo punto al cerrar el ciclo, pero habrá una diferencia de fase igual a la integral temporal de la energía mas un termino extra que es lo que conocemos como fase de Berry.

Consideremos un sistema general descrito por el hamiltoniano  $H(\lambda)$ , donde  $\lambda$  es un conjunto de parámetros que evolucionan en el tiempo,  $\lambda = (\lambda_1(t), \lambda_2(t), \dots, \lambda_n(t))$ . Tambien introducimos una base ortonormal de estados en cada punto de  $\lambda$  del espacio,  $|u_n(\lambda(t))\rangle = |u_n(\lambda)\rangle$ , tal que:

$$H(\lambda)|u_n(\lambda)\rangle = E_n|u_n(\lambda)\rangle \quad (2.12)$$

De acuerdo con el teorema adiabático, un sistema que se encuentra inicialmente en el estado  $|u_n(\lambda_0)\rangle$  permanecerá como un eigenestado instantáneo de  $H(\lambda)$  para todo  $t$ , entonces:

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\theta_n(t)}|u_n(\lambda)\rangle \quad (2.13)$$

Introduciendo la ecuación anterior en la ecuación de Shrödinger:

$$(H(\lambda) - \partial_t)e^{i\theta_n(t)}|u_n(\lambda)\rangle = 0 \quad (2.14)$$

Desarrollando es fácil obtener la ecuación diferencial para  $\theta$ :

$$\dot{\theta} = \frac{1}{\hbar} E_n(\lambda) - i \langle u_n(\lambda) | \partial_t | u_n(\lambda) \rangle \quad (2.15)$$

La expresión final para la fase se obtiene integrando en el tiempo:

$$\theta = \frac{1}{\hbar} \int_t E_n(\lambda) d\lambda - i \int_t \langle u_n(\lambda) | \partial_t | u_n(\lambda) \rangle d\lambda \quad (2.16)$$

Notemos que el primer sumando es la fase dinámica usual, mientras el segundo término es denominado como la fase de Berry:

$$\gamma := i \int_{\lambda(0)}^{\lambda(t)} \langle u_n(\lambda) | \partial_\lambda | u_n(\lambda) \rangle d\lambda \quad (2.17)$$

Donde el término  $A_n = \langle u_n(\lambda) | \partial_\lambda | u_n(\lambda) \rangle$  es conocido como la conexión de Berry. Si usamos el Teorema de Stokes, si integramos sobre una superficie cerrada  $C$  que se puede parametrizar en el tiempo:

$$\gamma_n = \oint_C A_n \cdot d\lambda = \int_S (\nabla_\lambda \times A_n) \cdot dS_\lambda \quad (2.18)$$

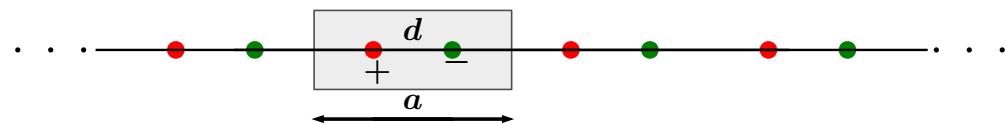
Donde al vector  $\Omega_n = \nabla_\lambda \times A_n$  se le conoce como curvatura de Berry. Se sabe que la integral de la curvatura de Berry sobre un superficie cerrada, tal como un esfera o un toro, es topológica y esta cuantizada; a estos números cuánticos topológicos se les denomina números de Chern.

### 2.3.1. Polarización, centros de Wannier y Fase de Berry

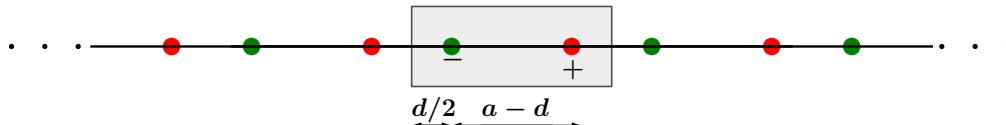
En los textos de electromagnetismo la polarización macroscópica se define como la cantidad de dipolos eléctricos por unidad de volumen, donde los dipolos son pequeñas unidades polarizadas, en la simplificación del problema se asume que la distribución

de carga entre los dipolos eléctricos es nula. Sin embargo, al estudiar la densidad electrónica de un material polarizado a través de la mecánica cuántica podremos notar que la carga no esta divida en paquetes convenientes y que la unidad de polarización no existe.

(a)



(b)



**Figura 2.4:** Red cristalina infinita periódica conformada por una molécula dicotómica anión (verde), catión (rojo), separados por una distancia (a)  $d$  o (b)  $a - d$ , dependiendo la elección de celda.

Una aparente solución podría ser contar los momentos dipolares como una integral continua sobre la densidad electrónica, sin embargo esta solución es solo aparente, pues esta cantidad depende de como se seleccione la celda sobre la cual se integra, este detalle podría darnos cantidades distintas para diferentes elecciones de celda, es decir, conocer la densidad electrónica no es información suficiente para determinar la polarización en una red aislante cristalina.

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int_{\text{cell}} \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) d^3 r \quad (2.19)$$

Por ejemplo, supongamos que tenemos una red cristalina periódica conformada por una molécula dicotómica que se repite indefinidamente formando una cadena infinita, la molécula esta formada por un anión y un catión, ambos separados a una

distancia  $d$  y la celda unitaria tiene una distancia  $a$  [Fig. 2.4 (a)]. Si calculamos la polarización con la expresión (2.19) obtendremos la ecuación (2.20).

$$P_1 = \frac{qd}{a} \quad (2.20)$$

Ahora supongamos que la selección de la celda unitaria es de la misma longitud pero con una posición diferente, como se muestra en la [Fig. 2.4 (b)], al calcular la polarización obtenemos la ecuación (2.21).

$$P_2 = \frac{qd}{a} + q \quad (2.21)$$

Si nos tomamos todas las posibles elecciones de celdas llegaremos a la conclusión de que la expresión en general de la polarización estará dada por las expresiones (2.22) y (2.23).

$$P = P_o + nq \text{ con } n \in \mathbb{Z} \text{ para el caso 1D} \quad (2.22)$$

$$P = P_o + n \frac{qR}{V} \text{ con } n \in \mathbb{Z} \text{ para el caso 3D} \quad (2.23)$$

Donde  $P_o$  es la polarización electrónica cuando se escoge convenientemente una celda centrosimétrica,  $q$  es la carga de los iones,  $R$  es la magnitud del vector de la celda y  $V$  es el volumen de la celda.

Como podemos notar, la polarización está multivaluada para diferentes elecciones de celda, donde la polarización difiere entre si en un término  $P_q = \frac{qR}{V}$  el cual es conocido como “*cuanto de polarización*”.

¿Qué significa esta cantidad? Imaginemos que en nuestro sistema se mueve un electrón de un anión de una celda a otra, ¿cómo cambia la polarización debido al transporte de carga? La respuesta es  $\Delta P = \frac{-ea}{V}$ , es decir, como consecuencia de la periodicidad del sistema, el mover un electrón de una celda a otra deja a el sistema físico exactamente igual, pero a la polarización no.

Veamos entonces un ejemplo de transporte de carga. Supongamos una evolución

adiabática en el cuerpo de un aislante cristalino, donde el cambio de la polarización estará dado por:

$$\Delta \mathbf{P} = \int_i^f \mathbf{J}(t)dt \quad (2.24)$$

Si  $\mathbf{P}$  estuviera únicamente definida para cualquier ciclo cerrado, implicaría que  $\Delta \mathbf{P} = 0$ . Ahora supongamos que tenemos una onda de densidad de carga que se desliza por un aislante cristalino uni-dimensional, el hamiltoniano de este modelo está dado por:

$$H = \frac{p^2}{2m} - V_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a} - \lambda\right) \quad (2.25)$$

Donde  $a$  es la constante de la red y  $\lambda$  es un parámetro de ciclo el cual varia con el tiempo y corre de 0 a  $2\pi$ . Supongamos que  $V_0$  es suficientemente grande para contener a una partícula semicásica con carga  $-e$  atrapada en el potencial alrededor de el mínimo del potencial ( $x = \frac{a\lambda}{2\pi}$ ). Después de un ciclo, la partícula será bombeada de tal forma que:

$$\Delta \mathbf{P}_{\text{cyc}} = \oint \mathbf{J}(t)dt = -e \quad (2.26)$$

Por lo tanto el bombeo de la carga es inconsistente con la idea de que la polarización es únicamente definida.

Ahora ¿Cómo calculamos esta diferencia de polarización para casos donde las cargas no están localizadas como sucede en los sistemas cuánticos cristalinos donde la carga esta distribuida por todo el cristal? Primero debemos notar que la contribución de los electrones a la polarización es una propiedades del estado electrónico de varios cuerpos, la idea central para contestar esta pregunta es escribir estos estados electrónicos de varios cuerpos usando una base ortonormal de estados localizados que nos permitan tener una visualización tipo átomo de la densidad electrónica, que comúnmente es una función continua en todo el espacio, esta descripción nos permitirá seguir sumando los momentos dipolares como cargas multiplicadas por sus posiciones. La base de estados que permitirá todo esto es conocida estados de Wannier. La con-

tribución de cada electrón en un estado Wannier al centro de carga puede evaluarse fácilmente y luego sumarse.

Las funciones de Wannier  $w_n(\mathbf{r})$  de la  $n$ -ésima banda, en la celda unitaria asociada a  $\mathbf{R}$ , están definidas como:

$$\begin{aligned} w_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.27)$$

A diferencia de las funciones de Bloch que están deslocalizadas en el espacio las funciones de Wannier si están localizadas. Están son relevantes para este problema porque la naturaleza de la localización proporciona una conveniente descripción de la densidad de carga en un sólido. Si bien sabemos en realidad de que la densidad de carga en un sólido es una función continua, la idea de que esta puede estar localizada nos permitirá continuar calculando los momentos dipolares sumando sobre cargas multiplicadas por posiciones (Ahora tenemos una manera conveniente de tomar las celdas que permitan esto). Para esto primero suponemos que la concentración de electrones está alrededor de la función de Wannier, a esta "posición" de la función de wannier se les llama "Centros de Wannier",  $\bar{\mathbf{r}}$  y se calcula como el valor esperado de la posición:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{r}} &= \langle w_n | \mathbf{r} | w_n \rangle \\ &= \int w_n^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} w_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Además, la ecuación (2.28) se puede escribir en términos de las funciones periódicas  $u_{n\mathbf{k}}$  y usando al operador posición en la representación de momentos  $\mathbf{r} = -i\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}}$ :

$$\bar{\mathbf{r}} = i \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial\mathbf{k}} \rangle \quad (2.29)$$

Con el concepto de los centros de Wannier, ahora, la expresión para la polarización se puede escribir como las contribuciones de los iones (ya antes localizados) y las contribuciones debido a las cargas electrónicas centradas, ahora, en los centros de

Wannier, para cada banda ocupada.

$$p = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \left( \sum_i (q_i x_i)^{\text{ions}} + \sum_n^{\text{occ}} (q_n \bar{\mathbf{r}})^{WF} \right) \quad (2.30)$$

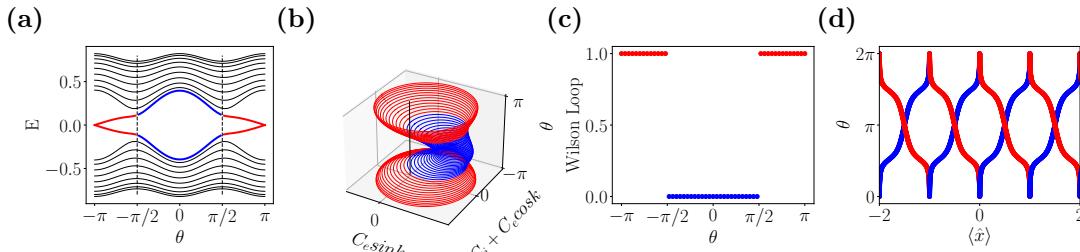
Es importante recalcar que el segundo termino en la polarización es mejor conocido como como la fase de Berry:

$$\sum_n^{\text{occ}} \int_{BZ} d^3\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle u_{n\mathbf{k}} | \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \rangle \quad (2.31)$$

Está cantidad será la central en el cálculo de invariantes topológicos en estados de polarización que definen a un aislante topológico de alto orden.

## 2.4. Bombeo Adiabático

Una de las aplicaciones mas interesantes de la fase de Berry es demostrar que el cambio lento de los parámetros temporales en un sólido 1-dimensional puede generar transporte o bombeo de cargas después de recorrer un ciclo.



**Figura 2.5:** (a) Variación del espectro de energías conforme cambia el parámetro cíclico  $\theta$ . (b) Representación gráfica del número de Winding en la fase topológica (rojo) y en la fase trivial (azul). (c) Fase de Berry dependiente de los parámetros de salto  $\gamma/\lambda$  con valor 1 en fase topológica (rojo) y 0 en la fase trivial (azul). (d) cambio del valor esperado o centros de wannier conforme varía el parámetro cíclico.

Recordemos que en el caso del modelo de SSH anterior teníamos parámetros que al variar mostraban cambios en los estados de la geometría estudiada, una forma de poder analizar como suceden estas transiciones de fase es a través del bombeo adiabático, haciendo variar los parámetros de salto del hamiltoniano por medio de un parámetro adiabático y cíclico.

### 2.4.1. Modelo de Rice-Mele

Consideremos el hamiltoniano de SSH del modelo anterior, con una pequeña modificación, los parámetros de salto variarán en el tiempo a través de un parámetro cíclico  $\theta \in [0, 2\pi]$  y agregaremos un término de sitio que nos permitirá suavizar los estados de transición:

$$\begin{aligned} \gamma &\rightarrow \gamma(\theta) = \gamma_0 e^{-\beta(1 - A \cos \theta)}, \quad \lambda \rightarrow \lambda(\theta) = \lambda_0 e^{-\beta(1 + A \cos \theta)}, \\ \epsilon(\theta) &= \epsilon_0 \sin \theta \end{aligned} \quad (2.32)$$

Con  $\epsilon_0$  suficientemente pequeño.

De tal forma que el nuevo modelo estará descrito por el siguiente hamiltoniano de Bloch:

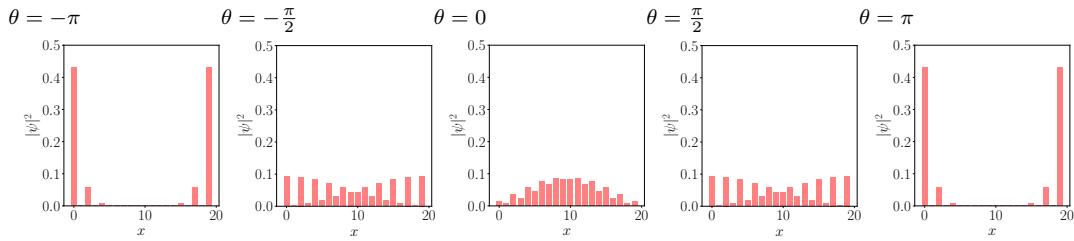
$$H_k(\theta) = \begin{pmatrix} \epsilon(\theta) & \gamma(\theta) + \lambda(\theta)e^{-ik} \\ \gamma(\theta) + \lambda(\theta)e^{ik} & -\epsilon(\theta) \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

Y el hamiltoniano en el espacio real, para una cadena con 4 celdas unitarias:

$$H(\theta) = \begin{pmatrix} \epsilon(\theta) & \gamma(\theta) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma(\theta) & -\epsilon(\theta) & \lambda(\theta) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda(\theta) & \epsilon(\theta) & \gamma(\theta) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma(\theta) & -\epsilon(\theta) & \lambda(\theta) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda(\theta) & \epsilon(\theta) & \gamma(\theta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma(\theta) & -\epsilon(\theta) & \lambda(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda(\theta) & \epsilon(\theta) & \gamma(\theta) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma(\theta) & -\epsilon(\theta) \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

En la figura 2.5 (a), (b) y (c) se pueden observar diferentes formas de observar la transición de fase entre una fase topológica y una trivial. En la figura 2.5 (a) se puede ver como en el espectro de bandas, el comportamiento de las energías de los estados de borde, cambian de tener un gap amplio, es decir una fase trivial, a tener una brecha energética nula o una fase topológica, podemos seguir este cambio a través

del número de Winding, como se observa en la figura 2.5 (b) los círculos que forman la relación de dispersión pasan de rodear el origen a no hacerlo. En la figura 2.5 (c) se puede observar un cambio mas abrupto en la transición de fase no trivial, pues este caracteriza la fase que la ecuación de onda gana cuando se recorre un ciclo por la zona de Brillouin, esto determina que hay valores en la variación temporal en los que el material ganara una fase y hay otros en los que no. Por último, si nuestro material gana una fase y transiciona de estado a estado después de en un ciclo, ¿Existe un cambio en él? La respuesta es si, a pesar de que el hamiltoniano del material no haya cambiado después de el ciclo, los eigenestados si cambiaron y esto se ve reflejado en un bombeo de cargar a través de la cadena.

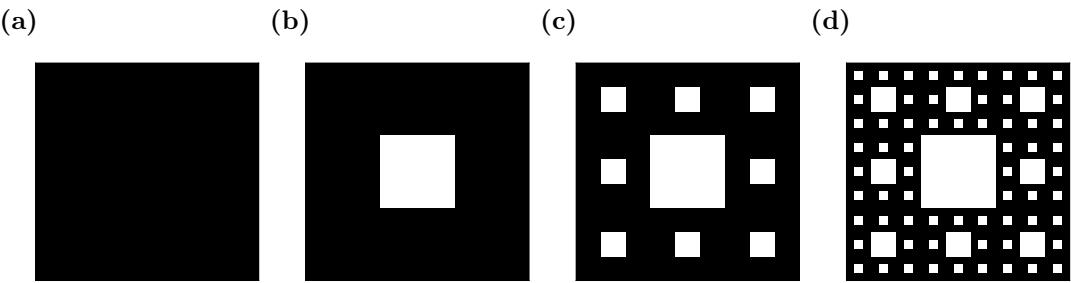


**Figura 2.6:** Proyección de los estados correspondientes a las energías negativas mas cercanas a los estados de Fermi para distintos valores de  $\theta \in [-\pi, \pi]$ .

Una forma de estudiar esta cuestión es a través de hacer un seguimiento de los centros de wannier de cada celda, si existe un desplazamiento de este centro de celda a celda, la fase que gana nuestro sistema después de un ciclo, se puede interpretar como el desplazamiento de cargas de una celda a otra lo que denotaría que existe un bombeo y como vimos en el capítulo anterior, la corriente generada por este bombeo propicia un estado de polarización en el material, el cual se puede observar cuando proyectamos los estados de las energías mas cercanas a la energía de Fermi del Rice-Mele [Fig. 2.5 (a)] en el espacio real [Fig. 2.6].

## 2.5. Fractales (Sierpinsky Carpet)

Hemos observado que las propiedades electrónicas de los materiales que estudiamos depende casi totalmente de las propiedades geométricas que lo definen. La relaciones y la separación entre los estados de borde y de bulto, permiten construir estados de



**Figura 2.7:** Procedimiento para generar una red o alfombra de Sierpinski, conforme aumentan las iteraciones, (a)  $n = 0$ , (b)  $n = 1$ , (c)  $n = 2$ , (d)  $n = 3$ .

polarización así como hacer un seguimiento del bombeo de las cargas en parámetros cíclicos. Pero, que pasaría si las geometrías de los materiales, tienen mas de un borde o la idea de la relación cuerpo-borde o área y perímetro se pierden?

Una de las geometrías más interesantes que cumplen estas características son las fractales, construcciones geométricas que se basan en la realización iterativa y poseen propiedades como la dimensión no entera, y la autosemejanza. Para los fines de este trabajo nos concentraremos en la alfombra de Sierpinski, el cual es un fractal descrito por el matemático polaco Waclaw Sierpinski en 1916. Se construye dividiendo un cuadrado en otros nueve de lado  $1/3$  del original y eliminando el cuadrado que ocupa la posición central, repitiendo este proceso en cada uno de los cuadrados que quedan, indefinidamente.

En cada iteración el numero de huecos cuadrados va aumentando de la siguiente manera (fig 2.7):

$$1, 8, 8^2, \dots 8^n \quad (2.35)$$

respectivamente, cada lado del cuadrado escala como un tercio del anterior:

$$1, \frac{1}{3}, \left(\frac{1}{3}\right)^2, \dots \left(\frac{1}{3}\right)^n \quad (2.36)$$

como resultado se obtiene así un objeto geométrico “hueco” de área nula pero con perímetro infinito. Al calcular su dimensión obtenemos:

$$D = \frac{\log N(r)}{\log 1/r} = \frac{\log 8^n}{\log 3^n} = 1.8927 \quad (2.37)$$

Donde  $N(r)$  es el número de figuras que se generan por iteración y  $r$  es la relación de escala de cada lado por cada iteración.

Los fractales considerados en este trabajo están definidos en un número finito de iteraciones, además que en la construcción, como se vera en el próximo capítulo, el tamaño de las figuras que conforman el fractal crecen como múltiplos de la celda unitaria, por lo cual no hay una dilución del área solo existe respecto al tamaño final, esto implica que en este trabajo que los fractales considerados en este trabajo sean fractales aproximados.

# Capítulo 3

## Descripción del proyecto

Los aislantes topológicos están definidos por su relación bulto-frontera. Si un sistema de dimensión  $d$  presenta estados con gap en el bulto y además presenta estados robustos ante perturbaciones sin gap en la frontera, se dice que este sistema es un aislante topológico. Sin embargo esta clasificación fue enriquecida con una subclasi-  
fication introducida por Benalcazar at. all [2] debido a sistemas que presentan estados sin gap en las aristas y los vértices, a esta subclasi-  
fication se le conoce como aislantes topológicos de orden superior (HOTI). Un aislante topológico de orden  $n$ -ésimo tiene estados protegidos sin gap en una frontera del sistema de codimensión  $n$  [6]. Esta tesis se enfoca en extender la aparición de HOTI en redes fractales con dimensión de Housdorff fraccional, donde la relación de bulto y fronteras se desdibuja. Esto se logró tomando el modelo utilizado por Benalcazar at. all en una red cuadrada y aplicarlo una red de Sierpinsk.

### 3.1. Objetivo general

El objetivo de la tesis es extender la clasificación de aislantes topológicos de orden superior a redes de dimensión fractal, como lo es una red Sierpisnki cuadrada. También hacer un estudio que compare el comportamiento de las propiedades electrónicas de estados topológicos y no topológicos y su transición entre las redes cuadradas y redes de Sierpinsk con los modelo Benalcazel, Bernevig, Taylor (BBT).

Particularmente, en los sistemas de geometría 2-dimensional se ha observado que al tener una transición adiabática de fase topológica a trivial y de trivial a topológica puede generar un bombeo de carga (Thouless pump [3]) generado por el flujo de los centros de Wannier. Debido a esto centramos nuestra atención en determinar si los HOTIs fractales también pueden presentar bombeo de carga utilizando un modelo 2-dimensional inspirado en el modelo Rice-Mele.

## 3.2. Objetivo particular

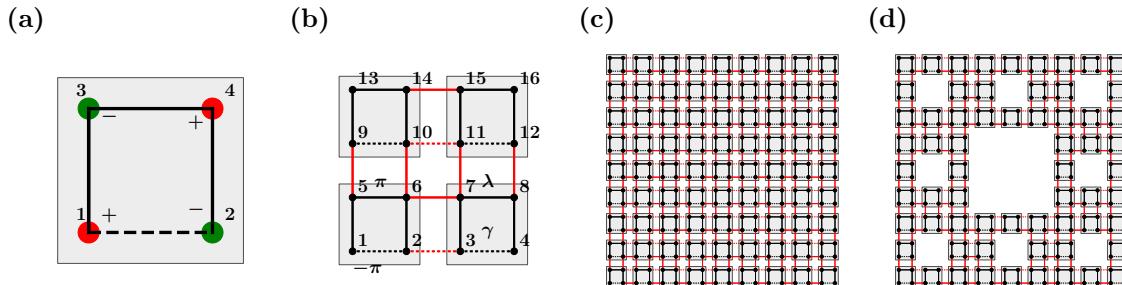
- Observar estados topológicos de orden superior en la red de Sierpinski y una red cristalina cuadrada.
- Caracterizar el cambio de la densidad (electrónica) de probabilidad en una transición de fase topológica a trivial.
- Generar un espacio fase de la corriente como función de los parámetros  $\gamma, \lambda$ , con el fin de determinar cuándo el flujo de densidad de corriente será máximo.
- Determinar para qué variación de parámetros existe bombeo de densidad de probabilidad en la red cristalina cuadrada y fractal.

## 3.3. Detalles de la implementación

### 3.3.1. Modelo BBH en una Red Cuadrada y en una alfombra de Sierpinski

Notemos que la idea del modelo de SSH se puede extender de manera sencilla, en algunos casos de 2 dimensiones, como lo es para una red cristalina cuadrada. Supongamos que tenemos una red cristalina cuadrada con 16 sitios y 4 redes unitarias (fig 3.1 (b)) o celdas unitarias, cada una compuesta por 4 sitios como se ve en la (fig 3.1 (a)), con  $\gamma$  y  $\lambda$  los parámetros de salto, intracelda e intercelda, respectivamente, con la particularidad de que cada que se pasa por la linea punteada el parametro de salta

gana una fase de  $-\pi$ , por lo que nuestro sistema estaría compuesto, en las secciones horizontales, por cadenas de SSH en dirección positiva y dirección negativa intercaladas, y en la sección horizontal en la figura siguiendo el modelo de SSH el hamiltoniano de este sistema estará dado la matriz de conexión definida como la ecuación 3.3.1



**Figura 3.1:** (a) Celda unitaria de 4 sitios. (b) Red cristalina cuadrada de 4 celdas con 16 sitios. (c) Red cristalina cuadara conformada por 9x9 celdas y 18x18 sitios. (d) Red fractal conformada por 72 celdas y 288 sitios.

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\gamma & 0 & -\lambda & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 & \gamma & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 & \gamma & 0 & \lambda & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & \lambda & 0 & \gamma & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 & -\gamma & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & -\gamma & 0 & -\lambda & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & -\lambda & 0 & -\gamma & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 & -\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 & \gamma & 0 & 0 & \gamma & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Como podemos notar, las matrices que describen a estos sistemas son matrices

de conexión por lo tanto es una matriz simétrica, de igual forma que en el caso unidimensional, es posible suponer condiciones periódicas a las frontera y obtener la matriz expresada en el espacio de momentos (eq.3.4).

$$\begin{aligned} H(k_x, k_y) = & \gamma[\sigma_0 \otimes \tau_x - \sigma_x \otimes \tau_z] \\ & - \lambda \cos k_x [\sigma_x \otimes \tau_z] + \lambda \cos k_y [\sigma_0 \otimes \tau_x] \\ & - \lambda \sin k_x [\sigma_y \otimes \tau_z] + \lambda \sin k_y [\sigma_0 \otimes \tau_z] \end{aligned} \quad (3.2)$$

Donde  $k_x$  y  $k_y$  son las proyecciones del vector  $\mathbf{k}$  de momentos sobre las direcciones  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{y}$ , es decir,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  y donde  $\sigma_\mu$ ,  $\tau_\mu$  son las matrices de Pauli de  $2 \times 2$  y el operador  $\otimes$  funciona como:

$$\sigma_0 \otimes \tau_x = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Dando como resultado (3.4) el modelo que es conocido como modelo BBH (Benalcazar, Bernevig y Hughes).

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma - \lambda e^{-ik_x} & \gamma + \lambda e^{-ik_y} & 0 \\ -\gamma - \lambda e^{ik_x} & 0 & 0 & \gamma + \lambda e^{-ik_y} \\ \gamma + \lambda e^{ik_y} & 0 & 0 & \gamma + \lambda e^{-ik_x} \\ 0 & \gamma + \lambda e^{ik_y} & \gamma + \lambda e^{ik_x} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Ahora ¿Cómo implementamos la idea del HOTI cuadrado con el modelo de BBH en nuestra en una alfombra de Sierpinski? Una de las primeras cosas es notar como es el proceso iterativo de la construcción de una alfombra de Sierpinski, este proceso se describe la sección 2.5, para esta construcción se comenzó con un red cristalina cuadrada inicial compuesta por 9 celdas unitarias y 36 sitios, a este cuadrado se le

extrae la celda unitaria del centro, obteniendo una red como la de la figura 2.7 (b), esta idea sea itera  $N = 2$  veces obteniendo la red fractal que esperamos (fig. 2.7 (c) y fig. 3.1 (d)), a diferencia del escalamiento que se observa en la construcción común de un fractal (fig. 3.1), para mantener las celdas con el mismo tamaño es necesario hacer el sistema cada vez mas grande.

El hamiltoniano que describe a este sistema estará dado por la matriz de conexión, sin embargo, dado que este sistema no tiene simetría traslación sobre la celda unitaria no es posible tener un hamiltoniano de Bloch que nos permita encontrar la solución en el espacio reciproco y así estudiar las propiedades electrónicas de las que nos podría proveer la teoría de bandas.

Debido a las limitantes computacionales el estudio de este sistema se fijo en la segunda iteración ( $N = 2$ ) en la construcción del la alfombra de Sierpinski con 72 celdas y 288 sitios y el modelo de la red cuadrada se limito a un cuadrado compuesto por 81 celdas y 324 sitios.

### 3.3.2. Centros de Wannier en el espacio real

Uno de los problemas principales al momento de calcular las cantidades topológicas como la fase de Berry en estructuras geométricas como los fractales es la falta de periodicidad en el sistema, lo cual no permite tener un hamiltoniano de Bloch que nos permita usar las expresiones 2.31 para calcular la fase de Berry. Afortunadamente existen otras formas de construir este invariante sin necesidad de usar funciones de Bloch, y es a través del operador de posición, este nos permite extraer los centros de Wannier como eigenvalores de una cantidad llamada Wilson loop, esta forma es numéricamente estable y además es invariante de norma [1].

Consideremos una cadena con  $N$  elementos y largo  $L$  con condiciones periódicas a la frontera, su operador de posición unitario estará dado por:

$$\hat{X} = e^{i\delta_k \hat{x}} \quad (3.5)$$

Con  $\delta_k = L/N$ . El valor esperado de la posición asociado al estado  $|\psi\rangle$  se calculara

como:

$$\langle \hat{X} \rangle = \frac{N}{2\pi} \arg \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle \quad (3.6)$$

Para poder calcular los centros de Wannier restringiremos el operador de posición únicamente a las bandas llenas:

$$\hat{X}_P = \hat{P} \hat{X} \hat{P} \quad (3.7)$$

Con  $\hat{P} = \sum_{m=1}^{N_{occ}} \sum_k |\psi_{m,k}\rangle \langle \psi_{m,k}|$ , para simplificar el operador  $\hat{X}_P$  consideremos:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{m',k'} | \hat{X} | \psi_{m,k} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{m'} e^{-im'k'} \langle u_{m'}^{k'} | \sum_m e^{im\delta_k} e^{imk} | u_m^k \rangle \\ &= \frac{1}{N} \langle u_m^{k'} | u_m^k \rangle \sum_m e^{-im(k+\delta_k-k')} \\ &= \delta_{k+\delta_k, k'} \frac{1}{N} \langle u_m^{k+\delta_k} | u_m^k \rangle \end{aligned} \quad (3.8)$$

Donde  $\delta_{k+\delta_k, k'}$  sera 1 cuando  $k' = \delta_k + k$  y 0 en cualquier otro caso, usando esto obtenemos:

$$\begin{aligned} \hat{X}_P &= \sum_{m,m'=1}^{N_{occ}} \sum_{k,k'} |\psi_{m',k'}\rangle \langle \psi_{m',k'} | \hat{X} | \psi_{m,k} \rangle \langle \psi_{m,k}| \\ &= \sum_{m,n=1}^{N_{occ}} \sum_k |\psi_{n,k+\delta_k}\rangle \langle u_n^{k+\delta_k} | u_m^k \rangle \langle \psi_{m,k}| \end{aligned} \quad (3.9)$$

Podemos resolver la  $N$ -sima potencia de este sistema como un sistema de eigenvalores sobre el  $m$ -simo sitio ocupado:

$$(\hat{X}_P)^N |\nu^m\rangle = W |\nu^m\rangle \quad (3.10)$$

Al termino de la derecha se le conoce como la linea de Wilson sobre un parametro ciclico, donde los elementos de matriz están conformados por las fases de Berry discretas sobre  $k$ :

$$W_{i,j} = \delta_{i,j} \langle u_m^{k+\delta_k} | u_m^k \rangle \langle u_m^k | u_m^{k-\delta_k} \rangle \dots \langle u_m^{k+2\pi-\delta_k} | u_m^{k-2\pi} \rangle \quad (3.11)$$

Donde  $\delta_{i,j}$  es 1 cuando  $i = j + 1$  y 0 en otros casos. Con esto es posible determinar los centros de Wannier que estarán dados por los eigenvalores de la siguiente ecuacion ()

$$W|\nu^m\rangle = (E^m)^N|\nu^m\rangle \quad (3.12)$$

suponiendo que el Willson loop es un operador unitario, el problema se convierte en un problemas de fases ():

$$(E^m)^N|\nu^m\rangle = e^{i2\pi\nu^m}|\nu^m\rangle \quad (3.13)$$

Obteniendo como resultado final, la expresión de los centros de wanier asociados a la  $m$ -sima banda ocupada, en función del operador posición y el operador de proyección:

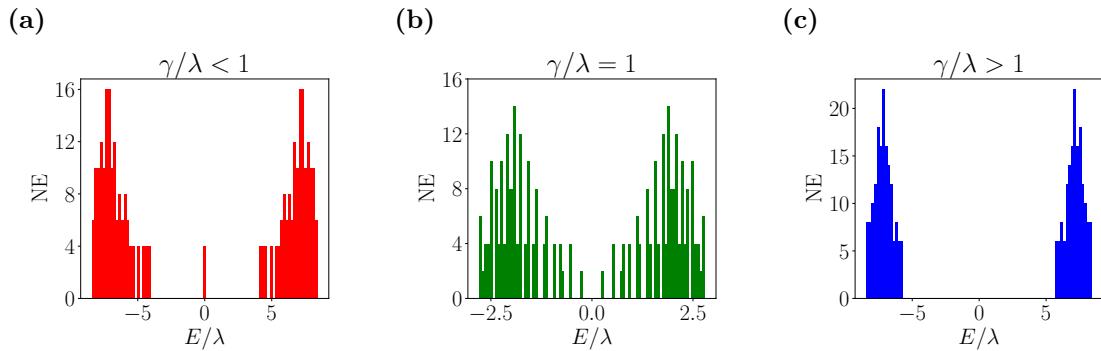
$$\nu^m = \frac{N}{2\pi} \arg \hat{X}_P \quad (3.14)$$

# Capítulo 4

## Resultados

**Resumen:** Resumen de resultados.

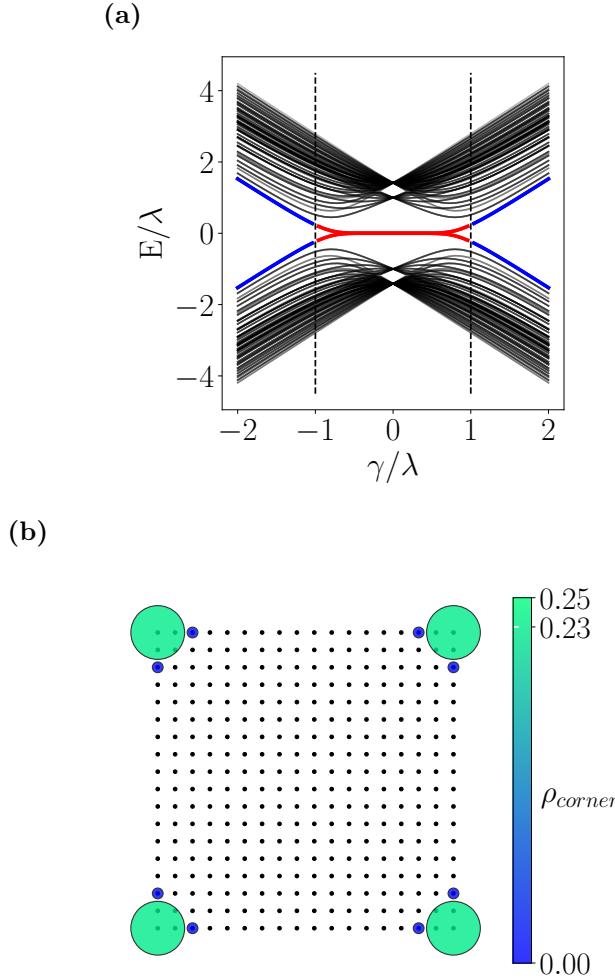
### 4.1. Hoti Cuadrado



**Figura 4.1:** Número de estados por energía en un red con geometría cuadrada para diferentes valores de los parámetros de salto, (a)  $\gamma/\lambda = 1/2$ , (b)  $\gamma/\lambda = 1$ , (c)  $\gamma/\lambda = 2$ .

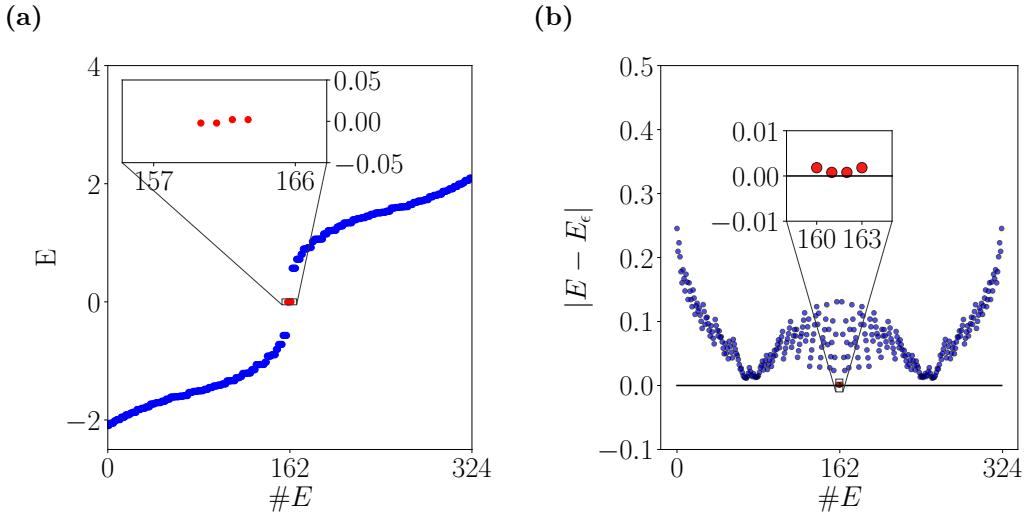
En la figura 4.1 podemos ver el comportamiento del número de estados por energía para diferentes valores de  $\gamma/\lambda$  y para el modelo de BBH para una red cristalina cuadrada [sec.3.3.1]. Notemos que para los valores de  $\gamma/\lambda > 1$  [Fig.4.1 (c)] podemos ver un claro gap energético, lo cual indicaría que nuestra red cristalina se encuentra en un estado trivial, es decir, es un aislante común. Para los valores de  $\gamma/\lambda < 1$  [Fig. 4.1 (a)] aparecen 4 estados degenerados carentes de gap en la energía de Fermi, estos aparecen como consecuencia de la finitud de la red cristalina por lo que les llamaremos estados de borde, esta fase del la red es conocida como fase topológica. En la figura

4.1 (c) para  $\gamma/\lambda = 1$  vemos que el gap energético de la red cristalina se cierra, lo cual indica la posible transición de fase entre el estado topológico y trivial con la variación de los parámetros de salto  $\gamma/\lambda$  de la red cristalina.



**Figura 4.2:** (a) Espectro de energía del sistema con geometría cuadrada y condiciones abiertas a la frontera, como función de  $\gamma/\lambda$ . Las energías de borde coloreadas en Azul-Rojo corresponden a los 4 estados localizados en las esquinas. (b) Densidad de probabilidad en un fase no trivial donde  $\gamma = 0.5$ ,  $\lambda = 1$ , en un red cuadrada de  $18 \times 18$  sitios.

Para ver más a detalle como sucede esta transición de fase podemos hacer un seguimiento del espectro de energías conforme se varían los parámetros de salto y enfocarnos en las energías centrales correspondientes a los estados de borde [Fig.4.2 (a)]. Las energías de los estados de borde están coloreadas con azul en la zona trivial y rojo en la zona topológica, en la zona  $|\gamma/\lambda| > 1$  el comportamiento de estas energías es similar a las energías de los estados del bullo de la red cristalna, sin embargo, en la zona  $|\gamma/\lambda| > 1$  las energías centrales se separan del bullo y se degeneran en la energía



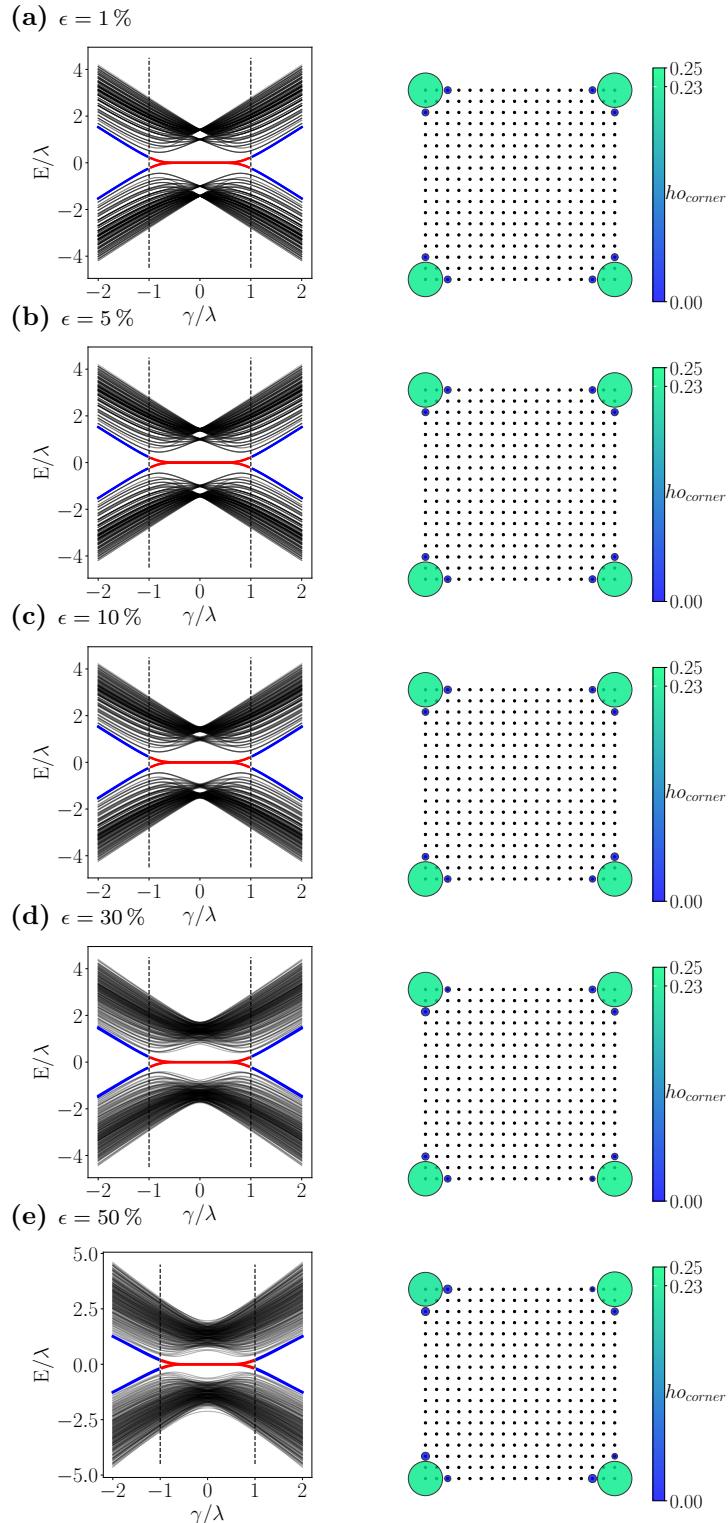
**Figura 4.3:** (a) Espectro de energias ordenadas para la red cristalina cuadrada con  $\gamma = 0.5$  y  $\lambda = 1.0$ . (b) Cambio del espectro de energias cuando se perturban los parametros de salto con  $\epsilon = 50\%$ .

de Fermi. Al proyectar las densidades de probabilidad de los estados correspondientes a estas 4 energías podemos observar como se distibuyen estas densidades por la red, en la figura 4.2 (b) podemos ver que las densidades se encuentran claramente localizadas en las esquinas de la red con probabilidad de aproximadamente  $1/4$ , lo cual definiría a nuestra red cirstalina como un aislante topológico de orden superior (HOTI <sup>1</sup>), donde el valor máximo de  $\rho_{corner} = 1/4$  se alcanza en el caso limite  $|\gamma/\lambda| = 0$  donde las celdas estarían totalmente cuatrimerizadas.

También estos estados son robustos ante perturbaciones adiabáticas como se puede observar en las figuras 4.8 (a)-(e) donde las perturbaciones se ejercieron sobre los parámetros de salto  $\gamma' = \gamma(1 \pm \epsilon)$ ,  $\lambda' = \lambda(1 \pm \epsilon)$  con  $\epsilon = [1\%, 5\%, 10\%, 30\%, 50\%,]$ , se puede notar que estas variaciones solo cambian las energías correspondientes a los estados del bullo [Fig.4.3 (b)], mientras los estados de borde que permanecen robustos con  $|E - E_{\epsilon=50\%}| < 10^{-3}$ . Esta robustez se ve reflejada en que los estados de borde que se localizan en las esquinas permanecen imperturbables.

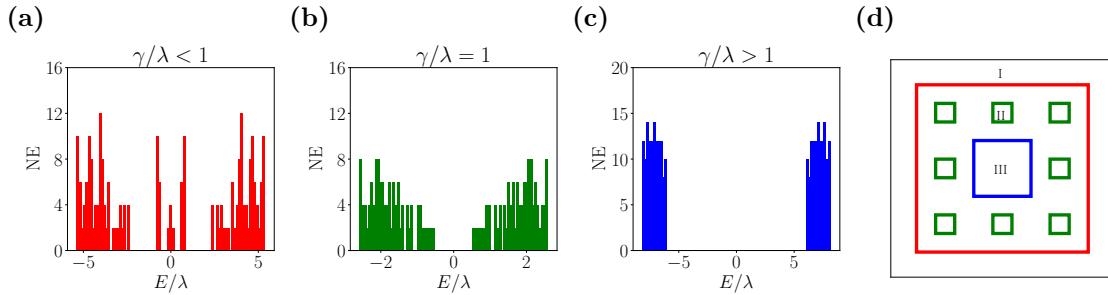
---

<sup>1</sup>Siglas en ingles de High Order Topological Insulator



**Figura 4.4:** (a)-(e) En la columna derecha se muestra el espectro de energías en una red cuadrada como función de  $\gamma/\lambda$  con un desorden aleatorio en los parámetros de salto, de tamaño  $\delta$ . Las líneas rojas corresponden a los cuatro estados degenerados que representan los estados localizados en las esquinas. En la columna izquierda se muestra la densidad de probabilidad de la fase no trivial donde  $\gamma' = \gamma(1 \pm \epsilon)$ ,  $\lambda' = \lambda(1 \pm \epsilon)$ .

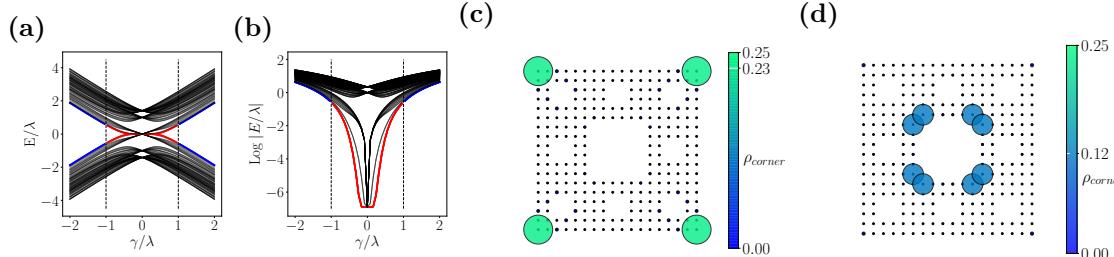
## 4.2. Hoti Fractal



**Figura 4.5:** Cantidad de estados por energía en un red con geometría Fractal (2da generación) para diferentes valores de los parámetros de salto, (a)  $\gamma/\lambda = 1/2$ , (b)  $\gamma/\lambda = 1$ , (c)  $\gamma/\lambda = 2$ . (d) Bordes de la red Fractal de Sierpinski de 2da generación.

En la figura 4.5 observamos el número de estados por energía para el modelo de la red de Sierpinski para distintos valores de los parámetros de salto  $\gamma/\lambda$ . Para valores de  $\gamma/\lambda < 1$  seguimos teniendo una la diferenciación de los estados de borde y de bullo al igual que 4 estados centrales, sin embargo, a diferencia de el caso de la red cuadrada, estos estados se degeneran sobre la energía de Fermi para valores mas cercanos a esta  $\gamma/\lambda < 0.5$ , estos estados aparecen acompañados por otras energias tambien cercanas a la energía de Fermi, estas corresponden a los nuevos estados de borde consecuentes con la geometría de la red de Sierpinski. También podemos ver que para valores  $\gamma/\lambda > 1$ , al igual que en la red cuadrada, tenemos un histograma correspondiente a una fase trivial, en medio de esta transición tenemos  $\gamma/\lambda = 1$  donde se puede ver como la brecha de las energías comienzan a cerrarce, esto se puede ver más a detalle en las figura 4.6 (a), donde se puede apreciar el cambio del espectro de las energías conforme se varían los parámetros de salto, en esta figura podemos notar como a partir de estos valores de  $\gamma/\lambda = 1$  se comienza a diferenciar el comportamiento de borde del comportamiento de bullo. Notemos que las energías correspondiente a los estados de borde se comienzan a cerrar hasta degenerarse todas en la energía de fermi cuando  $\gamma/\lambda = 0$  [Fig. 4.6 (b)], es decir, cuando las celdas están totalmente cuatrimerizadas, para evitar este caso es necesario que la elección de los 4 estados centrales correspondientes a la acumulación de la densidad de estados en las esquinas se sintonice en puntos de  $\gamma/\lambda \in [0.5, 0)$  [fig. 4.6 (c)]. Conforme nos acerquemos al caso limite de  $\gamma/\lambda = 0$  la densidad de de probabilidad acumulada en las esquinas

también cumple que  $\rho_{corner} \approx 1/4$ .

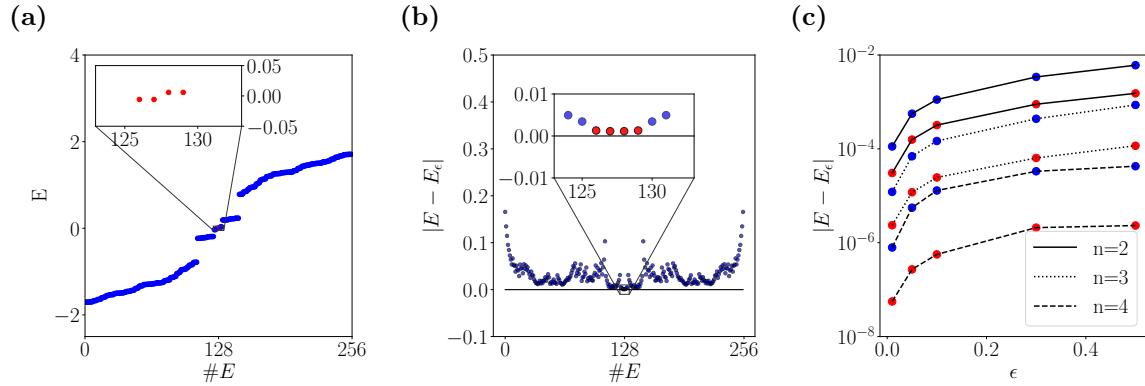


**Figura 4.6:** (a) Espectro de energía del sistema con geometría fractal y condiciones abiertas a la frontera, como función de  $\gamma/\lambda$ . (b) Espectro de energía en escala logarítmica del sistema antes mencionado. Las líneas rojas corresponden a los cuatro estados degenerados que representan los estados localizados en las esquinas. (c) Densidad de probabilidad en un fase no trivial donde  $\gamma = 1$ ,  $\lambda = 4.5$ , en un red fractal de 2da generación correspondientes a los estados de borde I. (d) Densidad de probabilidad en un fase no trivial donde  $\gamma = 1$ ,  $\lambda = 4.5$ , en un red fractal de 2da generación correspondientes a los estados de borde III.

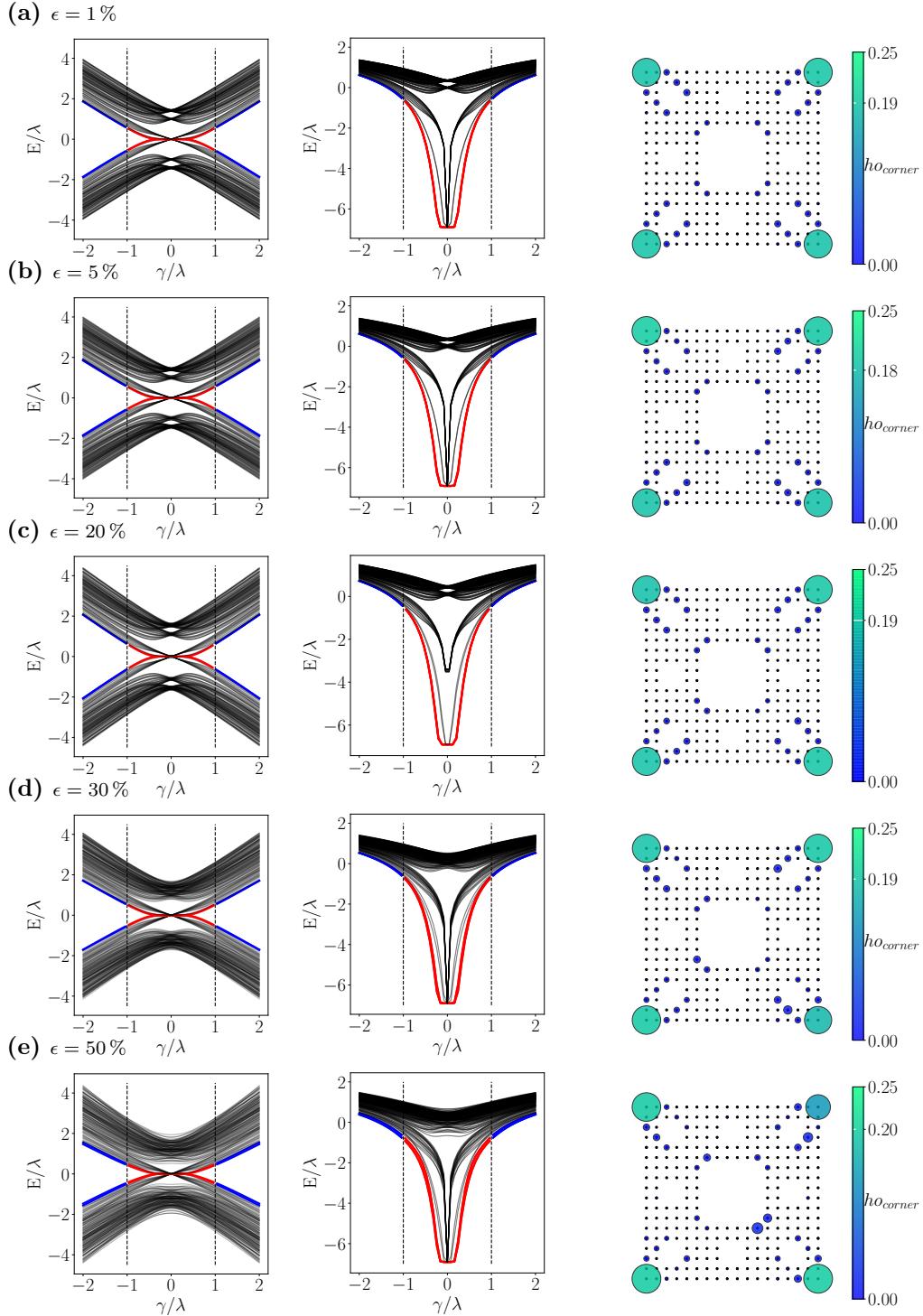
Si pensamos a la red de Sierpinski como una red cristalina cuadrada que fue sometida a transformaciones espaciales discontinuas como lo es abrirle agujeros, por el análisis anterior, podemos decir que es posible reproducir las propiedades el HOTI cuadrado en el un HOTI fractal para ciertos parámetros de  $\gamma/\lambda$ , es decir, es posible conseguir que las densidades de estado se encuentren en localizadas en las esquinas aun con perturbaciones de perforación en la geometría, sin embargo notemos que la estructura de la celda unitaria sigue siendo la misma. Por lo tanto las propiedades topológicas de estas estructuras recide en las simetrías que pueda preservar o romper la celda. Estos estados también presentan robustes ante perturbaciones en los parámetros de salto, aunque en menor medida, como se puede ver en la figura 4.8 (a)-(e) conforme  $\epsilon$  crece las perturbaciones afectan primero a las energías del bullo y posteriormente deformando la trayectorias de las líneas correspondientes a las energías de borde II y III [Fig. 4.6 (d)], sin embargo las energías de borde de la zona I, que corresponden a los estados en las con probabilidades concentradas en las esquinas, no son modificados, por otro lado, al proyectar la densidades de probabilidad sobre la red cristalina podemos ver que las variaciones con  $\epsilon \leq 30\%$  generan asimetrías en las las acumulaciones de densidades que se encuentran distribuidas en las fronteras internas de la red.

En la Figura 4.7 (b) podemos ver como las energías del bode I se mantienen robustos con  $|E - E_{\epsilon=30\%}| < 10^{-3}$ , es importante recalcar que las energias de borde III comienzan a robustecerse conforme crece el tamaño de generación del fractal [fig.

4.7 (c) ], esto significaría que los estados de borde se vuelven Topologicos conforme el borde gana significacia respecto al tamaño de la red, esto es ademas interesante pues estos estados se presentan con densidades acomuladas en las esquinas en el borde interior de la red con  $\rho_{corner} \approx 1/8$  [fig. 4.6 (d)].



**Figura 4.7:** (a) Espectro de energias ordenadas para la red Sierpinski con  $\gamma = 0.5$  y  $\lambda = 1.0$ . (b) Cambio del espectro de energias cuando se perturban los parametros de salto con  $\epsilon = 30\%$ .(b) Variación de las energias de borde como función de  $\epsilon$  para diferentes generaciones de la red de Sierpinski, los puntos rojos corresponden a las energias del borde I y las azules corresponden a las energias del borde III.



**Figura 4.8:** En la columna derecha se muestra el espectro de energías en una red cuadrada como función de  $\gamma/\lambda$  con un desorden aleatorio en los parámetros de salto, de tamaño  $\epsilon$ . Las líneas rojas corresponden a los cuatro estados degenerados que representan los estados localizados en las esquinas. En la columna central se muestra el espectro de energías en escala logarítmica. En la columna izquierda se muestra la densidad de probabilidad de la fase no trivial donde  $\gamma' = \gamma(1 \pm \epsilon)$ ,  $\lambda' = \lambda(1 \pm \epsilon)$ .

### 4.3. Bombeo en un red cuadrada y en una alfombra de Sierpinski

Como se mencionó en la introducción existen trabajos recientes que muestran que las propiedades de transporte en aislantes topológicos de pueden presentar con estados protegidos por invariantes como el número de Chern. En el artículo *High order topological pump*[3], Benalcazar at al. muestran estas propiedades en un arreglo experimental con guías de ondas. Inspirados en esta idea decidimos introducir parámetros cílicos similares a los de una onda evanescente de guía de onda a nuestro modelo anterior de BBH en el Hoti cuadrado y fractal, para lo cual haremos un cambio en los parametros de salto como se muestra en la ecuacion 4.1. El parámetro de sitio  $\epsilon_0 \approx \pm 0.5$  toma el signo como se muestra en la figura 3.1 (a), este parametro rompe la simetría de espejo y permite que el movimiento de los centros de wannier suceda de forma adiabática.

$$\begin{aligned} \gamma &\rightarrow \gamma(\theta) = \gamma_0 e^{-\beta(1 - A \cos \theta)}, \quad \lambda \rightarrow \lambda(\theta) = \lambda_0 e^{-\beta(1 + A \cos \theta)}, \\ \epsilon(\theta) &= \epsilon_0 \sin \theta \end{aligned} \tag{4.1}$$

Estas variaciones ciclicas se realizaron sobre diferentes direcciones en los parametros de nuestras redes:

$$\begin{aligned} \gamma_x &= \gamma_y = \gamma(\theta) = \gamma_0 e^{-\beta(1 - A \cos \theta)} \\ \lambda_x &= \lambda_y = \lambda(\theta) = \lambda_0 e^{-\beta(1 + A \cos \theta)} \end{aligned} \tag{4.2}$$

$$\begin{aligned} \gamma_x &= \gamma_0, \quad \gamma_y = \gamma(\theta) = \gamma_0 e^{-\beta(1 - A \cos \theta)} \\ \lambda_x &= \lambda_0, \quad \lambda_y = \lambda(\theta) = \lambda_0 e^{-\beta(1 + A \cos \theta)} \end{aligned} \tag{4.3}$$

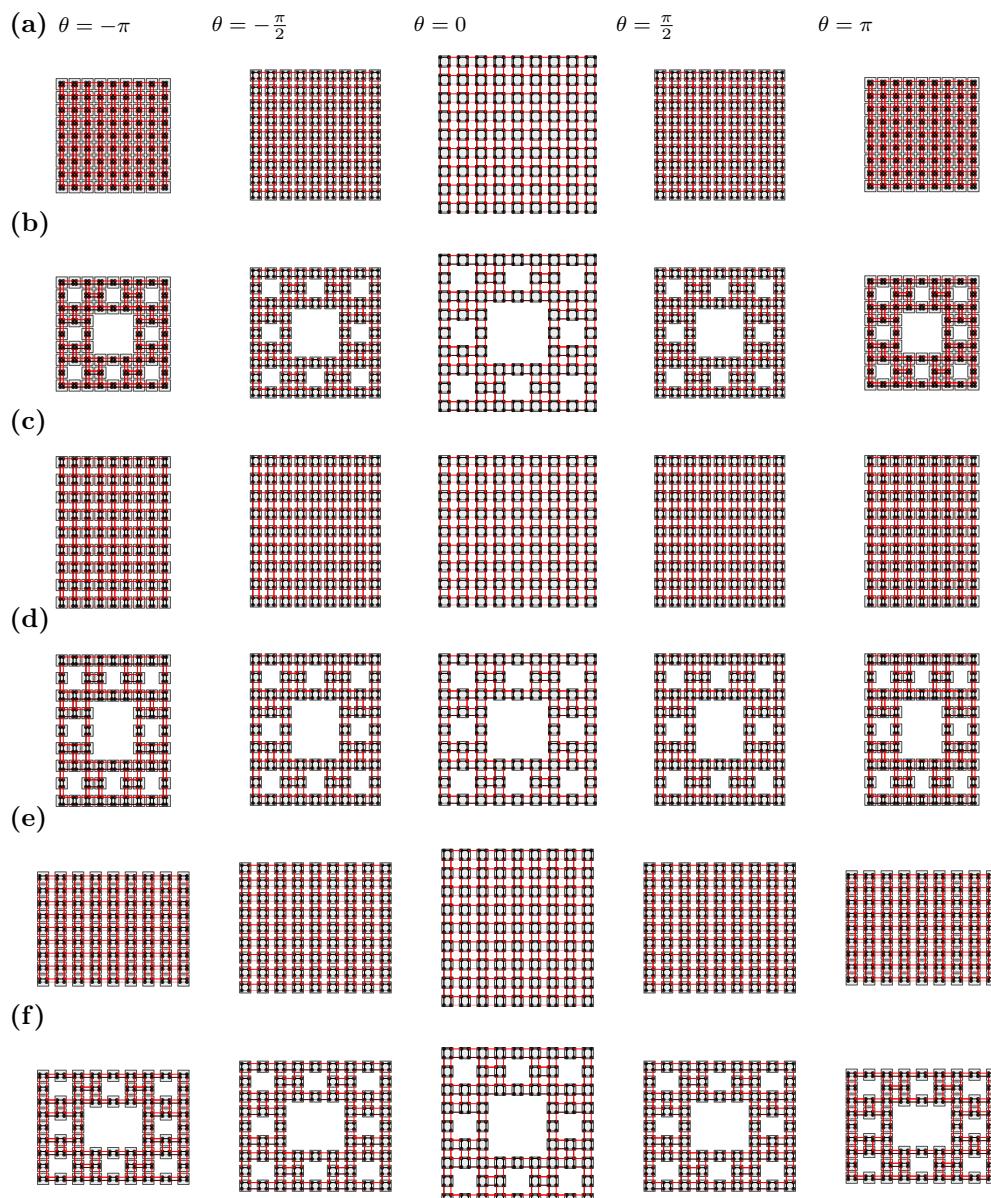
$$\begin{aligned}\gamma_x &= \gamma(\theta) = \gamma_0 e^{-\beta(1 - A \cos \theta)}, \quad \gamma_x = \gamma_0 \\ \lambda_y &= \lambda(\theta) = \lambda_0 e^{-\beta(1 + A \cos \theta)}, \quad \lambda_x = \lambda_0\end{aligned}\quad (4.4)$$

Las variciones en los ejes **X** y **Y** (eq. 4.2)

Las variciones en el eje **X** (eq. 4.3)

Las variciones en el eje **Y** (eq. 4.4)

Los movimientos que generan las variaciones de los parametros de salto sobre la red se pueden observar en la Figura 4.9 **(a)-(f)**, respectivamente.



**Figura 4.9:** Variaciones de la geometría de las redes cristalinas cuadrada y fractal cuando varian los parametros de salto en las direcciones: (a) - (b) X y Y, (c) - (d) X, (e) - (f) Y.

### 4.3.1. Bombeo en red Cuadrada

En las figuras 4.12, 4.14 y 4.10 se muestran los resultados para el bombeo sobre una red cristalina cuadrada con variaciones cíclicas de los parámetros de salto en las direcciones **X**, **Y** y **XY**, respectivamente con un modelo de Rice-Mele aplicado a una red 2-dimensional. Notemos que la variación del espectro de energías tenemos dos clases de comportamiento conforme varia el parámetro cíclico  $\theta$ . La fase trivial donde el comportamiento donde las energías centrales mas cercanas al nivel de Fermi se comportan como parte del bullo, con  $\theta \in [-\pi/2, \pi/2]$ , y la fase topológica donde las energías centrales de borde se diferencian de las energías de bullo en  $\theta \in (-\pi, -\pi/2] \cup [\pi/2, \pi)$  hasta degenerarse en la energía de Fermi completamente en  $\theta = \pi, \pi$ . El parámetro de sitio  $\delta(\theta)$  nos permite separar la degeneración de la trayectoria de las energías de 4 a 2 energías por encima y 2 por debajo del nivel de Fermi, sin embargo, estas energías se vuelven a juntar en  $\theta = \pi, \pi$  donde vuelven a ser indistinguibles, por lo que este estudio solo se hizo en el intervalo abierto  $\theta \in (-\pi, \pi)$ . La proyección de la densidad de probabilidad de estados correspondientes a estas dos trayectorias de las energías positivas y negativas se muestran en la figura 4.11 [(a)-(b)], respectivamente, donde podemos ver como la densidad de probabilidad comienza localizada en 2 de las esquinas con  $\rho_{corner} = 1/2$  y se comienza dispersar por todo el material hasta localizarse en las esquinas contrarias a las que comenzó, nuevamente con  $\rho_{corner} = 1/2$ , este proceso podría ser un indicio de bombeo de densidad de probabilidad, pues estamos moviendo estas densidades por todo el material de un lado al otro, pasando por todo el bullo del material a través del cambio adiabático de fase.

Las flechas que aparecen en la figura 4.11 [(a)-(b)] son la densidad de corriente por cada celda 4.5:

$$\mathbf{J}^{\pm}(\theta) = \frac{1}{N_{cell}} \sum_{i \in cell} \frac{d\rho_{i,\pm}(\theta)}{d\theta} \mathbf{R}_i \quad (4.5)$$

Donde el signo  $\pm$  corresponde a la trayectoria de energía que se elija,  $\mathbf{R}_i$  es la posición del  $i$ -esimo sitio en la celda y  $N_{cell}$  el número de sitios en la celda. Esta corriente nos permite visualizar la dirección y magnitud del flujo de la densidad de probabilidad en cada celda. En las figuras 4.10 [(b, c)] se visualiza el espacio fase

que involucra, los parámetros de salto  $\gamma/\lambda$ , la densidad de corriente promedio por cuadrante 4.6 en el eje **X**, donde  $N_C$  es el número de celdas en cada uno de los 4 cuadrantes de la red cristalina cuadrada <sup>2</sup>, y como estos evolucionan en el parámetro cíclico, donde podemos ver que la corriente define una especie de curva que divide las dos fases de la red cristalina: al interior de la curva tendríamos la fase trivial y al exterior tendríamos la fase topológica, delimitadas por los puntos donde existe mayor flujo de densidad. Los puntos naranjas describen cuando el flujo de la densidad de probabilidad hacia dentro del cuadrante es mayor y los puntos azules describen cuando el flujo de la densidad hacia afuera del cuadrante es mayor. Los parámetros de  $\gamma/\lambda \approx 1$  son para los cuales la corriente se ve mas favorecida y coinciden con los puntos en los cuales la transición de fase sucede en  $\theta \approx \pi/2$  o  $-\pi/2$ .

$$\bar{J}_x^\pm(\theta) = \frac{1}{N_C N_{cell}} \sum_C \sum_{i \in cell} \frac{d\rho_{i,\pm}(\theta)}{d\theta} \mathbf{R}_i \cdot \hat{\mathbf{x}} \quad (4.6)$$

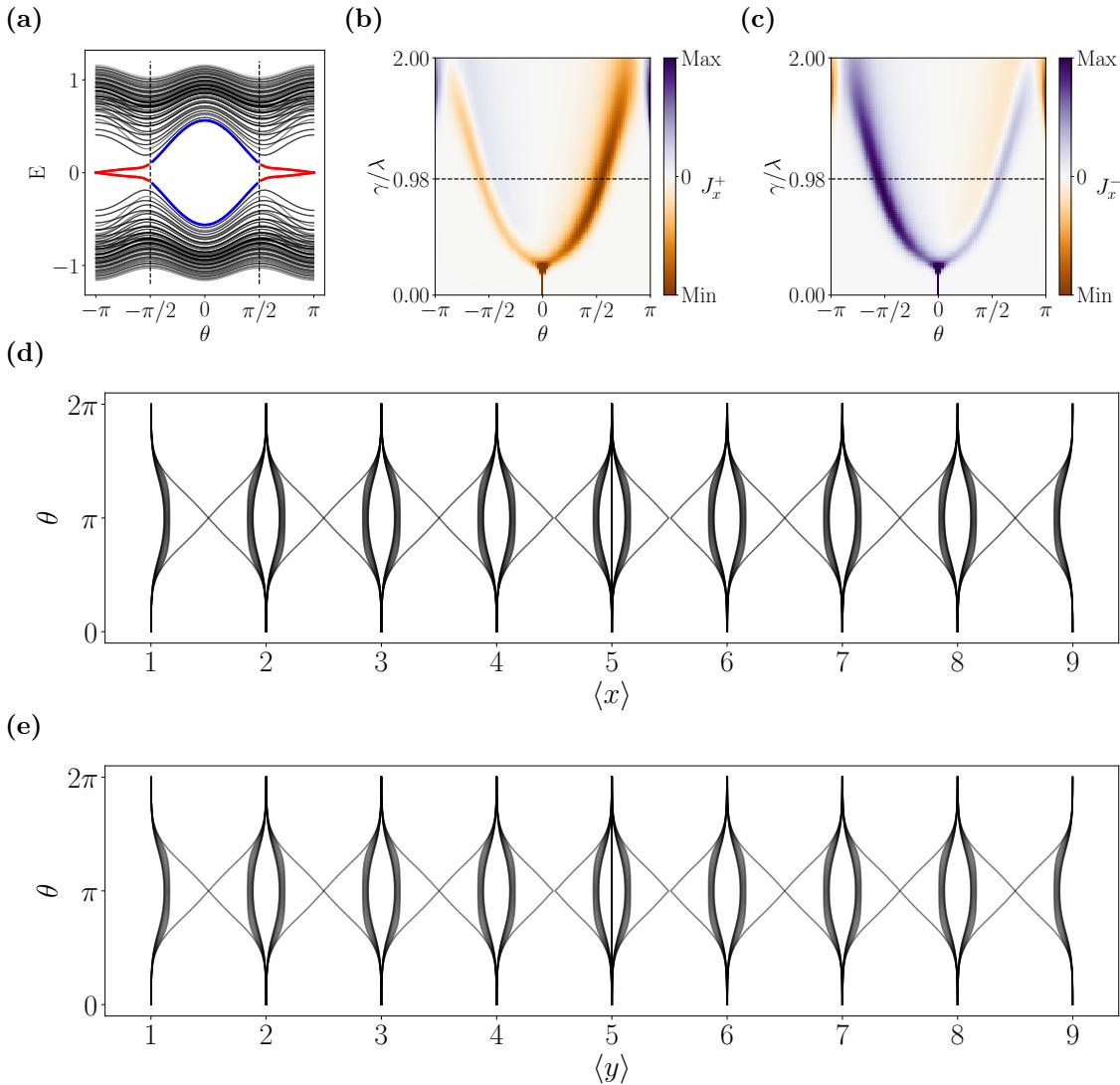
Sin embargo para poder asegurar que existe un bombeo consecuencia del cambio de la polarización generado por la variación de los parámetros de salto cíclicamente es necesario que exista un desplazamiento efectivo de los centros de Wannier (eq.3.14) como se observa en el ejemplo del modelo de Rice-Mele en 1D en la cadena de poliacetileno. En la figura 4.10 (e) muestra el valor esperado de la posición de los estados con energías positivas para el modelo donde el bombeo sucede en las direcciones **XY** donde podemos que existen centros de wannier los cuales comienzan en un una celda y después de un ciclo estos se desplazan a la siguiente celda o a la anterior, el punto de desplazamiento de una celda a otra ocurre en el régimen de la fase topológica.

El bombeo de densidad de probabilidad se da por este desplazamiento del valores esperado de la posición o centros de wannier de un sitio a otro. Para la red cristalina cuadrada fue posible encontrar parámetros de  $\gamma/\lambda$  para los cuales pudiéramos ver este desplazamiento cuando el bombeo correspondiera a la variación de parámetros de salto en las direcciones **X** y **Y** ( $\gamma/\lambda = 0.5$ ), en las figuras 4.12 (e) y 4.14 (d) se puede ver claramente el desplazamiento del los centros de Wannier entre las celdas

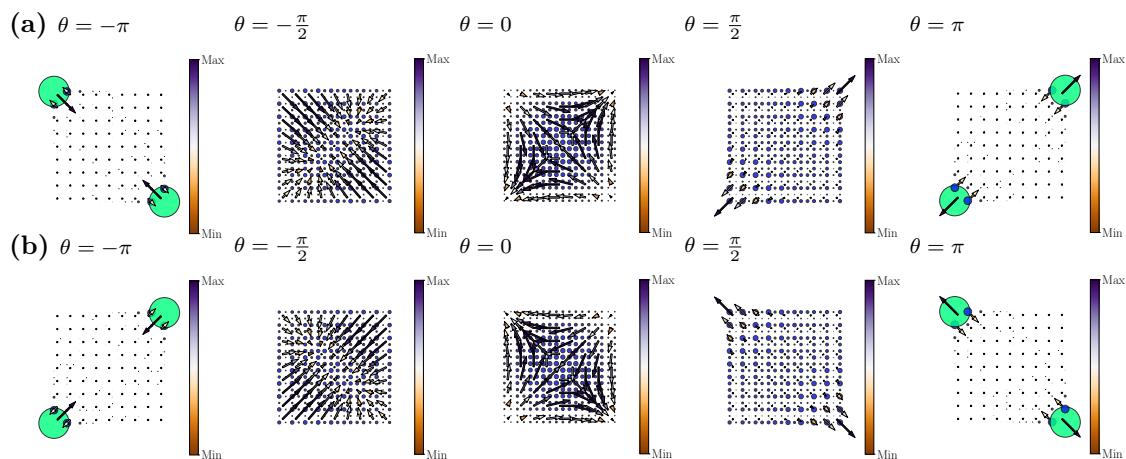
---

<sup>2</sup>Para esta gráfica se tomo en cuenta el cuadrante inferior izquierdo.

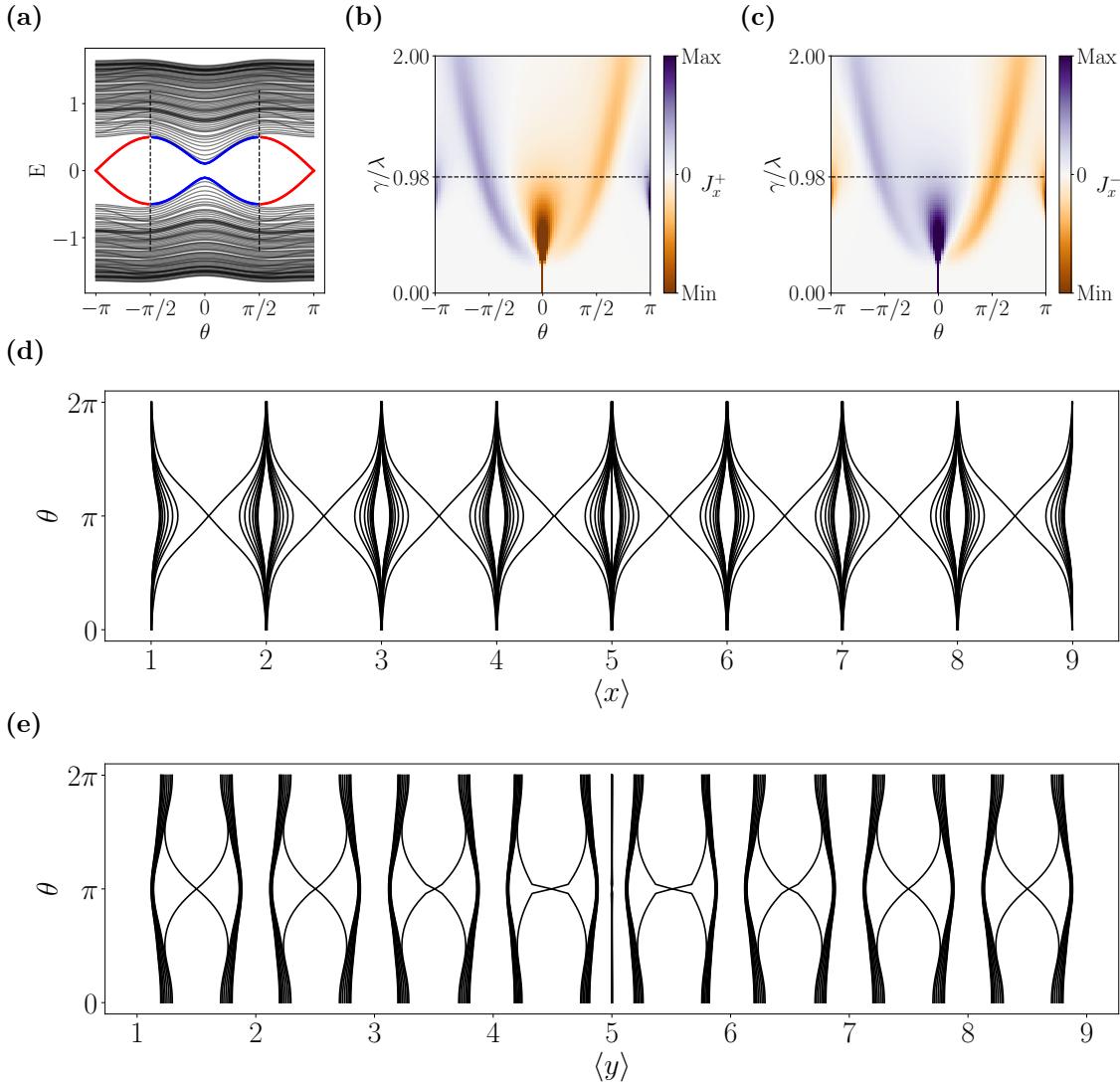
cuando el eje donde se calculan coincide con el eje de la variación de los parametros. Sin embargo, si observamos el desplazamiento de los centros de Wannier sobre el eje que no coincide con el eje del bombeo, como se puede ver en las figuras 4.12 **(d)** y 4.14 **(e)** los centros de Wannier se mueven de una celda a otra pero no llegan al centro de la celda lo que hace que se queden “atrapados” en un ir y venir. Lo interesante es que estos bombeos permiten mover las densidades principalmente por los bordes de la red cristalina de las figuras 4.13 y 4.15 [**(a)-(b)**] y no principalmente por el bulto, tambien estos bombeos se dan de forma unidireccional, en la dirección en la que se realiza el bombeo.



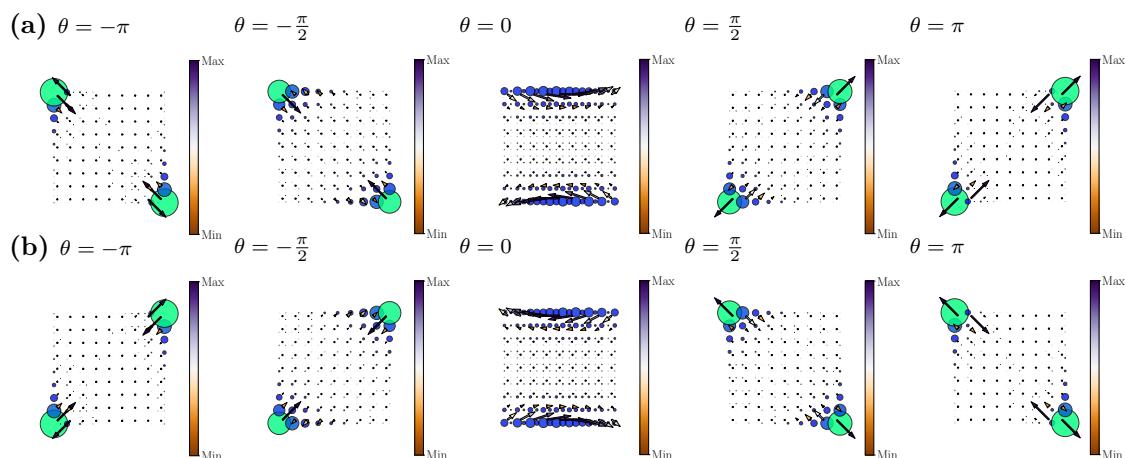
**Figura 4.10:** (a) Variación del espectro de energías conforme cambia el parámetro cíclico, las energías centrales corresponden a los estados de borde. En rojo se encuentra la fase topológica y en azul la fase trivial. (b)-(c) Flujo de densidad de corriente para diferentes elecciones de  $\gamma$  y  $\lambda$  conforme cambia el parámetro  $\theta$ , para el espectro positivo y el espectro negativo de energías de borde, respectivamente. (d)-(e) Cambio de los centros de Wannier para el espectro de energías negativas, en  $\mathbf{X}$  y  $\mathbf{Y}$ . Estos resultados corresponden al modelo de bombeo BBH en una red cuadrada en las direcciones  $\mathbf{XY}$ .



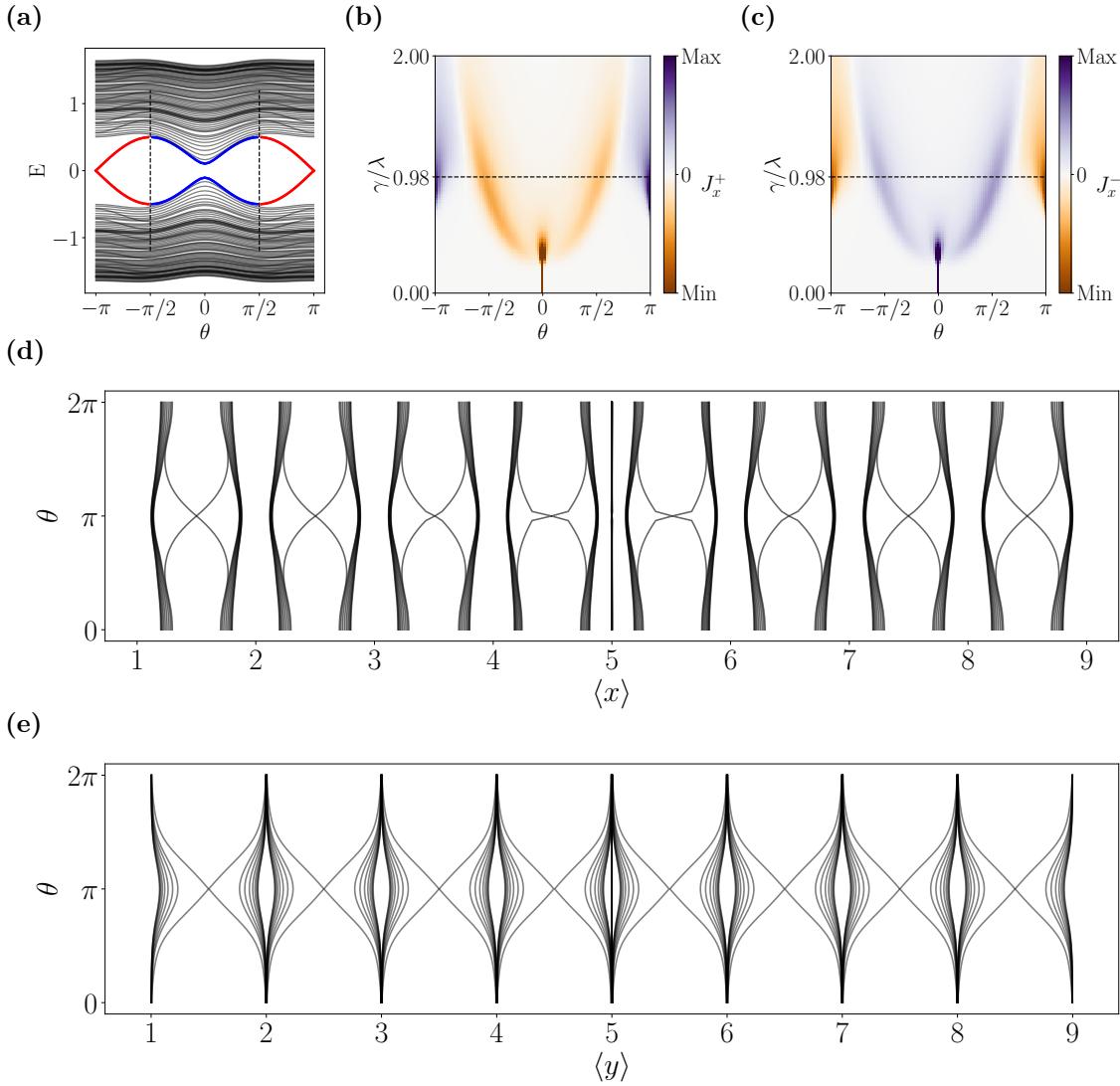
**Figura 4.11:** (a)-(b) Proyección del cambio de la densidad de estados en la red cristalina cuadrada con bombeo BBH en las direcciones  $\mathbf{XY}$ , las flechas corresponden al flujo de la densidad por celda  $\mathbf{J}^\pm(\theta)$  [eq. 4.5]. Las figuras corresponden al espectro positivo y negativo de las energías de borde, respectivamente.



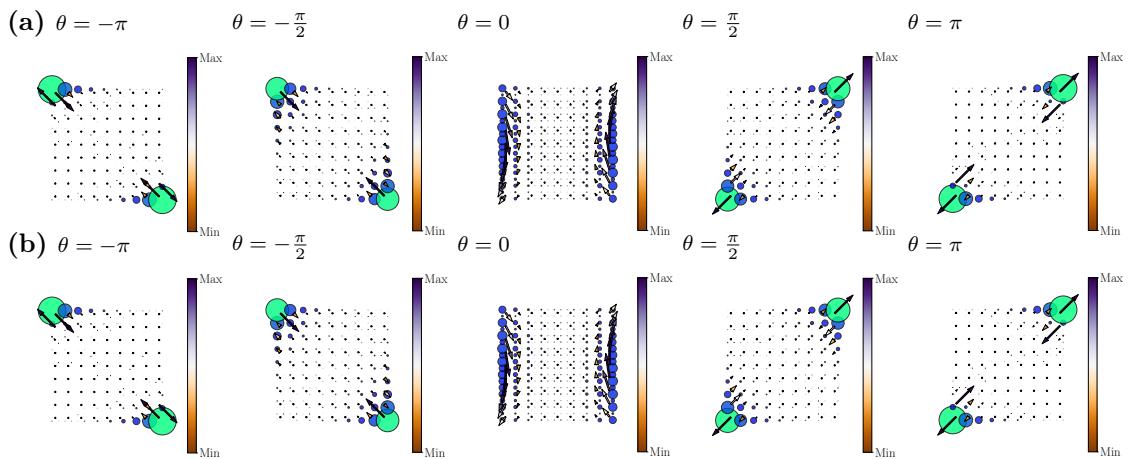
**Figura 4.12:** (a) Variación del espectro de energías conforme cambia el parámetro cíclico, las energías centrales corresponden a los estados de borde. En rojo se encuentra la fase topológica y en azul la fase trivial. (b)-(c) Flujo de densidad de corriente para diferentes elecciones de  $\gamma$  y  $\lambda$  conforme cambia el parámetro  $\theta$ , para el espectro positivo y el espectro negativo de energías de borde, respectivamente. (d)-(e) Cambio de los centros de Wannier para el espectro de energías negativas, en  $\mathbf{X}$  y  $\mathbf{Y}$ . Estos resultados corresponden al modelo de bombeo BBH en una red cuadrada en las direcciones  $\mathbf{X}$ .



**Figura 4.13:** (a)-(b) Proyección del cambio de la densidad de estados en la red cristalina cuadrada con bombeo BBH en la dirección  $\mathbf{X}$ , las flechas corresponden al flujo de la densidad por celda  $\mathbf{J}^{\pm}(\theta)$  [eq. 4.5]. Las figuras corresponden al espectro positivo y negativo de las energías de borde, respectivamente.



**Figura 4.14:** (a) Variación del espectro de energías conforme cambia el parámetro cíclico, las energías centrales corresponden a los estados de borde. En rojo se encuentra la fase topológica y en azul la fase trivial. (b)-(c) Flujo de densidad de corriente para diferentes elecciones de  $\gamma$  y  $\lambda$  conforme cambia el parámetro  $\theta$ , para el espectro positivo y el espectro negativo de energías de borde, respectivamente. (d)-(e) Cambio de los centros de Wannier para el espectro de energías negativas, en  $\mathbf{X}$  y  $\mathbf{Y}$ . Estos resultados corresponden al modelo de bombeo BBH en una red cuadrada en las direcciones  $\mathbf{Y}$ .



**Figura 4.15:** (a)-(b) Proyección del cambio de la densidad de estados en la red cristalina cuadrada con bombeo BBH en la dirección  $\mathbf{Y}$ , las flechas corresponden al flujo de la densidad por celda  $\mathbf{J}^\pm(\theta)$  [eq. 4.5]. Las figuras corresponden al efecto positivo y negativo de las energías de borde, respectivamente.

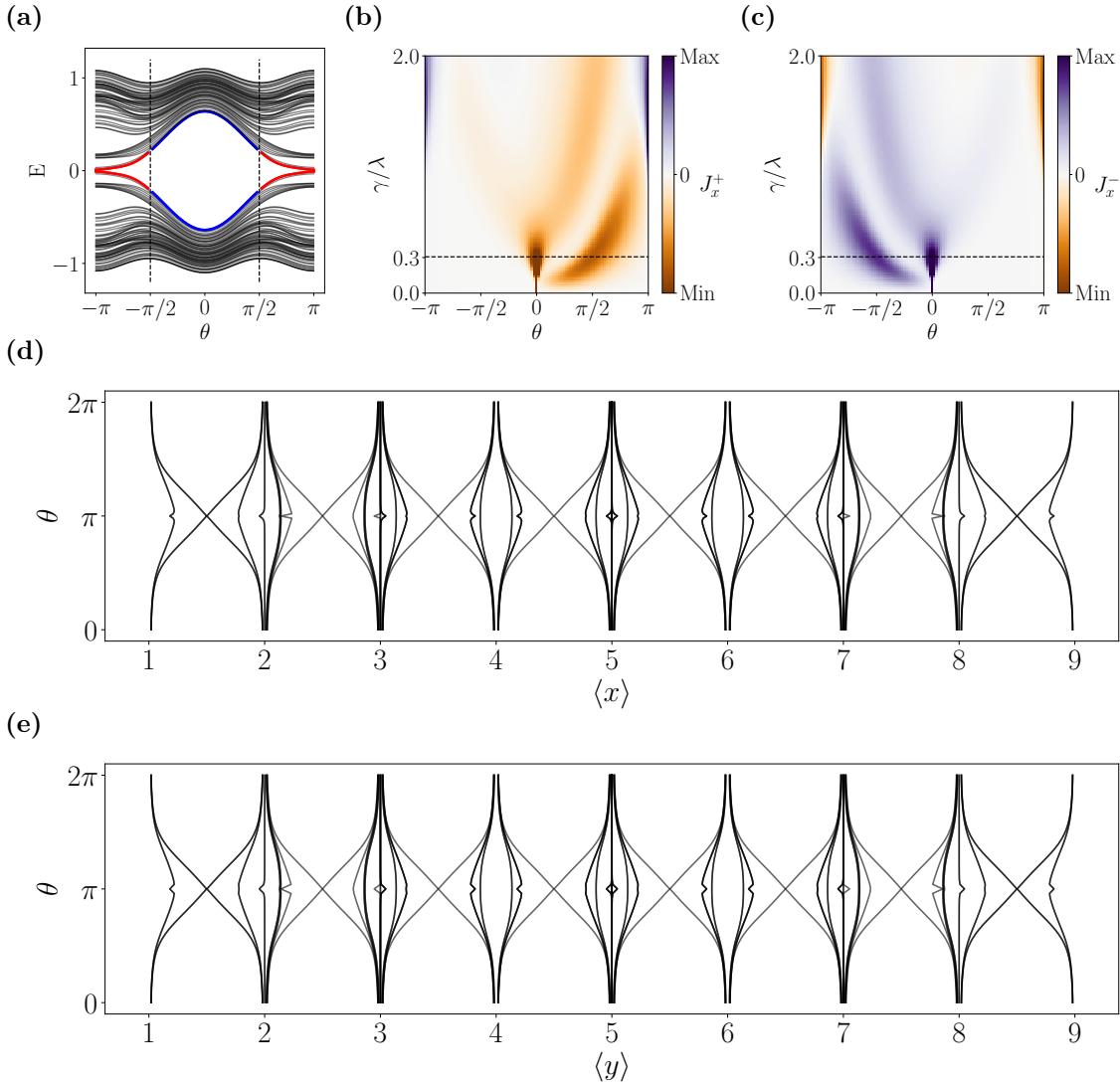
### 4.3.2. Bombeo en red de Sierpinski

En las figuras 4.16, 4.18 y 4.20 se muestran los resultados para el bombeo de BBH sobre una red fractal de Sierpinski de 2da generación con variaciones cíclicas de los parámetros de salto en las direcciones **X**, **Y** y **XY**, respectivamente. En las figuras 4.16, 4.18 y 4.20 **(a)** podemos ver que a diferencia del caso de la red cristalina cuadrada, las energías de bullo no se observan uniformemente distribuidas, sin embargo, podemos ver que en la zona donde  $\theta \in (-\pi, -\pi/2] \cup [\pi/2, \pi)$  las energías de los brodes I, II y III se camienzan a diferenciar del bullo, dando lugar a la fase topologica. Estas lineas que forman los espectros de las energias de borde no estan degeneradas y existen 4 que son las mas cercanas a la energia de Fermi, 2 positivas y 2 negativas y corresponde al borde I. Al proyectar sobre la red de Sierpinski la densidad de probabilidad de correspondientes a estas energias obtenemos las figuras 4.17, 4.19 y 4.21 **(a)-(b)**, donde podemos ver como se desplaza la densidad de probabilidad por todo la red conforme cambiamos el parametro ciclico  $\theta$ , podemos notar que independientemente de la dirección donde se ejerza el bombeo, al igual que en la red cuadrada, la densidad de probabilidad estará localizada al principio del ciclo en dos de las esquinas de la red y al finalizar estará localizado en las esquinas contrarias, sin embargo, de lo que si depende la dirección del bombeo es por donde se desplazaran principalmente estas densidades conforme el parametro  $\theta$  cambia. Esta densidades se desplazaran principalmente en el sentido en el que se haya realizado el bombeo. Por ejemplo las densidades sobre el bombeo en las direcciones **XY** [fig.4.17 **(a)-(b)**] se desplazan por toda la red en la direccion **XY**, pero por otro lado, cuando el bombeo se realiza en las direcciones **X** o **Y** [fig.4.19 **(a)-(b)** y fig.4.21 **(a)-(b)**] las densidades se desplazan principalmente sobre las orillas de la red en las direcciones del bombeo.

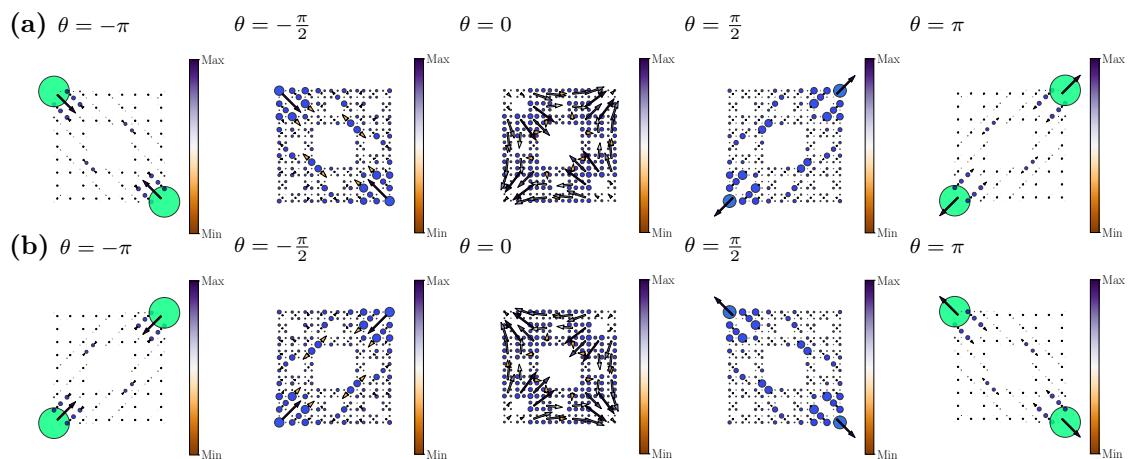
Pero ¿Estos desplazamientos de bombeos generan al final un bombeo efectivo? En este caso en especifico, esto puede ser un poco dificil de analizar, pues no tenemos simetría translacional en la red, lo cual nos impide usar el valor medio de la posición como centros de wannier, por lo tanto, como un indicador de que estamos desplazando efectivamente las densidades. Sin embargo podemos usar el cambio de

los eigenvalores del operador de posición para saber como cambia el valor esperado de la posición y tener indicios de como se distribuyen las densidades por la red conforme cambia el parametro  $\theta$ .

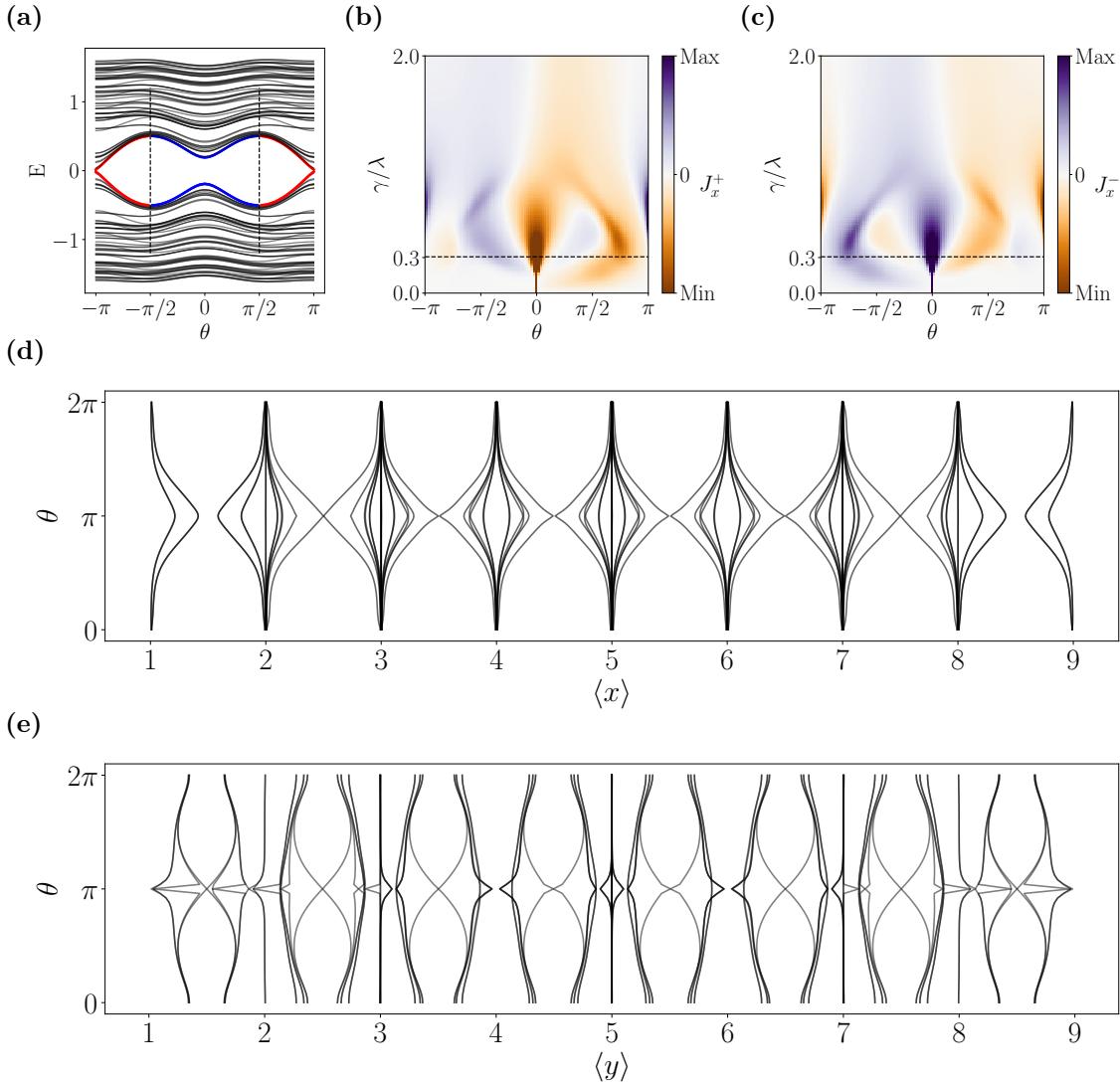
En la figura 4.17 (d) y (e) tenemos el cambio del valor esperado de la posición en la red fractal cuando el bombeo es en las direcciones  $\mathbf{XY}$ , podemos ver como existen estados para los cuales el valores esperado se desplaza de celda en celda en las direcciones  $\mathbf{X}$  y  $\mathbf{X}$ . Por otro lado, en los bombeos unidireccionales 4.19 y 4.21 [(e,d)] este desplazamiento no se da en todos las celdas, por ejemplo los valores esperados de los extremos de la red no logran cruzar al siguiente sitio, este intercambio se da únicamente en las celdas centrales y en la dirección del bombeo. También podemos ver que en los valores esperados de las posiciones en la direcciones contrarias al bombeo [4.19 y 4.21 [(d,e)]] podrian tener un desplazamiento en  $\theta = \pi$ , sin embargo este comportamiento no es del todo claro si es un comportamiento emergente de la geometría o por errores numéricos. Por lo tanto no es posible concluir si en estos casos efectivamente estamos moviendo los valores esperados de las posiciones despues de un ciclo.



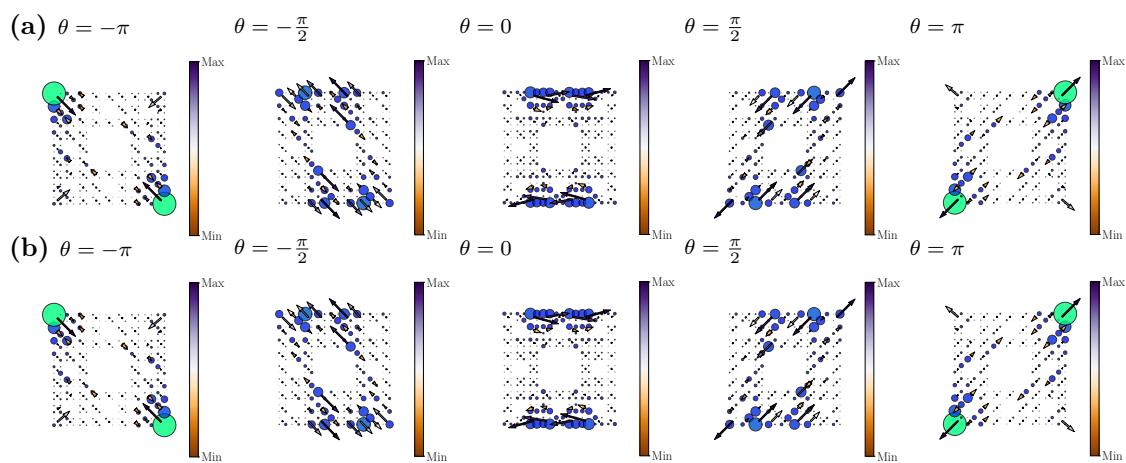
**Figura 4.16:** (a) Variación del espectro de energías conforme cambia el parámetro cíclico, las energías centrales corresponden a los estados de borde. En rojo se encuentra la fase topológica y en azul la fase trivial. (b)-(c) Flujo de densidad de corriente para diferentes elecciones de  $\gamma$  y  $\lambda$  conforme cambia el parámetro  $\theta$ , para el espectro positivo y el espectro negativo de energías de borde, respectivamente. (d)-(e) Cambio de los centros de Wannier para el espectro de energías negativas, en  $\mathbf{X}$  y  $\mathbf{Y}$ . Estos resultados corresponden al modelo de bombeo BBH en una red de Sierpinski en las direcciones  $\mathbf{XY}$ .



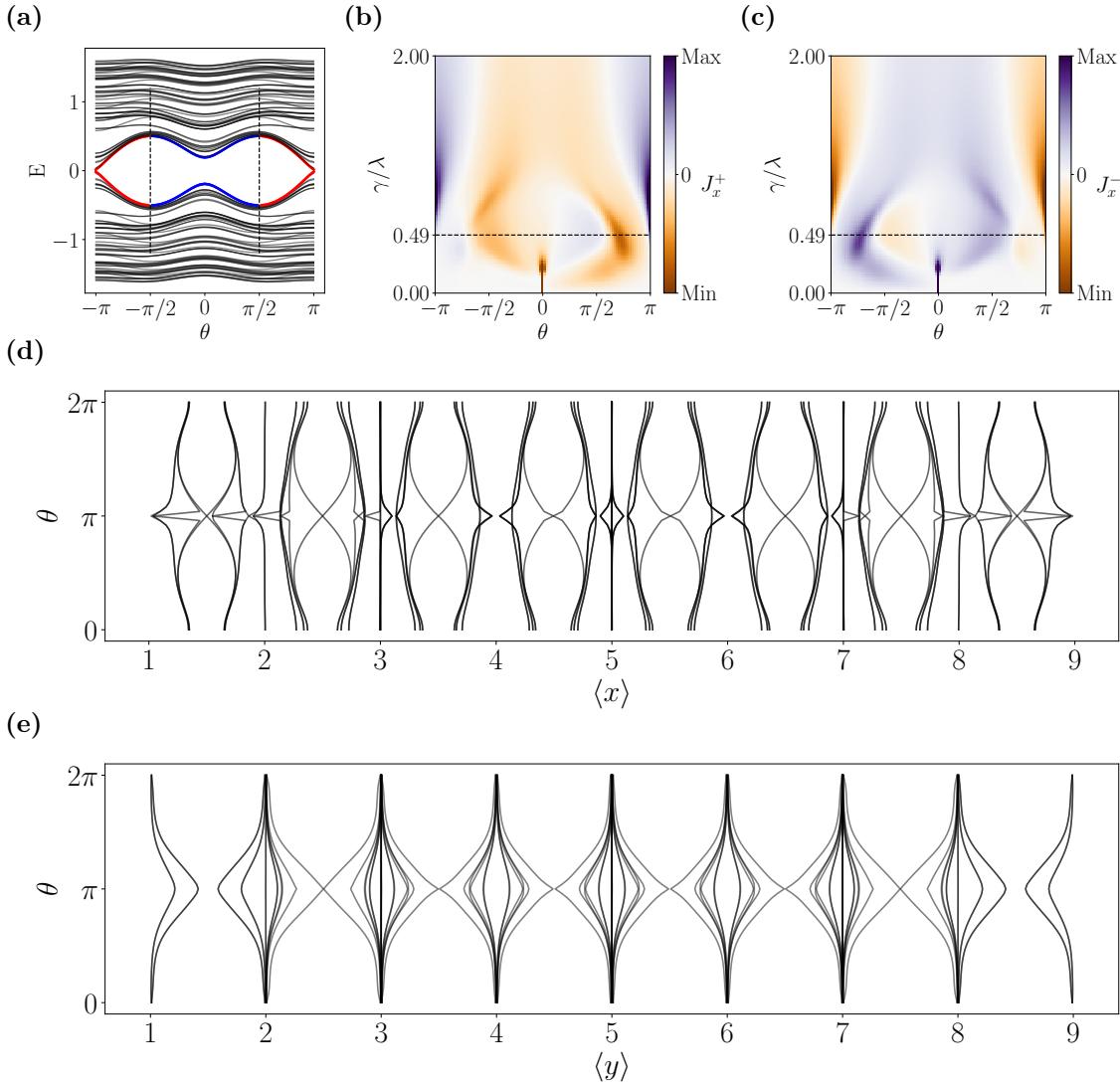
**Figura 4.17:** (a)-(b) Proyección del cambio de la densidad de estados en la red de Sierpinski con bombeo BBH en las direcciones  $XY$ , las flechas corresponden al flujo de la densidad por celda  $J^\pm(\theta)$  [eq. 4.5]. Las figuras corresponden al aspecto positivo y negativo de las energías de borde, respectivamente



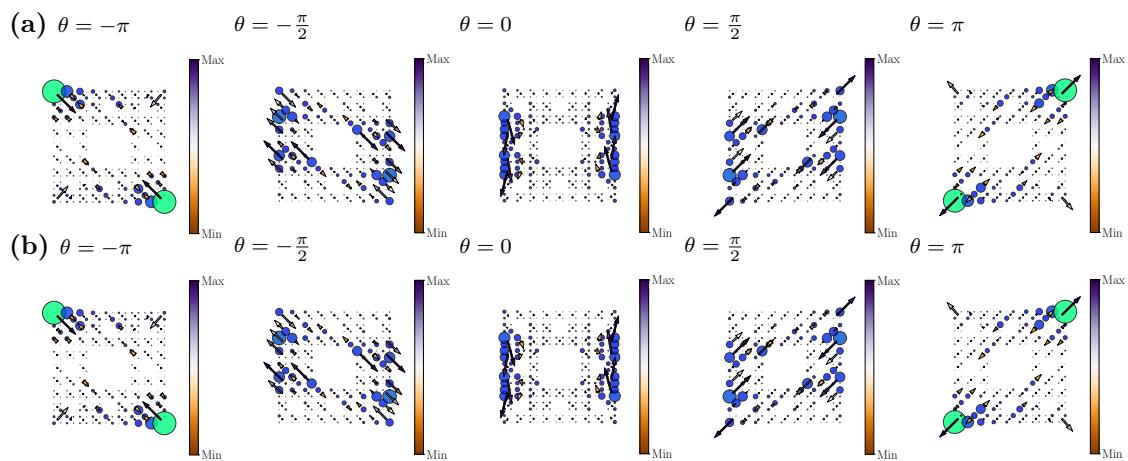
**Figura 4.18:** (a) Variación del espectro de energías conforme cambia el parámetro cíclico, las energías centrales corresponden a los estados de borde. En rojo se encuentra la fase topológica y en azul la fase trivial. (b)-(c) Flujo de densidad de corriente para diferentes elecciones de  $\gamma$  y  $\lambda$  conforme cambia el parámetro  $\theta$ , para el espectro positivo y el espectro negativo de energías de borde, respectivamente. (d)-(e) Cambio de los centros de Wannier para el espectro de energías negativas, en  $\mathbf{X}$  y  $\mathbf{Y}$ . Estos resultados corresponden al modelo de bombeo BBH en una red de Sierpinski en la dirección  $\mathbf{X}$ .



**Figura 4.19:** (a)-(b) Proyección del cambio de la densidad de estados en la red de Sierpinski con bombeo BBH en la dirección  $\mathbf{X}$ , las flechas corresponden al flujo de la densidad por celda  $\mathbf{J}^{\pm}(\theta)$  [eq. 4.5]. Las figuras corresponden al efecto positivo y negativo de las energías de borde, respectivamente



**Figura 4.20:** (a) Variación del espectro de energías conforme cambia el parámetro cíclico, las energías centrales corresponden a los estados de borde. En rojo se encuentra la fase topológica y en azul la fase trivial. (b)-(c) Flujo de densidad de corriente para diferentes elecciones de  $\gamma$  y  $\lambda$  conforme cambia el parámetro  $\theta$ , para el espectro positivo y el espectro negativo de energías de borde, respectivamente. (d)-(e) Cambio de los centros de Wannier para el espectro de energías negativas, en  $\mathbf{X}$  y  $\mathbf{Y}$ . Estos resultados corresponden al modelo de bombeo BBH en una red de Sierpinski en la dirección  $\mathbf{Y}$ .



**Figura 4.21:** (a)-(b) Proyección del cambio de la densidad de estados en la red de Sierpinski con bombeo BBH en la dirección  $\mathbf{Y}$ , las flechas corresponden al flujo de la densidad por celda  $\mathbf{J}^\pm(\theta)$  [eq. 4.5]. Las figuras corresponden al efecto positivo y negativo de las energías de borde, respectivamente

# Capítulo 5

## Conclusiones

Es posible reproducir los estados topologicos de orden superior, que se presentan en una red cristalina cuadrada, por medio del modelo de BBH en una red fractal de Sierpinski, estos estados son robustos frente a perturbaciones en los parametros de salto, que se robustecen aún más conforme el tamaño de la red aumenta con las generaciones del fractal, lo cual tambien hace que los estados de los borde interiores (borde III) del fractal comiencen a robustecerse debido a la significacia del borde con respecto al tamaño de la red. Estos estados de bode se ven reflejados en densidades concentradas en las esquinas exteriores de la red con probabilidad de aproximadamente  $1/4$  alcanzando su maximo ( $\rho_{corner} = 1/4$ ) en el caso donde las celdas estan totalmente cuatrimerizadas, es decir, cuando  $\gamma/\lambda = 0$ .

También fue posible estudiar el bombeo de las densidades de probabilidad, a través del modelo de BBH con parametros de salto y de sitio ciclicos, esto como el resultado de las transiciones entre fase topológica a trivial y de trivial a topológica conforme cambia el parametro ciclico  $\theta$ . Las propiedades de bombeo se presentaron tanto en la red cristalina cuadrada como en la red fractal de Sierpinski, en espacio fase del flujo de la densidad se pudo determinar que los parametros para los cuales el bombeo era beneficiado son cuando la transicion sucede en los puntos cercanos a  $\theta = \pi/2$  siendo  $\gamma/\lambda \approx 1$  en el caso cuadrado y  $\gamma/\lambda \approx 0.3$  en el caso fractal. Este bombeo se ve reflejado como el desplazamiento del valor esperado de la posiciones o centros de wannier (cuando tenemos simetria translacional) a través de las celdas que componen las redes.

Este desplazamiento se obtiene cuando el bombeo se realiza sobre cualquier dirección ( $\mathbf{XY}$ ,  $\mathbf{X}$  o  $\mathbf{Y}$ ) y se realiza en la dirección misma de la variación de los parámetros, este comportamiento es muy claro en la red cuadrada, sin embargo en la red fractal no es muy claro cuando la variación de los parámetros es unidireccional. Sin embargo podemos concluir que la mayoría de las características del aislante topológico de orden superior en la red cristalina fractal se presentan en la red Fractal de Sierpinski que no tiene simetría translacional y tiene más bordes que crecen conforme se tiene más generaciones, estas características aparecen como consecuencia de que las características topológicas de las celdas unitarias que componen las distintas redes son las mismas.

# Bibliografía

- [1] Janos K. Asboth, Laszlo Oroszlany, and Andras Palyi. *A Short Course on Topological Insulators (Lecture Notes in Physics)*, volume 919. Elsevier, 2015.
- [2] Wladimir A. Benalcazar, B. Andrei Bernevig, and Taylor L. Hughes. Quantized electric multipole insulators. *Science*, 357:61–66, 2017.
- [3] Wladimir A Benalcazar, Jihō Noh, Mohan Wang, Sheng Huang, Kevin P Chen, and Mikael C Rechtsman. Higher-order topological pumping. *arXiv preprint arXiv:2006.13242*, 2020.
- [4] Joel E. Moore. The birth of topological insulators. *Nature*, 464:194–198, 2010.
- [5] Karin M Rabe, Matthew Dawber, Céline Lichtensteiger, Charles H Ahn, and Jean-Marc Triscone. *Modern physics of ferroelectrics: Essential background*. Springer, 2007.
- [6] Frank Schindler, Ashley M Cook, Maia G Vergniory, Zhijun Wang, Stuart SP Parkin, B Andrei Bernevig, and Titus Neupert. Higher-order topological insulators. *Science advances*, 4(6):eaat0346, 2018.
- [7] K. Alan Shore. *Berry phases in electronic structure theory*, volume 59. Elsevier, 2018.
- [8] Nicola A Spaldin. A beginner’s guide to the modern theory of polarization. *Journal of Solid State Chemistry*, 195:2–10, 2012.