

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE COAHUILA
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS



INGENIERÍA FÍSICA

"GEOMETRÍA CUÁNTICA EN
MATERIALES BIDIMENSIONALES"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO FÍSICO

PRESENTA:

LUIS EDUARDO SÁNCHEZ GONZÁLEZ

Directores de Tesis:

Dr. Pierre Anthony Pantaleón Peralta

Dr. Carlos Eduardo Rodríguez García

Saltillo, Coahuila, México, abril de 2023

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE COAHUILA
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO
MATEMÁTICAS



INGENIERÍA FÍSICA

"GEOMETRÍA CUÁNTICA EN
MATERIALES BIDIMENSIONALES"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO FÍSICO

PRESENTA:

LUIS EDUARDO SÁNCHEZ GONZÁLEZ

Directores de Tesis:

Dr. Pierre Anthony Pantaleón Peralta
Dr. Carlos Eduardo Rodríguez García

Saltillo, Coahuila, México, abril de 2023

*Con mucho cariño a mi familia,
mi novia **KG** y chispita.*

Agradecimientos

Agradezco infinitamente a mi familia, a mis padres Gabriela González y Eduardo Sánchez, así como a mi hermano Nicolas Sánchez. Gracias por su apoyo incondicional y su paciencia durante toda la licenciatura y en la elaboración de esta tesis. A mi novia Katheri Guardiola, agradezco su compañía a lo largo de la licenciatura, escuchándome, dándome su apoyo incondicional, alentándome a ser mejor cada día y nunca desistir, nos espera aún mucho camino juntos. En especial, quiero agradecer a mi madre Gabriela, quien se ha esforzado todo el tiempo en apoyarme en mis metas, dándome estudios, pero más importante aún, proporcionándome una vida de calidad. Todos mis logros se los dedico a ella.

Por otro lado, estoy profundamente agradecido con el Dr. Pierre A. Pantaleón, no solo por haberme guiado en la elaboración de esta tesis, también por la confianza y paciencia que me ha brindando. Sus enseñanzas han sido enriquecedoras en mi formación, serán pilares en lo que me resta de formación y en toda mi carrera como Físico. También le agradezco el haberme dado la oportunidad de trabajar junto a él, es una excelente persona e investigador. Agradezco al profesor Carlos E. Rodríguez, por su confianza, su ayuda y su apoyo en la licenciatura, sin duda me ha motivado y alentado a crecer como Físico. Considero que el profesor Carlos es una excelente persona e investigador que ayuda y alienta a todos los estudiantes.

Finalmente, a todos los profesores que formaron parte de mi licenciatura les agradezco, estoy convencido que muchos de los conocimientos que adquirí los he aplicado al realizar este trabajo de tesis. Tal como mencionó Newton: “*Si he logrado ver más lejos, ha sido porque he subido a hombros de gigantes*”. En especial, quiero agradecer a la profesora Guadalupe Godina por su apoyo durante la licenciatura, ayudarme y alentarme en mi formación. Además, agradezco al profesor Ricardo Pérez por darme la oportunidad de trabajar con él y por sus enseñanzas en matemáticas y física que me han sido de gran ayuda.

*"Geometría es el arte de razonar bien
sobre figuras mal hechas"*

- Henri Poincaré

Índice general

Resumen	xI
Abstract	xII
1 Introducción	1
1.1 Objetivo general	3
2 Grafeno prístico	4
2.1 Estructura cristalina	4
2.2 Modelo de amarre fuerte	5
2.2.1 Descripción en grafeno prístico	7
2.2.2 Hamiltoniano de Bloch	10
2.3 Fermiones de Dirac sin masa	13
2.4 Simetrías discretas del grafeno	16
2.4.1 Protección de los puntos de Dirac	20
3 Modelos topológicos en grafeno	22
3.1 Grafeno con masa	22
3.1.1 Singularidades y transiciones continuas	24
3.1.2 Fermiones de Dirac con masa	27
3.2 Modelo de Haldane	29
3.2.1 Aproximación a bajas energías	35
3.2.2 Más allá del modelo de Haldane	36
4 Propiedades topológicas del grafeno	38
4.1 Teoría geométrica de bandas	38
4.1.1 Fase y curvatura de Berry	39
4.2 Número de Chern	41
4.2.1 Grafeno prístico	43

4.2.2	Grafeno con masa	44
4.2.3	Modelo de Haldane	47
4.2.4	Aislantes topológicos y el invariante \mathbb{Z}_2	53
5	Sistemas finitos	54
5.1	Estados de borde	54
5.2	Nanocintas de grafeno	56
5.2.1	Borde <i>zigzag</i>	58
5.2.2	Borde <i>armchair</i>	60
5.2.3	Soluciones analíticas para los estados de borde	62
5.3	Nanocintas de grafeno con masa	64
5.4	Correspondencia bulto-frontera en el modelo de Haldane	65
6	Conclusiones	70
A	Hamiltoniano de modelo de dos bandas	72
B	Simetrías discretas en modelo de dos bandas	74
C	Tensor métrico de modelo de dos bandas	76
	Referencias	79

Índice de figuras

- | | |
|--|----|
| 2.1 (a) Red de grafeno con vectores bases \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 . Los vectores δ_i conectan cada átomo A o B, con sus primeros vecinos. El paralelogramo gris representa la celda unitaria. (b) Red recíproca del grafeno con vectores \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 . La primera zona de Brillouin está representada como el hexágono gris. | 5 |
| 2.2 Cadena lineal de dos sitios atómicos. El traslape de las funciones de onda (rojo) permite hacer un túnel, o túneleo, entre los pozos potenciales (azul discontinua). Los niveles de energía de los electrones están representados como las líneas sólidas azules. En la esquina superior derecha, se muestra un esquema típico para presentar el modelo de amarre fuerte considerando solo el túnel t entre los sitios. | 6 |
| 2.3 (a) Red de grafeno y sus orbitales electrónicos. Los orbitales σ forman enlaces covalentes fuertemente enlazados con los átomos de carbono vecinos, mientras que los orbitales π , son responsables de la conducción de los portadores de carga. (b) Esquema que muestra cómo las bandas π se encuentran en la vecindad del nivel de Fermi E_F , mientras que las bandas σ y σ^* se encuentran separados por una brecha de energía grande. Adaptada de [1] . | 7 |
| 2.4 (a) Mapeo $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})/ \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) $ entre el toro de Brillouin \mathbb{T}^2 , y el círculo unitario \mathbb{S}^1 . Cada punto en el círculo representa un pseudo-espinor del hamiltoniano de Bloch del grafeno. (b) Fase $\varphi(\mathbf{k})$ sobre la red recíproca, el hexágono negro respresenta la BZ y los vectores respresentan el campo vectorial $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})$ | 12 |

2.5 (a) Estructura de las bandas π del grafeno obtenidas a partir del modelo de amarre fuerte a primeros vecinos. En la ampliación se muestra la relación de dispersión lineal alrededor de uno de los puntos de Dirac. (b) Relación de dispersión 2.2.29 a través de un camino en la primera zona de Brillouin, con $t = 2.7$ eV.	13
3.1 Estructura de bandas electrónicas del grafeno con masa. Las líneas sólidas rojas corresponden al caso donde $m \neq 0$ y las líneas punteadas grises corresponden al caso $m = 0$ eV, en ambos casos se considera el término de salto $t = 1$ eV.	23
3.2 Mapeo $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\lambda}(\mathbf{k}) = \lambda(\mathbf{k})/ \lambda(\mathbf{k}) $ entre el toro de Brillouin \mathbb{T}^2 , y la esfera de Bloch \mathbb{S}^2 . Cada punto en la esfera de Bloch representa un pseudo-espinor del hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{k})$. Adaptada de [2]	25
3.3 (a) Estructura de bandas de grafeno prístico alrededor de los puntos de Dirac, donde los electrones se comportan como partículas sin masa y por tanto no hay una brecha de energía. (b) Estructura de bandas de grafeno con masa alrededor de los puntos de Dirac, donde la masa que adquieren los electrones provoca una brecha de energía.	28
3.4 (a) Patrón de saltos definido por Haldane. Las flechas (rojas y azules) circulan en el sentido de las agujas del reloj alrededor del centro de cada hexágono de átomos de carbono. Los vectores \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 y \mathbf{b}_3 conectan cada sitio A (o B) con sus segundos vecinos. (b) Definición del índice ν_{ij} que corresponde al signo de la fase. (c) Representación de celda unitaria (paralelogramo) con los saltos a segundos vecinos (flechas rojas). El flujo global a través de dicha celda unitaria es cero.	30
3.5 Estructura de bandas electrónicas del modelo de Haldane. Las líneas sólidas rojas corresponden al caso donde $t' = 0.1$ eV para varios valores de $m = \{-3\sqrt{3}t', 0, 3\sqrt{3}t'\}$ y un par de valores de $\phi = \{-\pi/2, \pi/2\}$. Las líneas punteadas grises corresponden al caso donde $t' = 0$ eV, $m = 0$ eV y para cualquier valor de ϕ . En ambos casos se considera que el término de salto $t = 1$ eV.	33
3.6 Representación del diagrama de fase del modelo de Haldane, considerando como parámetro la masa de Haldane m_H^ξ . Se ilustra para cada zona las trivializaciones a considerar para el fibrado vectorial. En el caso de las zonas cerradas el fibrado vectorial es no trivial. Las líneas roja y azul corresponden a los casos $m_H^+ = 0$ y $m_H^- = 0$ respectivamente.	35

4.1	Existe una homotopía entre un toro y una taza, por lo que podemos deformar continuamente uno y obtener el otro. Además ambas superficies están caracterizadas por un invariante topológico, en este caso es el género $g = 1$, es decir el número de huecos de la superficie.	39
4.2	(a) Conexión de Berry a bajas energía de grafeno prístico, se observa como la conexión parece girar alrededor de los puntos de Dirac en direcciones opuestas en cada valle y además diverge en dichos puntos. (b) Curvatura de Berry alrededor del punto \mathbf{K}_+ , entre más nos acercamos al punto la curvatura aumenta. Algo similar ocurre en el punto \mathbf{K}_- , pero en lugar de aumentar, la curvatura decrece cerca de dicho punto.	43
4.3	(a) Curvatura de Berry de grafeno con masa de la banda de valencia ($\eta = -1$), con parámetro $m = 1$ eV. Se observa como la curvatura crece (decrece) en los puntos equivalentes de \mathbf{K}_+ (\mathbf{K}_-). (b) Curvatura de Berry en 3D de grafeno con masa de la banda de valencia, con parámetro $m = 1$ eV, se muestra como los picos son más pronunciados cuando el valor de m disminuye.	46
4.4	Curvatura de Berry del modelo de Haldane de la banda valencia ($\eta = -1$). Todos los casos corresponden a $t' = 0.1$ eV para varios valores de $m = \{-3\sqrt{3}t'/4, 0, 3\sqrt{3}t'/4\}$ y un par de valores de $\phi = \{-\pi/2, \pi/2\}$. En todos los casos se considera que el término de salto $t = 1$ eV.	48
4.5	(a) Representación de las diferentes fases topológicas de ambas bandas, considerando $\phi = \pi/2$. Se muestran las bandas en los puntos de Dirac y el color indica el signo de la curvatura, color rojo (azul) corresponde a curvatura positiva (negativa). (b) Diagrama de fase del modelo de Haldane, igual a Fig. 3.6, pero en este caso se ilustra el número de Chern para las diferentes regiones.	52
5.1	Estados de borde en el efecto Hall cuántico. (a) Niveles de Landau de una cinta infinita de ancho $x_2 - x_1$. Cerca del borde de la muestra los niveles de Landau se flexionan, por lo que hay estados que cruzan el nivel de Fermi. (b) Los electrones en el bullo de una muestra tienen un movimiento orbital tipo ciclotrón. Mientras que los electrones en el borde no pueden completar la órbita, por lo que se produce un salto de órbita que se propaga a lo largo del borde.	55

-
- 5.2 Estructura de nanocintas de grafeno con **(a)** borde *zigzag* (cinta *zigzag*) y **(b)** borde *armchair* (cinta *armchair*). Los rectángulos punteados definen las celdas unitarias. El ancho de la cinta está determinado por el número total de sitios, ambos sistemas tienen $2N$ sitios, $N = 6$ para cinta *zigzag* y $N = 11$ para cinta *armchair*. 56
- 5.3 Estructura de bandas para grafeno prístino con borde *zigzag* para **(a)** $N = 5$, **(b)** $N = 15$ y **(c)** $N = 30$. En el nivel de Fermi ($E_F = 0$) aparece una banda plana degenerada que aumenta su anchura de forma proporcional al ancho de la cinta. 59
- 5.4 Estructura de bandas para grafeno prístino con borde *armchair* para **(a)** $N = 3$, **(b)** $N = 4$, **(c)** $N = 4$, **(d)** $N = 15$, **(e)** $N = 16$, **(f)** $N = 17$. La estructura de bandas depende de la anchura de la cinta, por lo que existen tres tipos de cintas *armchair*: semiconductoras para $N = 3m$ y $N = 3m + 1$ [**(a)**, **(b)**, **(d)** y **(e)**] y metálicas para $N = 3m + 2$ [**(c)** y **(f)**], con $m \in \mathbb{Z}$ 61
- 5.5 Estructura de bandas para grafeno con masa con borde *zigzag* (fila superior) y *armchair* (fila inferior). En ambos casos las bandas se separan, tenemos una brecha de energía similar al caso infinito y no hay estados de borde. En el borde *zigzag* desaparecen los estados metálicos. 65
- 5.6 Estructura de bandas del modelo de Haldane con borde *zigzag*. Se considera varios valores de $m = \{3\sqrt{3}t' + \Delta, 3\sqrt{3}t', 3\sqrt{3}t' - \Delta\}$, con $\Delta = 0.1$, y para un par de valores de $\phi = \{-\pi/2, \pi/2\}$. En todos los casos se toma los saltos como $t = 1$ eV y $t' = 0.1$ eV. 67

Resumen

Los materiales bidimensionales poseen un gran potencial para liderar la próxima generación de dispositivos electrónicos gracias a sus singulares propiedades físicas. En particular, los aislantes topológicos son notables por su capacidad de conducir electricidad en los bordes, a diferencia de los aislantes convencionales que no presentan esta propiedad. Además, la geometría cuántica se enfoca en el estudio de las propiedades geométricas de las funciones de onda de sistemas cuánticos en el espacio de Hilbert. Las propiedades más conocidas son la fase y la curvatura de Berry, las cuales proporcionan información sobre las fases topológicas y predicen la existencia de estados de borde. En esta tesis, estudiamos las propiedades topológicas de estructuras cristalinas hexagonales, centrandonos en las descripciones de diferentes sistemas obteniendo soluciones analíticas exactas y, en ocasiones, mediante soluciones numéricas. Especialmente, analizamos el grafeno prístino, grafeno con masa y el modelo de Haldane. Obtenemos formas analíticas para la curvatura y fase de Berry, caracterizando así las diferentes fases topológicas. Además, exploramos la correspondencia bulto-frontera, que relaciona las propiedades topológicas del sistema periódico con la presencia de estados de borde en el sistema finito.

Abstract

Two-dimensional materials have great potential to lead the next generation of electronic devices due to their unique physical properties. In particular, topological insulators are notable for their ability to conduct electricity on their edges, unlike conventional insulators which do not have this property. Furthermore, quantum geometry focuses on the study of the geometric properties of wave functions of quantum systems in Hilbert space. The most well-known properties are the Berry phase and curvature, which provide information on the topological phases and predict the existence of edge states. In this thesis, we study the topological properties of hexagonal crystalline structures, focusing on the descriptions of different systems obtaining exact analytical solutions and, occasionally, through numerical solutions. Specifically, we analyze pristine graphene, graphene with mass, and the Haldane model. We obtain analytical forms for the Berry curvature and phase, thus characterizing the different topological phases. Additionally, we explore the bulk-boundary correspondence, which relates the topological properties of the periodic system to the presence of edge states in the finite system.

1

Introducción

El carbono es uno de los elementos más estudiados y es el pilar de la química orgánica. Su importancia se debe a sus múltiples aplicaciones en diferentes áreas, como en electrónica [3] y medicina [4]. Es por ello que la investigación teórica y experimental alrededor de materiales a base de carbono se ha convertido en un área de investigación muy activa, desempeñando un rol importante en nanociencia y nanotecnología [1]. Por otro lado, el carbono presenta una gran familia de alótropos, entre ellos los más conocidos son el diamante y el grafito (tridimensionales), pero en el siglo XX se descubrieron otros alótropos, tal es el caso de los fullerenos (cero dimensionales) [5] y los nanotubos de carbono (unidimensionales) [6].

Durante mucho tiempo se tuvo la idea que las redes cristalinas únicamente podían existir en tres dimensiones. Esto debido al teorema de Mermin-Wagner [7] que limita la existencia de materiales en una y dos dimensiones debido a las fluctuaciones térmicas. Sin embargo, en 2004 A.K. Geim y K.S. Novoselov de la Universidad de Manchester reportaron una estructura bidimensional de carbono [8], llamada *grafeno*¹. Esto lo consiguieron al aplicar la técnica de exfoliación mecánica sobre un pedazo de grafito [8, 11]. Así, los innovadores experimentos que condujeron al descubrimiento y descripción de las propiedades del grafeno [8, 12–14], les valió el Premio Nobel de Física en 2010. A partir de este descubrimiento, surgió un gran interés de la comunidad científica en este novedoso material, debido a sus interesantes propiedades electrónicas [12, 15, 16], ópticas [17, 18], mecánicas [19, 20], térmicas [21] y químicas [22, 23]. En consecuencia, se origina una gran cantidad de trabajos científicos alrededor del grafeno que dan inicio al estudio de una nueva clase de materiales: *los materiales bidimensionales*.

El grafeno no solo cuenta con interesantes aplicaciones tecnológicas [24], también es interesante desde un punto de vista teórico. Uno de estos intereses surge en las propiedades electrónicas y de transporte que lo hacen bastante peculiar, ya que los electrones en el grafeno se comportan como fermiones

¹El término grafeno (graphene en inglés) fue acuñado en 1962 [9] y recomendado por la IUPAC hasta 1995 [10]

relativistas sin masa, que están descritos por la ecuación de Dirac [12, 25]. Esta propiedad del grafeno lo convierte en un puente entre la Física de la Materia Condensada y la Física de Altas Energías [26]. En consecuencia, en los últimos años se ha aumentado la búsqueda de otros sistemas en donde los electrones se comportan como fermiones de Dirac sin masa. Esta clase de sistemas, son conocidos como sistemas de Dirac [27]. Algunos ejemplos son, el modelo $\alpha - T_3$ [28], el grafeno con distorsión Kekulé [29–31], el borofeno ortorrómbico $8 - Pmmn$ [32, 33], entre otros.

Por otro lado, en la década de los 80's el descubrimiento de nuevas fases de la materia provocó un cambio de paradigma acerca de las clasificaciones de las distintas fases de la materia. En ese entonces la clasificación se basaba en la teoría de Bloch de la estructura de bandas de los materiales [34] y en la teoría Landau-Ginzburg-Wilson [35–37] de las transiciones de fase basadas en un mecanismo de ruptura de simetría. No obstante, en 1980 Von Klitzing *et al.* [38] descubren el efecto Hall cuántico, en donde la conductividad Hall es un múltiplo entero. Asociado a este fenómeno, aparecen estados que conducen electricidad en los bordes de la muestra, mientras que en el bullo es aislante [39, 40]. Estas intrigantes características causaron un gran interés en entender y reproducir el efecto Hall cuántico. En 1982 Thouless *et al.* [41, 42] extendieron la descripción del efecto Hall cuántico a un cristal y demostraron que el número entero encontrado anteriormente estaba asociado a una forma geométrica. Después se demostró que esa forma geométrica es un invariante topológico [43] conocido como número de Chern, y que está relacionado a la geometría cuántica del sistema [44]. La geometría cuántica estudia las propiedades geométricas de las funciones de onda de sistemas cuánticos en el espacio de Hilbert [45, 46]. Las propiedades más conocidas, que describiremos a lo largo de este trabajo, son la fase y la curvatura de Berry [47].

Por otra parte, en 1988 F.D. Haldane [48] propuso un modelo en una red de grafeno en el cuál se reproduce el efecto Hall cuántico sin la necesidad de un campo magnético. La estructura de bandas en este sistema presenta un número de Chern entero, y en consecuencia la conductividad Hall está cuantizada. El modelo de Haldane fue el primero en describir un efecto Hall sin campo magnético. Sin embargo, dicho modelo requería romper ciertas simetrías en el sistema. A partir del descubrimiento del grafeno [8], Kane y Mele propusieron un modelo similar al de Haldane preservando las simetrías que se rompían en el modelo de Haldane [49]. Sin embargo, una consecuencia de ello es que en este modelo las corrientes en los bordes no son de carga eléctrica, sino de espín. Todo esto dio lugar al nacimiento de una nueva clase de materiales llamados *aislantes topológicos*. Estos materiales, a diferencia de los aislantes y conductores convencionales, son aislantes en el bullo pero conductores en los bordes. Así, el grafeno ha sido un terreno abundante para el desarrollo de conceptos topológicos, que van desde el modelo de Haldane [48] hasta el modelo de Kane-Mele [49], y que se extienden a muchos otros ejemplos [50–57].

1.1. Objetivo general

En este contexto, la presente tesis tiene como objetivo explorar las propiedades topológicas de estructuras cristalinas hexagonales. Describiendo los diferentes sistemas obteniendo soluciones analíticas exactas y además mediante soluciones numéricas. Los casos a estudiar son el grafeno prístino, grafeno con masa y el modelo de Haldane. Cabe mencionar que, aunque los sistemas mencionados parecen ser relativamente simples, hasta el momento de concluir esta tesis no existe en la literatura una descripción detallada de sus propiedades topológicas. La estructura de la tesis es la siguiente:

Capítulo 2: Grafeno prístino. Presentamos la estructura cristalina del grafeno prístino y aplicamos un modelo de amarre fuerte para derivar la estructura de bandas y las funciones de onda. Mediante una aproximación a bajas energías describimos el comportamiento ultrarelativista de los electrones en el grafeno. Por último, se definen las simetrías discretas que permiten clasificar los hamiltonianos no interactuantes, se aplican al grafeno prístino y se discute como la degeneración en grafeno está protegida por simetrías.

Capítulo 3: Modelos topológicos en grafeno. Se estudia de forma detallada dos modelos en grafeno: *grafeno con masa* y *modelo de Haldane*. En ambos casos, mediante un modelo de amarre fuerte se obtiene la estructura de bandas y las funciones de onda. Se describen las singularidades de las funciones de onda y se argumenta como estas indican la no trivialidad del sistema provocando la existencia de transiciones de fase. Por último, se realiza una aproximación a bajas energías en cada modelo y se describe el comportamiento relativista de los electrones.

Capítulo 4: Propiedades topológicas del grafeno. Empezamos introduciendo los conceptos básicos de la teoría geométrica de bandas, donde definimos la fase de Berry y curvatura de Berry. Luego, abordamos el concepto de número de Chern partiendo del efecto Hall cuántico. Calculamos una forma analítica para la curvatura de Berry de los sistemas mencionados y con ello se deriva el número de Chern analíticamente. Por último, en base a los resultados obtenidos describimos las diferentes fases topológicas que se presentan en los sistemas.

Capítulo 5: Sistemas finitos. Se estudian de forma detallada los modelos anteriores en su representación de nanocinta. Desarrollamos un modelo de amarre fuerte para sistemas finitos y mediante diagonalización numérica exacta obtenemos la estructura de bandas. Se describen los estados de borde y concluimos con un fenómeno llamado *correspondencia bulto-frontera* el cual relaciona las propiedades del sistema infinito con la existencia de estados de borde en su representación finita.

Capítulo 6: Conclusiones. Finalmente, resumimos los principales resultados de esta tesis y presentamos una conclusión.

2

Grafeno prístico

2.1. Estructura cristalina

En una red de grafeno, los átomos de carbono están dispuestos en una estructura hexagonal formando una red cristalina similar a un panal de abejas, tal como se muestra en la Fig. 2.1 (a). Tal estructura cristalina puede verse como una red triangular que contiene dos sitios atómicos por celda unitaria, indicados como A y B [13, 58–60]. Los vectores de la red que trasladan la celda unitaria sobre todos los sitios del cristal están dados por

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 3), \quad (2.1.1)$$

donde $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ es la distancia entre átomos de carbono. Los vectores que conectan un sitio atómico A con sus tres primeros vecinos son

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1), \quad \boldsymbol{\delta}_3 = a(0, -1). \quad (2.1.2)$$

Además, como la red es periódica, los vectores de la correspondiente red recíproca, $\{\mathbf{b}_j\}$, son el conjunto de vectores que satisfacen $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Con esta expresión y mediante los vectores en la Ec. 2.1.1 obtenemos

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(\sqrt{3}, 1), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(-\sqrt{3}, 1). \quad (2.1.3)$$

En la Fig. 2.1 (b) se muestra la red recíproca, donde se observa que también es una red hexagonal. A la región gris en Fig. 2.1 (b) se le conoce como zona de Brillouin (BZ), la cual es la celda de Wigner-Seitz de la red recíproca. De particular importancia son las seis esquinas de la BZ las cuales se conocen como puntos de Dirac [13]. Mediante argumentos de simetría, estos seis puntos se reducen a solo dos, identificados como K_{\pm} y están dados por

$$\mathbf{K}_{\pm} = \left(\pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0 \right). \quad (2.1.4)$$

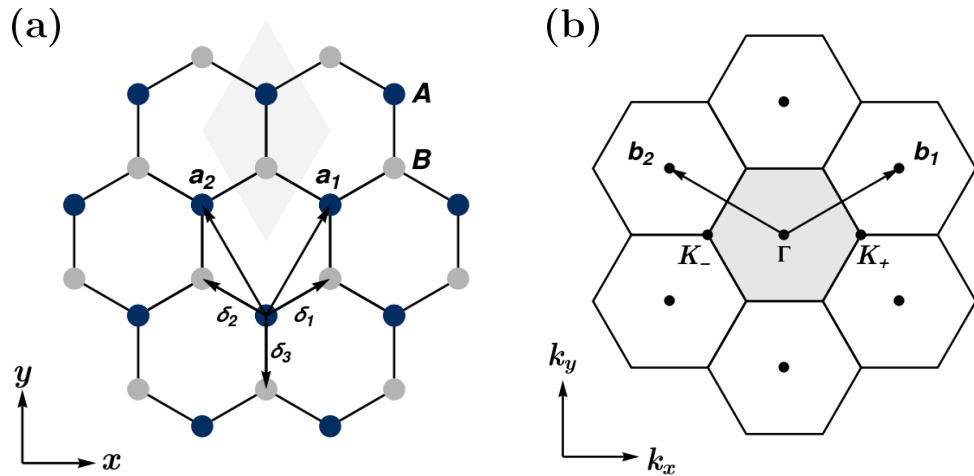


Figura 2.1 (a) Red de grafeno con vectores bases \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 . Los vectores δ_i conectan cada átomo A o B, con sus primeros vecinos. El paralelogramo gris representa la celda unitaria. (b) Red recíproca del grafeno con vectores \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 . La primera zona de Brillouin está representada como el hexágono gris.

Las otras esquinas pueden ser obtenidas a partir de \mathbf{K}_{\pm} mediante simples operaciones de rotación. Como se describirá mas adelante, estos puntos son de particular importancia para la física del grafeno [12, 13].

2.2. Modelo de amarre fuerte

Para describir las propiedades electrónicas del grafeno [58], se utiliza un modelo conocido como el *modelo de amarre fuerte* o *tight-binding model* en inglés. Este modelo asume que las funciones de onda de los electrones en todo el cristal se pueden escribir como una combinación lineal de los orbitales atómicos de átomos aislados [61–63]. Para ilustrar este modelo, consideremos un sistema de dos sitios atómicos idénticos, como se muestra en la Fig. 2.2. La función de onda de los electrones en todo el cristal se puede escribir como una combinación lineal de estos orbitales atómicos (línea roja) y el hamiltoniano del sistema debe contener todas las contribuciones de cada sitio. Para tomar en cuenta el traslape de los orbitales, se introduce un término de *hopping* en inglés o *salto* en español [61]. En notación de segunda cuantización, el hamiltoniano del sistema se escribe como

$$H = t_{11}c_1^\dagger c_1 + t_{22}c_2^\dagger c_2 + t_{12}c_1^\dagger c_2 + t_{21}c_2^\dagger c_1, \quad (2.2.1)$$

y considerando sitios idénticos esta ecuación se reduce a

$$H = t \sum_{ij}^2 c_i^\dagger c_j. \quad (2.2.2)$$

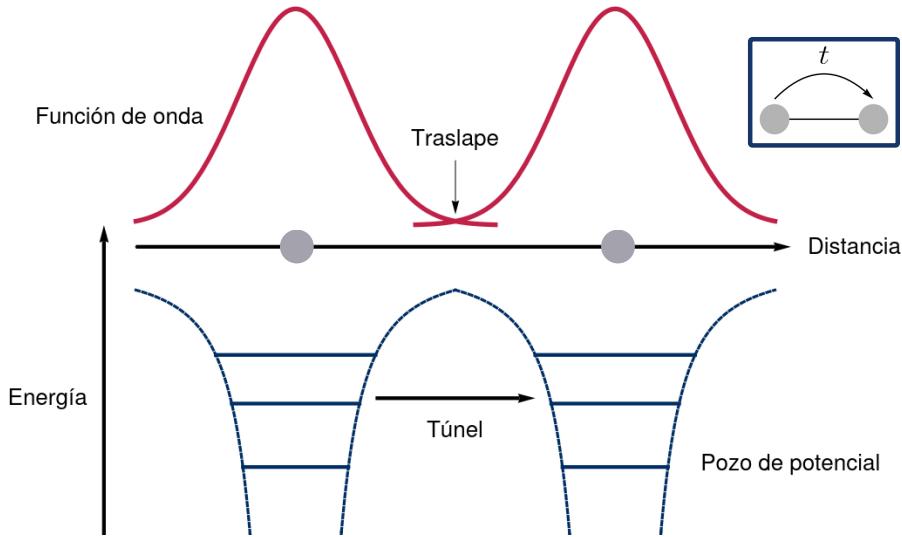


Figura 2.2 Cadena lineal de dos sitios atómicos. El traslape de las funciones de onda (rojo) permite hacer un túnel, o túneleo, entre los pozos potenciales (azul discontinua). Los niveles de energía de los electrones están representados como las líneas sólidas azules. En la esquina superior derecha, se muestra un esquema típico para presentar el modelo de amarre fuerte considerando solo el túnel t entre los sitios.

La ecuación anterior se puede generalizar para una una red cristalina con muchos sitios y está dada por,

$$H = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad (2.2.3)$$

donde los indices i, j representan posiciones atómicas, t_{ij} es el término de “tuneloo” o de “salto” que usualmente es un valor numérico que nos da la magnitud del traslape de los orbitales atómicos. La notación de operadores es tal que c_i^\dagger crea un partícula en el sitio i y c_j aniquila un partícula en el sitio j . Generalmente, se considera que los portadores de carga son fermiones (electrones), por lo que los operadores de creación y aniquilación satisfacen las relaciones de anticonmutación

$$\{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{c_i, c_j\} = \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0. \quad (2.2.4)$$

En la Ec. 2.2.3 se tiene en cuenta la interacción entre todos los sitios atómicos ya que no se imponen restricciones sobre la distancia a la que interactúan, aunque el modelo puede simplificarse dependiendo del sistema físico en cuestión. Por lo general, cada sitio atómico interactúa fuertemente con sus vecinos más cercanos. Por ejemplo, en la Fig. 2.1 (a), un electrón en el sitio A interactúa con sus tres primeros vecinos en los sitios B. Si ampliamos la interacción a los segundos vecinos, cada sitio A también podría interactuar con otros sitios A. Sin embargo, es importante tener en cuenta que a medida que se agregan vecinos más lejanos, la interacción entre ellos disminuye. En particular, la

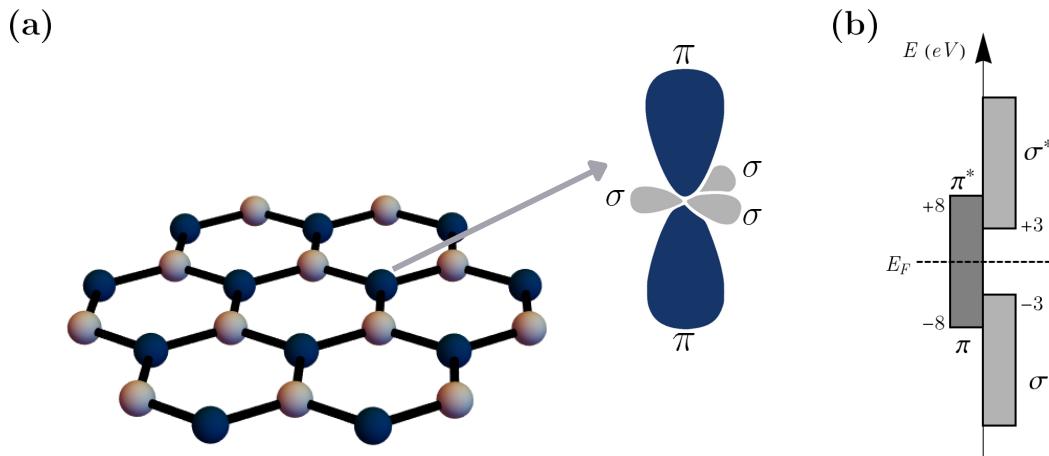


Figura 2.3 (a) Red de grafeno y sus orbitales electrónicos. Los orbitales σ forman enlaces covalentes fuertemente enlazados con los átomos de carbono vecinos, mientras que los orbitales π , son responsables de la conducción de los portadores de carga. **(b)** Esquema que muestra cómo las bandas π se encuentran en la vecindad del nivel de Fermi E_F , mientras que las bandas σ y σ^* se encuentran separados por una brecha de energía grande. Adaptada de [1]

aproximación a segundos vecinos se escribe como

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} t'_{ij} c_i^\dagger c_j. \quad (2.2.5)$$

La ecuación 2.2.5 describe la aproximación de segundos vecinos en el modelo de amarre fuerte. En esta aproximación, se incluyen los términos de energía de sitio ε_i , la interacción entre sitios vecinos inmediatos t_{ij} y la interacción entre sitios segundos vecinos t'_{ij} . En el primer término, el factor ε_i representa la energía asociada con cada sitio en la red cristalina, que puede ser diferente para cada sitio. En caso de que los sitios sean idénticos, este término es una constante. El segundo término describe la interacción entre los sitios i y sus primeros vecinos j , donde t_{ij} es el término de salto entre los sitios i y j . Es importante destacar que la suma sobre i y j solo se realiza una vez, debido a que $t_{ij} = t_{ji}$. El último término describe la interacción entre segundos vecinos, donde t'_{ij} es el término de salto entre los sitios i y j . A diferencia del término anterior, este término no necesariamente satisface $t'_{ij} = t'_{ji}$, por lo que el intercambio de índices no siempre corresponde al mismo término de salto.

2.2.1. Descripción en grafeno prístico

En su estado más bajo de energía, un átomo de carbono aislado tiene la configuración electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$, con seis electrones unidos al núcleo, y donde cuatro de ellos son electrones de valencia. El carbono puede incrementar el número de electrones vacantes para formar enlaces, tal proceso de reordenamiento de electrones se le conoce como hibridación. En el grafeno, los orbitales

$2s$, $2p_x$, $2p_y$ se combinan para formar tres orbitales de hibridación de tipo sp^2 , mismos que son los responsables de fuertes enlaces covalentes (enlaces σ) entre átomos vecinos [1, 58]. Estos enlaces σ conducen a la formación de las bandas σ , que están separadas por una brecha de energía grande alrededor de la energía de Fermi, como se muestra en la Fig. 2.3 (b). Es por esto que la contribución de las bandas σ a las propiedades electrónicas del grafeno es comúnmente despreciada [13, 58].

El cuarto electrón de valencia ocupa el orbital p_z , que es perpendicular a los orbitales σ (véase Fig. 2.3 (a)). La interacción de los orbitales p_z entre átomos vecinos conduce a la formación de dos bandas π , las cuales desempeñan el papel más importante de las excitaciones electrónicas de baja energía del grafeno. A continuación, se describe la estructura electrónica de las dos bandas π del grafeno mediante un modelo de amarre fuerte a primeros vecinos.

En general, el hamiltoniano de amarre fuerte a primeros vecinos para el grafeno está dado por

$$H = \sum_i \varepsilon_A a_i^\dagger a_i + \sum_j \varepsilon_B b_j^\dagger b_j - t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i), \quad (2.2.6)$$

donde ε_A y ε_B es la energía de sitio en A y B respectivamente, y donde $t \approx 2.7$ eV es el parámetro de salto entre orbitales π [13]. Los átomos en los sitios A y B son idénticos, por lo que $\varepsilon_A = \varepsilon_B$. Sin perdida de generalidad podemos asumir que $\varepsilon_A = \varepsilon_B = 0$. Ya que en este caso el efecto de la energía de sitio es un desplazamiento constante en energía. Así, el hamiltoniano de amarre fuerte se escribe como

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i). \quad (2.2.7)$$

En la literatura es habitual encontrar el hamiltoniano en la forma,

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger b_j + H.c.), \quad (2.2.8)$$

donde *H.c.* significa *conjugación Hermitiana*, que proviene del inglés *Hermitian conjugation*, y es necesaria para garantizar que el hamiltoniano resultante sea hermitiano. Esto último es necesario para garantizar que los eigenvalores sean reales, de otra manera se tendrían perdidas o ganancia de energía, como en un sistema cuántico abierto [64].

El hamiltoniano en Ec. 2.2.8 puede ser escrito en términos de los parámetros de la red. Para el grafeno y en general para cualquier red hexagonal, el índice i recorre todos los sitios $\mathbf{r} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$, con $n, m \in \mathbb{Z}$, que corresponde a la subred A. Para evitar un doble conteo, y en aproximación de primeros vecinos, se hace que el índice j recorra solo los sitios δ_i , $i = 1, 2, 3$ mostrados en Fig. 2.1 (a). Entonces, el hamiltoniano se reescribe como

$$H = -t \sum_{\mathbf{r}} \sum_{n=1}^3 a_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta_n} + H.c.. \quad (2.2.9)$$

La ecuación anterior puede expresarse en el espacio- \mathbf{k} o espacio recíproco. Escribimos los operadores de creación y aniquilación en su representación de Fourier,

$$a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}, \quad a_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \quad (2.2.10)$$

donde N es el número de sitios de la red y $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ es el momento cristalino. Sustituyendo los operadores de creación y aniquilación en el hamiltoniano en Ec. 2.2.9, tenemos que

$$H = -t \sum_{\mathbf{r}} \sum_{n=1}^3 \left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} + \delta_n)} b_{\mathbf{k}'} \right) \right] + \text{H.c.}, \quad (2.2.11)$$

reordenando términos e intercambiando las sumas,

$$H = -t \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{n=1}^3 \left[\left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \right) e^{i\mathbf{k}' \cdot \delta_n} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}'} \right] + \text{H.c.}, \quad (2.2.12)$$

donde el término entre paréntesis es la definición de Delta de Kronecker

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} . \quad (2.2.13)$$

Finalmente, sustituyendo Ec. 2.2.13 en Ec. 2.2.12, sumando sobre \mathbf{k}' y reorganizando índices, el hamiltoniano resultante toma la forma

$$H = -t \sum_{\mathbf{k}} \left[\sum_{n=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_n} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} + \sum_{n=1}^3 e^{-i\mathbf{k} \cdot \delta_n} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \right]. \quad (2.2.14)$$

La Ec. 2.2.14 se puede simplificar aún mas con el uso del llamado factor de estructura geométrico,

$$f(\mathbf{k}) = -t \sum_{n=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_n}, \quad (2.2.15)$$

el cuál es un término que identifica las posiciones cristalinas en la red. Por lo tanto, el hamiltoniano en el espacio- \mathbf{k} se simplifica a

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^{\dagger} f(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^{\dagger} f^{\dagger}(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}} \right]. \quad (2.2.16)$$

La Ec. 2.2.16 tambien se puede escribir en forma matricial, esto es

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} & b_{\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^{\dagger}(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (2.2.17)$$

o de forma más compacta como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger \mathcal{H}(\mathbf{k}) \Psi, \quad (2.2.18)$$

donde

$$\Psi = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^\dagger(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi^\dagger = (a_{\mathbf{k}}^\dagger \ b_{\mathbf{k}}^\dagger). \quad (2.2.19)$$

A los operadores Ψ , se les conoce como *espinores de Nambú*. El término $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ es la representación matricial del hamiltoniano en el espacio- \mathbf{k} o también conocido como hamiltoniano de Bloch [2].

La estructura matricial del hamiltoniano en Ec. 2.2.18 es muy conveniente ya que nos permite calcular directamente las energías y las funciones de onda del sistema. Una característica de la matriz \mathcal{H} (omitimos la dependencia en \mathbf{k} para simplificar notación) es que es hermitiana por lo que sus valores propios son números reales. Una propiedad de las matrices de este tipo es que siempre es posible encontrar una matriz unitaria \mathbf{U} tal que $\mathbf{U}^\dagger \mathcal{H} \mathbf{U} = \mathbf{D}$, donde \mathbf{U} es la matriz cuyas columnas son los eigenvectores de \mathcal{H} y \mathbf{D} es su correspondiente matriz de eigenvalores. En esta nueva representación, el hamiltoniano resultante es una matriz diagonal. Por lo que en la práctica y como mostraremos mas adelante, para estudiar los sistemas físicos en cuestión, es suficiente con diagonalizar la matriz \mathcal{H} .

2.2.2. Hamiltoniano de Bloch

En general, para un modelo n -dimensional, la primera zona de Brillouin, posee la topología de un toro, Fig. 2.4 (a), que llamamos toro de Brillouin y se define como $\mathbb{T}^n = \mathbb{R}^n / \Lambda$, con Λ la red recíproca. Así, los puntos en el toro se relacionan por la expresión $\mathbf{k} \sim \mathbf{k} + \mathbf{G}$, con $\mathbf{G} \in \Lambda$. En un modelo de $2m$ -bandas, con m bandas ocupadas y m bandas vacías, para cada $\mathbf{k} \in \mathbb{T}^n$, se asocia un hamiltoniano de Bloch $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ de tamaño $2m \times 2m$, que está definido sobre un espacio de Hilbert $H_{\mathbf{k}} \cong \mathbb{C}^{2m}$. Este conjunto de espacios forma un fibrado vectorial complejo sobre el toro de Brillouin, $\pi : H_{\mathbf{k}} \rightarrow \mathbb{T}^n$ [2, 65].

En el caso de grafeno y los modelos que trataremos en este trabajo $n = 2$, ya que son sistemas bidimensionales, y en concreto para el grafeno $m = 1$, por lo que tendremos dos bandas, una banda de conducción y una banda de valencia como se mostrará más adelante. El hamiltoniano de Bloch del grafeno puede escribirse como

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = -t \begin{pmatrix} 0 & \sum_{n=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_n} \\ \sum_{n=1}^3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_n} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2.20)$$

donde el signo negativo del término de salto es debido a que en general el potencial de interacción entre los orbitales atómicos es una interacción de Coulomb. Al convertir las exponenciales complejas en funciones trigonométricas obtenemos

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = -t \sum_{n=1}^3 \left[\begin{pmatrix} 0 & \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) \\ \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) \\ i \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) & 0 \end{pmatrix} \right]. \quad (2.2.21)$$

Al factorizar los términos del interior de las matrices, se nota que los elementos resultantes son las matrices de Pauli dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2.22)$$

por lo cual el hamiltoniano de Bloch se reescribe como

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = -t \left[\sum_{n=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) \sigma_x + \sum_{n=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_n) \sigma_y \right]. \quad (2.2.23)$$

Una manera conveniente de expresar el hamiltoniano anterior es escribiendo

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.2.24)$$

donde hemos definido $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) = (\Re\{f(\mathbf{k})\}, \Im\{f(\mathbf{k})\})$ y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ es el vector de las matrices de Pauli. El término $f(\mathbf{k})$ el factor de estructura geométrico definido en Ec. 2.2.15. Por otra parte, cabe mencionar que la Ec. 2.2.24 está expresada de esa forma por una razón fundamental. De hecho, cualquier matriz hermitiana 2×2 puede escribirse en esa forma debido a que las tres matrices de Pauli, junto con la identidad, forman una base del espacio vectorial de matrices hermitianas 2×2 . Es decir, cualquier matriz hermitiana 2×2 puede escribirse como una combinación lineal de estas cuatro matrices, con coeficientes complejos adecuados. En este sentido, la Ec. 2.2.24 representa una forma compacta de expresar una matriz hermitiana arbitraria.

En el hamiltoniano de Bloch, el vector $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})$ es de gran importancia para describir la topología de los modelos, como veremos más adelante. En particular para el hamiltoniano del grafeno, Ec. 2.2.23, podemos definir el vector unitario $\hat{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})/|\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})|$ que forma un mapeo del toro de Brillouin al círculo unitario, $\hat{\boldsymbol{\lambda}} : \mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{S}^1$, véase Fig. 2.4 (a). Podemos reescribir $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})$ en forma polar,

$$\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) = |f(\mathbf{k})| \begin{pmatrix} \cos \varphi(\mathbf{k}) \\ \sin \varphi(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.2.25)$$

donde

$$\tan \varphi(\mathbf{k}) = \frac{\Im\{f(\mathbf{k})\}}{\Re\{f(\mathbf{k})\}}. \quad (2.2.26)$$

Debemos notar que la fase no está bien definida en los puntos \mathbf{K}_{\pm} , como se muestra en la Fig. 2.4 (b), el campo vectorial en estos puntos diverge, por

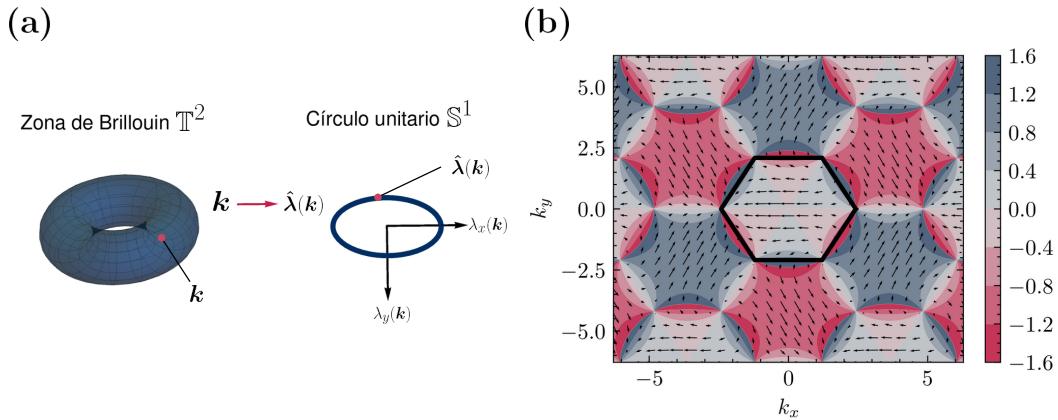


Figura 2.4 (a) Mapeo $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\lambda}(\mathbf{k}) = \lambda(\mathbf{k})/|\lambda(\mathbf{k})|$ entre el toro de Brillouin \mathbb{T}^2 , y el círculo unitario \mathbb{S}^1 . Cada punto en el círculo representa un pseudo-espinor del hamiltoniano de Bloch del grafeno. (b) Fase $\varphi(\mathbf{k})$ sobre la red recíproca, el hexágono negro respresenta la BZ y los vectores respresentan el campo vectorial $\lambda(\mathbf{k})$.

lo que estos puntos son evitados. La fase en la Ec. 2.2.26 tiene particular relevancia para predecir estados de borde en sistemas finitos, en lo que se llama correspondencia bulto-frontera [66].

A partir del hamiltoniano en Ec. 2.2.16, la ecuación de Schrödinger toma la forma matricial $\mathcal{H}(\mathbf{k}) |\psi(\mathbf{k})\rangle = E(\mathbf{k}) |\psi(\mathbf{k})\rangle$. En el apéndice A, hemos resuelto la ecuación de eigenvalor para un modelo general de dos bandas, por lo que la relación de dispersión está dada por

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \eta |f(\mathbf{k})|, \quad (2.2.27)$$

donde $\eta = \pm$ es un índice de bandas. Reemplazando el factor $f(\mathbf{k})$ y desarollando la expresión, la energía es

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \eta t \sqrt{3 + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + 2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + 2 \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)]}. \quad (2.2.28)$$

Expresando explícitamente los vectores \mathbf{k} , \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 , se obtiene que la relación de dispersión para el grafeno es

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \eta t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_x a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_y a\right)}. \quad (2.2.29)$$

En la Fig. 2.5 se muestra como las dos bandas π y π^* se tocan en las esquinas de la zona de Brillouin, por lo que $E_\eta(\mathbf{K}_\pm) = 0$, esto ocurre en el nivel de Fermi, lo cual permite que el grafeno sea un semimetal, tambien llamado "*Dirac semimetal*" en inglés. Cabe mencionar que la relación de dispersión 2.2.29 es la típicamente mostrada en la literatura. Finalmente, las funciones de onda o eigenestados para el grafeno, se pueden parametrizar en término del vector $\hat{\lambda}(\mathbf{k})$, estos es

$$|\psi_\eta(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta e^{i\varphi(\mathbf{k})} \end{pmatrix}. \quad (2.2.30)$$

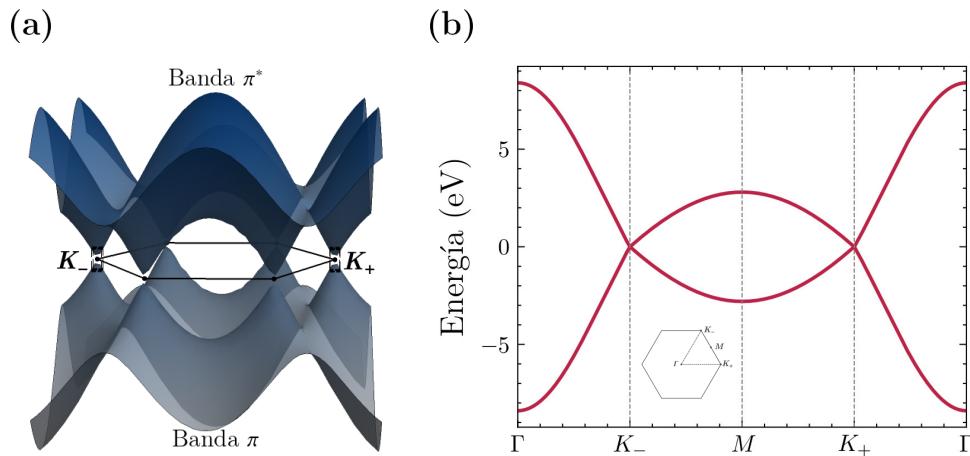


Figura 2.5 (a) Estructura de las bandas π del grafeno obtenidas a partir del modelo de amarre fuerte a primeros vecinos. En la ampliación se muestra la relación de dispersión lineal alrededor de uno de los puntos de Dirac. (b) Relación de dispersión 2.2.29 a través de un camino en la primera zona de Brillouin, con $t = 2.7$ eV.

donde $\eta = \pm$ es el índice de banda. Las funciones de onda en la forma 2.2.30 son conocidos como *pseudo-espinores*. La razón se debe a que el grafeno consiste de dos subredes A y B, que juntas forman la red de panal de abeja. De tal manera que, podemos ver a las dos subredes como dos grados de libertad, es decir, el electrón puede tener una probabilidad de estar en la subred A y una probabilidad de estar en la subred B. Así, esta base $\{|A\rangle, |B\rangle\}$ asemeja al caso de la partícula de espín-1/2, donde un electrón puede estar con espín hacia arriba $|\uparrow\rangle$, con espín hacia abajo $|\downarrow\rangle$, o cualquier superposición de estos. Por lo tanto, a la base que consiste en los grados de libertad de la subred se denomina pseudo-espín.

Una definición más precisa de pseudo-espín aparece en [67], donde definen pseudo-espín como una superposición coherente de dos estados cuánticos que se describen en términos de las matrices de Pauli, por ejemplo para espín-1/2 con $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. Sin embargo, es importante señalar que la naturaleza del pseudo-espín es una propiedad del material, como el caso del grafeno que se debe a la subred, y no es una propiedad intrínseca del portador de carga como lo es el espín.

2.3. Fermiones de Dirac sin masa

En la sección anterior, se describió el modelo general del grafeno, obteniendo su energía y sus correspondientes funciones de onda. Esto se hizo considerando toda la zona de Brillouin. Sin embargo, muchas de las propiedades físicas del grafeno y otros materiales relacionados se estudian en regiones de baja energía [68]. En el grafeno, podemos usar una aproximación para describir lo que

ocurre a bajas energías, lo que consiste en encontrar una expresión de la relación de dispersión para \mathbf{k} en la vecindad de los puntos \mathbf{K}_ξ . Aquí, se introduce el parámetro $\xi = \pm$ para denotar lo que se llama el índice de valle, que identifica las expresiones correspondientes a los puntos \mathbf{K}_+ y \mathbf{K}_- , respectivamente. En la Fig. 2.5, se observa cómo las bandas se tocan en dos puntos, y estos puntos corresponden a las esquinas de la BZ. Las regiones lejos de estos puntos corresponden a estados de alta energía.

A bajas energías, podemos expandir en serie de Taylor a primer orden el hamiltoniano en la Ec. 2.2.24 alrededor de los puntos \mathbf{K}_ξ , esto es

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) \approx \mathcal{H}(\mathbf{K}_\xi) + (\mathbf{k} - \mathbf{K}_\xi) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{H}(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_\xi} + \mathcal{O}(\mathbf{k}^2). \quad (2.3.1)$$

Nótese que el desarrollar en series de Taylor un hamiltoniano, o en general una matriz, es equivalente a escribir en series de Taylor cada uno de sus elementos. En el caso del grafeno, desarrollamos el término $f(\mathbf{k})$ hasta primer orden, así

$$f(\mathbf{k}) \approx f(\mathbf{K}_\xi) + (\mathbf{k} - \mathbf{K}_\xi) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}_\xi}. \quad (2.3.2)$$

Dado que $f(\mathbf{K}_\xi) = 0$, entonces la serie se reduce a

$$f_\xi(\mathbf{k}) = t(\mathbf{k} - \mathbf{K}_\xi) \cdot \left(\sum_{n=1}^3 i\delta_n e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_n} \right). \quad (2.3.3)$$

Resulta conveniente definir el vector $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}_\xi$, tal que

$$\begin{aligned} f_\xi(\mathbf{q}) &= t\mathbf{q} \cdot \left(\sum_{n=1}^3 i\delta_n e^{i\mathbf{K}_\pm \cdot \delta_n} \right) \\ &= \mathbf{q} \cdot it [\delta_1 e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_1} + \delta_2 e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_2} + \delta_3 e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_3}]. \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Dado que $f(\mathbf{K}_\pm) = 0$, entonces despejamos $e^{i\mathbf{K}_\pm \cdot \delta_3} = - (e^{i\mathbf{K}_\pm \cdot \delta_1} + e^{i\mathbf{K}_\pm \cdot \delta_2})$ y remplazando en la ecuación anterior, obtenemos

$$\begin{aligned} f_\pm(\mathbf{q}) &= \mathbf{q} \cdot it [\delta_1 e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_1} + \delta_2 e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_2} - \delta_3 (e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_1} + e^{-i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_2})] \\ &= \mathbf{q} \cdot it [(\delta_1 - \delta_3)e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_1} + (\delta_2 - \delta_3)e^{i\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_2}]. \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

Utilizando la definición de los vectores de la red, $\mathbf{a}_1 = \delta_1 - \delta_3$, $\mathbf{a}_2 = \delta_2 - \delta_3$ y sustituyendo los términos $\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_1 = \xi \frac{2\pi}{3}$, $\mathbf{K}_\xi \cdot \delta_2 = -\xi \frac{2\pi}{3}$, entonces la expansión nos queda como

$$f_\xi(\mathbf{q}) = \mathbf{q} \cdot it \left[\mathbf{a}_1 e^{\xi i \frac{2\pi}{3}} + \mathbf{a}_2 e^{-\xi i \frac{2\pi}{3}} \right]. \quad (2.3.6)$$

Por último, expresando la parte compleja en su representación algebraica obtenemos,

$$f_\xi(\mathbf{q}) = \hbar \frac{3t}{2a} (\xi q_x - q_y i), \quad (2.3.7)$$

así, se recupera el siguiente hamiltoniano a bajas energías,

$$\mathcal{H}_\xi(\mathbf{q}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \xi q_x - q_y i \\ \xi q_x + q_y i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3.8)$$

Un resultado muy importante en la ecuación anterior es la velocidad de Fermi [13], $v_F = 3ta/2\hbar \approx 10^6$ m/s la cual es independiente de la energía o del momento. Caso contrario ocurre con una partícula libre, donde la velocidad depende del momento y la masa efectiva del electrón.

Por otro lado, de igual forma que el hamiltoniano de Bloch $\mathcal{H}(\mathbf{k})$, el hamiltoniano a bajas energías puede ser expresado en término de las matrices de Pauli, esto es

$$\mathcal{H}_\xi(\mathbf{q}) = v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}_\xi, \quad (2.3.9)$$

donde $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q}$ es el momento relativo a los puntos \mathbf{K}_ξ , y $\boldsymbol{\sigma} = (\xi\sigma_x, \sigma_y)$. Mediante la ecuación de eigenvalor $\mathcal{H}_\xi(\mathbf{q})|\Psi_\xi(\mathbf{q})\rangle = E_\xi(\mathbf{q})|\Psi_\xi(\mathbf{q})\rangle$, la relación de dispersión bajas energías esta dada por

$$E_\eta(\mathbf{q}) = \eta\hbar v_F |\mathbf{q}|, \quad (2.3.10)$$

y las funciones de onda como

$$|\Psi_\eta^\xi(\mathbf{q})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta e^{i\xi\theta_q} \end{pmatrix}, \quad (2.3.11)$$

donde $\theta_q = \tan^{-1}(q_y/q_x)$ es el ángulo azimutal en el espacio de momento.

Por otro lado, a partir de la relación de dispersión en la ecuación 2.3.10, podría interpretarse una aparente contradicción con la definición de masa efectiva, la cual se define como:

$$m_{\text{eff}} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \right)^{-1} \quad (2.3.12)$$

Al aplicar esta definición a la relación de dispersión lineal que se obtiene, la masa efectiva diverge. Aunque, es importante tener en cuenta que la definición anterior solo es aplicable para partículas cuya relación de dispersión es parabólica, como una partícula libre no relativista, mientras que, en el caso del grafeno prístino, la relación de dispersión es lineal. Para solucionar esto, debemos redefinir la masa efectiva para casos no parabólicos. Recordemos que la definición del momento de una partícula está dada por:

$$p = \hbar k = m_{\text{eff}} v_g \quad (2.3.13)$$

donde v_g es la velocidad de grupo, definida como:

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} \quad (2.3.14)$$

Así, para el caso del grafeno a bajas energías, donde $k \rightarrow q$, podemos definir la masa efectiva:

$$m_{\text{eff}} = \hbar^2 q \left(\frac{\partial E(q)}{\partial q} \right)^{-1} \Rightarrow m_{\text{eff}}^\eta = \eta \frac{\hbar q}{v_F}, \quad (2.3.15)$$

donde η es el índice de valle y v_F es la velocidad de Fermi del grafeno. Para $q = 0$ ($\mathbf{k} = \mathbf{K}_\xi$), la masa efectiva es cero. Por lo tanto, alrededor de los puntos de Dirac, los electrones en el grafeno se comportan como partículas sin masa.

Es importante mencionar que la relación de dispersión en Ec. 2.3.10 es muy similar a la correspondiente a partículas ultrarelativistas, las cuales son descritas por un hamiltoniano de Dirac para fermiones sin masa [25]. Esto implica que en la vecindad de las seis esquinas de la primera zona de Brillouin, los electrones en el grafeno se comportan como fermiones relativistas sin masa, descritos por la ecuación de Dirac [12]. Esto último, es la razón del nombre de *puntos de Dirac* a los puntos K_+ y K_- .

No obstante, también podemos tener una análogo de la ecuación de Dirac completa, esto se obtiene considerando el valle \mathbf{K}_ξ como un grado de libertad. Ambos valles se tratan por separado y es completamente válido, pero también podemos compactar ambos valles en una sola expresión y reescribir el hamiltoniano completo a bajas energías como

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}_+ & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}_- \end{pmatrix}. \quad (2.3.16)$$

Este hamiltoniano describe a los electrones en grafeno a bajas energías y es bastante similar al hamiltoniano de Dirac, con la diferencia que la velocidad de Fermi es remplazada por la velocidad de la luz. Además, haciendo la analogía con la mecánica cuántica relativista, las matrices de Pauli en este caso no operan sobre el espín, sino sobre el grado de libertad asociado a las subredes A, B, y los valles \mathbf{K}_ξ , a esto se le llama pseudo-espín [67, 69]. Otra analogía es el índice de banda $\eta = \pm$, que denota el tipo de partícula, tal que un portador de carga en la banda de conducción (+) se comporta como partícula, mientras que uno en la banda de valencia (-) se comporta como antipartícula, comúnmente conocida como hueco.

Debido a las propiedades únicas del grafeno, en los últimos años se ha aumentado la búsqueda de otros sistemas en donde los electrones se comportan como fermiones de Dirac sin masa. Esta clase de sistemas, son conocidos como sistemas de Dirac, o materiales de Dirac [27].

2.4. Simetrías discretas del grafeno

En física, las simetrías juegan un papel fundamental debido al teorema de Noether, que establece una relación directa entre las simetrías y las cantidades conservadas [70]. Además, las simetrías son una herramienta importante para la clasificación de los fenómenos físicos, por ejemplo, en la teoría Landau-Ginzburg-Wilson la ruptura espontánea de simetrías es un referente para la clasificación de los diferentes estados de la materia [35, 36]. A partir de los años 80, con el descubrimiento de nuevas fases de la materia [38, 41, 48], conocidas actualmente como fases topológicas [71, 72], la topología y la geometría de

las funciones de onda se han convertido en una herramienta crucial para la clasificación de materiales [73, 74]. En estas fases, la presencia o ausencia de ciertas simetrías es fundamental para su clasificación [73–77].

Una simetría en un sistema físico es una propiedad que no cambia bajo una transformación, ya sea continua o discreta. En específico, en mecánica cuántica se dice que un hamiltoniano H posee una simetría representada por un operador unitario o anti-unitario \mathcal{U} si

$$\mathcal{U}H\mathcal{U}^\dagger = H, \quad \Rightarrow \quad [H, \mathcal{U}] = 0. \quad (2.4.1)$$

donde \mathcal{U} actúa en el espacio de Fock del sistema.

Los hamiltonianos de sistemas no interactuantes de $2m$ -bandas ($m = 1$ para grafeno), como los que hemos estado tratando, pueden escribirse en la base de Fourier como

$$H = \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \Psi_\mathbf{k}^\dagger \mathcal{H}(\mathbf{k}) \Psi_\mathbf{k}. \quad (2.4.2)$$

donde $\mathcal{H}(\mathbf{k}) \in \mathbb{C}^{2m \times 2m}$ y $\Psi_\mathbf{k} \in \mathbb{C}^{2m}$. Este tipo de hamiltonianos pueden clasificarse en base a la ausencia o presencia de tres simetrías: inversión temporal (\mathcal{T}), agujero-partícula (\mathcal{P}) y quiralidad (\mathcal{S}) [73, 74]. No obstante, también consideraremos la inversión espacial (\mathcal{I}), también llamada paridad, la cual es importante en la descripción física del grafeno.

A continuación describiremos las simetrías antes mencionadas y las condiciones necesarias que debe tener $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ para presentar dichas simetrías. En concreto, en el apéndice B se muestra el desarrollo para encontrar las condiciones que debe tener el vector $\lambda(\mathbf{k})$ de un hamiltoniano de dos bandas para presentar estas simetrías.

Simetría de inversión temporal

La simetría de inversión temporal es una propiedad fundamental de un sistema asociado con la invarianza del hamiltoniano con respecto a la transformación de inversión temporal, $\mathcal{T} : t \rightarrow -t$. En general \mathcal{T} puede expresarse como el producto de un operador unitario U_t y el operador complejo conjugado \mathcal{K} ,

$$\mathcal{T} = U_t \mathcal{K}, \quad (2.4.3)$$

donde $U_t^\dagger = U_t^{-1}$, por lo que \mathcal{T} es un operador anti-unitario. Al aplicar el operador dos veces debe dejar el sistema invariante, en consecuencia tenemos que $\mathcal{T}^2 = \pm 1$, donde $\mathcal{T}^2 = 1$ corresponde a fermiones sin espín y $\mathcal{T}^2 = -1$ para fermiones con espín.

Así, podemos aplicar la transformación de inversión temporal a los opera-

dores de campo, esto es

$$\begin{aligned}\mathcal{T}\Psi(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} [\mathcal{T}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathcal{T}^{-1}] [\mathcal{T}\Psi_{\mathbf{r}}\mathcal{T}^{-1}] \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [U_t\Psi_{\mathbf{r}}] \\ &= U_t\Psi_{-\mathbf{k}}.\end{aligned}\tag{2.4.4}$$

Por lo que, al aplicar a un hamiltoniano de fermiones sin espín expresado en el espacio- \mathbf{k} tenemos

$$\begin{aligned}\mathcal{T}H\mathcal{T}^{-1} &= \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} [\mathcal{T}\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}\mathcal{T}^{-1}] [\mathcal{T}\mathcal{H}(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1}] [\mathcal{T}\Psi_{\mathbf{k}}\mathcal{T}^{-1}] \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} [U_t^{\dagger}\mathcal{H}^*(-\mathbf{k})U_t]\Psi_{\mathbf{k}}.\end{aligned}\tag{2.4.5}$$

Por lo tanto el hamiltoniano es invariante bajo inversión temporal si se cumple que

$$[H, \mathcal{T}] = 0, \quad \Rightarrow \quad U_t^{\dagger}\mathcal{H}^*(-\mathbf{k})U_t = \mathcal{H}(\mathbf{k}),\tag{2.4.6}$$

esto implica que $\mathcal{H}^*(\mathbf{k}) = \mathcal{H}(-\mathbf{k})$.

En el grafeno prístino se satisface la simetría de inversión temporal, como muestra el apéndice B, un hamiltoniano de dos bandas como el de grafeno prístino, es invariante ante inversión temporal si

$$\lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}) \quad \text{y} \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}).\tag{2.4.7}$$

Esto de forma evidente se cumple en grafeno prístino, Ec. 2.2.25, porque $\lambda_x(\mathbf{k}) = \mathbb{R}\text{e}\{f(\mathbf{k})\}$ es función par, mientras que $\lambda_y(\mathbf{k}) = \mathbb{I}\text{m}\{f(\mathbf{k})\}$ es función impar, por lo que se cumplen las condiciones anteriores.

Simetría agujero-partícula

Otra simetría que juega un rol importante es la simetría de agujero-partícula, o llamada conjugación de carga en física de altas energías, que expresa la simetría entre partículas y anti-partículas. En la física de la materia condensada, la simetría agujero-partícula surge como simetría entre electrones, estados ocupados, y huecos, estados vacíos. El operador agujero-partícula \mathcal{P} , al igual que el operador de inversión temporal, es un operador anti-unitario, por lo que puede ser escrito como

$$\mathcal{P} = U_c\mathcal{K}\tag{2.4.8}$$

donde $U_c^{\dagger} = U_c^{-1}$. Además $\mathcal{P}^2 = \pm 1$, donde comúnmente $\mathcal{P}^2 = -1$ aparece en hamiltonianos de Bogoliubov-Gennes en superconductores [73].

La conjugación de carga de un electrón de momento \mathbf{k} en la banda de conducción es un hueco de momento $-\mathbf{k}$ en la banda de valencia. Al aplicar el operador \mathcal{P} a los operadores de campo, tenemos que

$$\mathcal{P}\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}\mathcal{P}^{-1} = U_c\Psi_{-\mathbf{k}}\tag{2.4.9}$$

Entonces al aplicar a un hamiltoniano en el espacio-**k** obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{P}H\mathcal{P}^{-1} &= \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} [\mathcal{P}\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}\mathcal{P}^{-1}][\mathcal{P}\mathcal{H}(\mathbf{k})\mathcal{P}^{-1}][\mathcal{P}\Psi_{\mathbf{k}}\mathcal{P}^{-1}] \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} [U_c\Psi_{-\mathbf{k}}][\mathcal{H}^*(\mathbf{k})][U_c^*\Psi_{-\mathbf{k}}^{\dagger}] \\ &= - \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}[U_c^*\mathcal{H}^*(-\mathbf{k})U_c]\Psi_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

Por lo tanto el hamiltoniano tiene simetría agujero-partícula si se cumple que

$$[H, \mathcal{T}] = 0, \quad \Rightarrow \quad U_c^*\mathcal{H}^*(-\mathbf{k})U_c = -\mathcal{H}(\mathbf{k}), \quad (2.4.11)$$

donde para un hamiltoniano de dos bandas, $U_c = \sigma_z$, entonces la condición es $\sigma_z\mathcal{H}^*(\mathbf{k})\sigma_z = -\mathcal{H}(-\mathbf{k})$.

En el caso de grafeno prístico se satisface la simetría agujero-partícula, un hamiltoniano de dos bandas es invariante agujero-partícula si

$$\lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}) \quad \text{y} \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}). \quad (2.4.12)$$

Se mencionó anteriormente, en grafeno prístico $\lambda_x(\mathbf{k}) = \Re\{f(\mathbf{k})\}$ y $\lambda_y(\mathbf{k}) = \Im\{f(\mathbf{k})\}$ son funciones par e impar respectivamente, por lo que cumplen las condiciones anteriores.

Simetría quiral

Cuando el hamiltoniano tiene tanto simetría de inversión temporal como simetría agujero-partícula, el producto $\mathcal{S} = \mathcal{T} \cdot \mathcal{P}$ se conoce como operador quiral. Este operador actúa sobre el operador de campo como

$$\mathcal{S}\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}\mathcal{S}^{-1} = U_s\Psi_{\mathbf{k}} \quad (2.4.13)$$

donde $U_s = U_cU_t$. Combinando las condiciones de inversión temporal y agujero-partícula se obtiene que el hamiltoniano es invariante si,

$$U_s^*\mathcal{H}(\mathbf{k})U_s = -\mathcal{H}(\mathbf{k}), \quad \Rightarrow \quad \{\mathcal{H}(\mathbf{k}), U_s\} = 0 \quad (2.4.14)$$

En el caso del grafeno prístico, es evidente que la simetría quiral está presente porque los elementos $\lambda_0(\mathbf{k}) = 0$ y $\lambda_z(\mathbf{k}) = 0$. La ausencia de este último elemento trae consigo consecuencias importantes, como veremos más adelante.

Simetría de inversión espacial

La transformación de inversión espacial o transformación de paridad es el operador unitario U_I que actúa como $\mathcal{I} : \mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, esto implica también revertir

el momento. Al aplicar dos veces el operador devuelve la configuración inicial, $\mathcal{I}^2 = 1$.

Sobre los operadores de campo, este operador actúa de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\mathcal{I}\Psi_{\mathbf{k}}\mathcal{I}^{-1} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} [\mathcal{I}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathcal{I}^{-1}][\mathcal{I}\Psi_{\mathbf{r}}\mathcal{I}^{-1}] \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} [U_I\Psi_{\mathbf{r}}] \\ &= U_I\Psi_{-\mathbf{k}}.\end{aligned}\tag{2.4.15}$$

Y al aplicar el operador a un hamiltoniano en el espacio de momentos, entonces

$$\begin{aligned}\mathcal{I}H\mathcal{I}^{-1} &= \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} [\mathcal{I}\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger\mathcal{I}^{-1}][\mathcal{I}\mathcal{H}(\mathbf{k})\mathcal{I}^{-1}][\mathcal{I}\Psi_{\mathbf{k}}\mathcal{I}^{-1}] \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger[U_I^\dagger\mathcal{H}(-\mathbf{k})U_I]\Psi_{\mathbf{k}}.\end{aligned}\tag{2.4.16}$$

Así, el hamiltoniano es invariante bajo inversión espacial si se cumple que

$$[H, \mathcal{T}] = 0, \quad \Rightarrow \quad U_I^\dagger\mathcal{H}(-\mathbf{k})U_I = \mathcal{H}(\mathbf{k}),\tag{2.4.17}$$

donde para un hamiltoniano de dos bandas, $U_c = \sigma_x$, entonces la condición es $\sigma_x\mathcal{H}(\mathbf{k})\sigma_x = \mathcal{H}(-\mathbf{k})$.

La simetría de inversión espacial se cumple en grafeno prístino, un hamiltoniano de dos bandas es invariante espacial si

$$\lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}) \quad \text{y} \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}).\tag{2.4.18}$$

Y sabemos que en ese caso si se cumple, ya que $\lambda_x(\mathbf{k})$ y $\lambda_y(\mathbf{k})$ son funciones par e impar respectivamente. Además, es fácil notar que esto se cumple porque aplicar el operador de inversión espacial al grafeno es equivalente a intercambiar los sitios A y B. Dado que ambos sitios son idénticos, entonces esta simetría se preserva.

2.4.1. Protección de los puntos de Dirac

En esta sección, mostraremos con simples argumentos de simetría cómo es que la degeneración de las bandas de grafeno en los conos de Dirac existe de forma natural. Consideraremos un modelo de dos bandas y supongamos que modificamos el hamiltoniano que las origina para determinar lo que ocurre con la degeneración. Para nuestro sistema, hay al menos cuatro posibles cambios relacionados con las combinaciones de matrices de Pauli $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ y la matriz identidad σ_0 .

Si modificamos el hamiltoniano agregándole múltiplos de la matriz identidad, esto sería equivalente a introducir energías de sitio, lo que daría como resultado un desplazamiento uniforme de las bandas en el eje de energías. Por

otro lado, las matrices σ_x y σ_y desplazarán las bandas de tal manera que la degeneración se mueva a otro punto en la primera zona de Brillouin. Solamente el término σ_z rompe la degeneración y separaría las bandas en los puntos de Dirac. Sin embargo, en el caso del grafeno prístino, la presencia de simetrías de inversión y de tiempo prohíben la aparición de este término.

Para demostrar lo anterior, consideremos el siguiente hamiltoniano de 2×2 (véase apéndice A) dado por

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.4.19)$$

donde $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) = \{\lambda_x(\mathbf{k}), \lambda_y(\mathbf{k}), \lambda_z(\mathbf{k})\}$ y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de Pauli. La condición de simetría de inversión sobre el vector $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})$ se expresa como

$$\lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}), \quad \lambda_z(\mathbf{k}) = -\lambda_z(-\mathbf{k}), \quad (2.4.20)$$

que sabemos se satisface en el grafeno prístino debido a que podemos intercambiar los sitios A y B. Por otra parte, la inversión temporal tiene como condición que

$$\lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}), \quad \lambda_z(\mathbf{k}) = \lambda_z(-\mathbf{k}), \quad (2.4.21)$$

que también se satisface en grafeno prístino por que podemos movernos de un cono de Dirac a otro sin cambios. Al considerar la combinación de ambas simetrías, $\mathcal{T}\mathcal{I}$, entonces viene dada por

$$\lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = \lambda_y(\mathbf{k}), \quad \lambda_z(-\mathbf{k}) = -\lambda_z(-\mathbf{k}). \quad (2.4.22)$$

Por lo tanto, la única manera que esto se cumpla es que $\lambda_z(\mathbf{k}) = 0$ para toda \mathbf{k} . Es decir, la existencia de ambas simetrías, inversión temporal e inversión espacial, hacen que el término $\lambda_z(\mathbf{k})$ sea cero y por tanto prohíben que el término σ_z se encuentre. Este es un resultado fundamental en la física del grafeno. Ya que nos indica que si logramos encontrar un mecanismo físico que introduzca un término σ_z en el hamiltoniano, entonces podríamos convertir el grafeno en un aislante o un semiconductor. Un mecanismo de este tipo se desarrolla en la siguiente sección.

3

Modelos topológicos en grafeno

3.1. Grafeno con masa

En el capítulo anterior se demostró que la simetría de $\mathcal{T}\mathcal{I}$ (la cual combina la inversión temporal \mathcal{T} y la inversión espacial \mathcal{I}) protege la brecha de energía en un sistema prístino. Una manera sencilla de abrir una brecha de energía en una red hexagonal es mediante la introducción de energías de sitio m y $-m$ en los sitios A y B, respectivamente. Un ejemplo de material descrito por esta red es el nitruro de boro hexagonal (h-BN)[78], el cual está compuesto por átomos de nitrógeno y boro organizados en una estructura de panal de abeja. La diferencia en las energías de sitio entre los sitios atómicos genera una brecha de energía de aproximadamente ~ 6 eV[79], convirtiendo a este material en un aislante. Un efecto similar se puede lograr al colocar grafeno sobre un sustrato [80–82].

Asumiendo la misma configuración de orbitales que en grafeno prístino en Ec. 2.2.6, pero considerando diferentes energías de sitio $\varepsilon_A = m$ y $\varepsilon_B = -m$, tenemos que

$$H = m \sum_i a_i^\dagger a_i - m \sum_j b_j^\dagger b_j - t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i). \quad (3.1.1)$$

El índice i recorre la subred A, es decir los sitios $\mathbf{r} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$, con $n, m \in \mathbb{Z}$ y el índice j recorre los primeros vecinos δ_n , con $n = 1, 2, 3$, de cada sitio A. En términos de estos nuevos índices el hamiltoniano toma la forma

$$\begin{aligned} H &= m \sum_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}} - m \sum_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}+\delta_3}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta_3} - t \sum_{\mathbf{r}} \sum_{n=1}^3 a_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta_n} + \text{H.c.}, \\ &= m \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}} - b_{\mathbf{r}+\delta_3}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta_3}) - t \sum_{\mathbf{r}} \sum_{n=1}^3 a_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta_n} + \text{H.c..} \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

donde $m \neq 0$. Para $m = 0$ se recupera el hamiltoniano del grafeno prístino. Además, es conveniente señalar que los operadores de creación y aniquilación

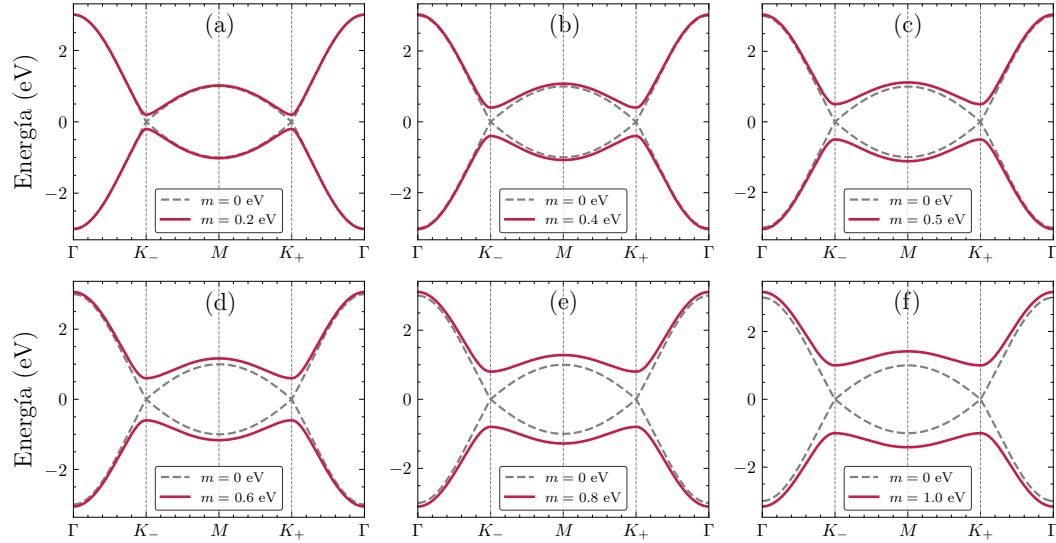


Figura 3.1 Estructura de bandas electrónicas del grafeno con masa. Las líneas sólidas rojas corresponden al caso donde $m \neq 0$ y las líneas punteadas grises corresponden al caso $m = 0$ eV, en ambos casos se considera el término de salto $t = 1$ eV.

correspondientes a los sitios B en las energías de sitio solamente depende de los sitios $\mathbf{r} + \delta_3$ y no de los sitios $\mathbf{r} + \delta_n$, esto se hace para evitar un doble conteo.

Repetimos el mismo proceso que en grafeno prístino para expresar el hamiltoniano en el espacio- \mathbf{k} , por lo cual

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k}} [a_{\mathbf{k}}^\dagger m a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}^\dagger m b_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger f(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger f^\dagger(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}], \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^\dagger & b_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m & f(\mathbf{k}) \\ f^\dagger(\mathbf{k}) & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

es el hamiltoniano en la base de espinores. Por lo que la matriz a diagonalizar se reescribe como

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} m & f(\mathbf{k}) \\ f^\dagger(\mathbf{k}) & -m \end{pmatrix}. \quad (3.1.4)$$

A diferencia del grafeno prístino tenemos las energías de sitio distintas de cero y con signos opuestos, esto implica que debemos agregar una matriz σ_z , esto es

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.1.5)$$

donde el vector $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) = (\operatorname{Re} f(\mathbf{k}), \operatorname{Im} f(\mathbf{k}), m) \in \mathbb{R}^3 - \{0\}$ y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las tres matrices de Pauli. Nótese que en la ecuación anterior, el término matricial σ_z ha cambiado las simetrías del sistema prístino. Por ejemplo, es muy sencillo demostrar que la inversión temporal, Ec. 2.4.21, se preserva. Por otro lado, si analizamos la simetría de inversión espacial, Ec. 2.4.20,

encontramos que las igualdades

$$\lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}), \quad \lambda_z(\mathbf{k}) = -\lambda_z(-\mathbf{k}), \quad (3.1.6)$$

no se cumplen simultáneamente, ya que el término $\lambda_z(\mathbf{k}) = m$, es constante. De esta manera, la presencia de un término σ_z produce una ruptura de la inversión espacial, y como consecuencia, aparece una brecha de energía en los puntos de Dirac tal como se muestra en la Fig. 3.1.

Por otra parte, la estructura electrónica de bandas se recupera al resolver el problema de eigenvalores. La relación de dispersión para este sistema es de la forma

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \eta |\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})| = \eta \sqrt{m^2 + |f(\mathbf{k})|^2}, \quad (3.1.7)$$

y sus correspondientes eigenvectores (o valores propios),

$$|\Psi_\eta(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\mathbf{k})(\lambda(\mathbf{k}) + \eta m)}} \begin{pmatrix} m + \eta\lambda(\mathbf{k}) \\ f(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.1.8)$$

donde $\lambda(\mathbf{k}) = |\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})|$ y $\eta = \pm$ es el índice de banda, donde cada signo, \pm , indica si la banda es de valencia o conducción. Si remplazamos el factor $f(\mathbf{k})$ en la Ec. 3.1.7 y desarrollamos la expresión, la relación de dispersión se transforma en

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \eta \sqrt{m^2 + t^2[3 + 2\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + 2\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + 2\cos(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))]} \quad (3.1.9)$$

También podemos escribir la energía expresando de manera explícita el vector $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, esto es

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \eta \sqrt{m^2 + t^2 \left[3 + 2\cos\left(\sqrt{3}k_x a\right) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right)\cos\left(\frac{3}{2}k_y a\right) \right]}. \quad (3.1.10)$$

En la ecuación anterior, si observamos lo que ocurre en los puntos de Dirac, es claro que la energía no se anula como en el sistema pristino. Por lo tanto, tendremos una brecha de energía determinada por

$$\Delta E(\mathbf{K}_\xi) = E_+(\mathbf{K}_\xi) - E_-(\mathbf{K}_\xi) = 2|m|. \quad (3.1.11)$$

En la Fig. 3.1 se muestra la relación de dispersión para diferentes valores de m , se observa que las bandas se separan en los puntos de Dirac al modificar el valor de m . En esta situación, se dice que los electrones adquieren una *masa*, debido al término σ_z , que modifica la relación de dispersión alrededor de los puntos de Dirac.

3.1.1. Singularidades y transiciones continuas

Si existen puntos de degeneración, es posible la aparición de singularidades en la definición de los eigenestados, indicando así la no trivialidad del fibrado

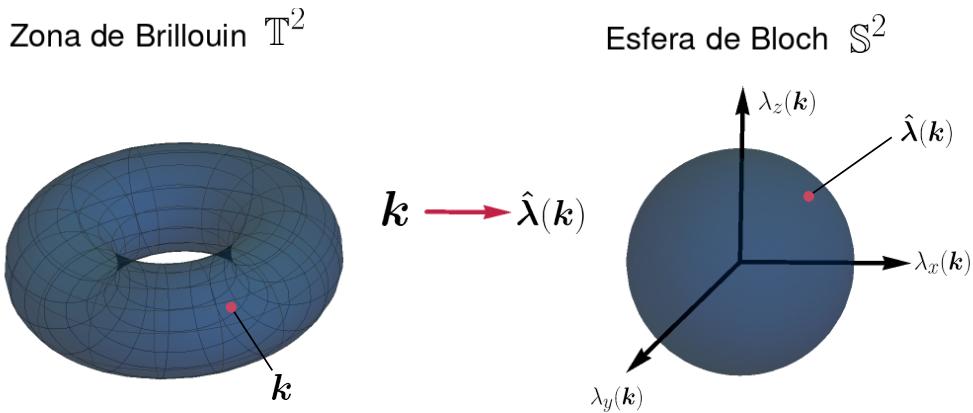


Figura 3.2 Mapeo $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\lambda}(\mathbf{k}) = \lambda(\mathbf{k})/|\lambda(\mathbf{k})|$ entre el toro de Brillouin \mathbb{T}^2 , y la esfera de Bloch \mathbb{S}^2 . Cada punto en la esfera de Bloch representa un pseudo-espinor del hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{k})$. Adaptada de [2]

vectorial. Esto afecta a la fase de las funciones de onda, provocando que el sistema presente transiciones de fase topológicas [44].

Los eigenestados mostrados en la Ec. 3.1.8 son singulares siempre que $\lambda(\mathbf{k}) = -\eta m$. En los puntos de Dirac, tenemos que $\lambda(\mathbf{K}_\xi) = |m|$, por lo que si $m < 0$ el eigenestado asociado a la banda de conducción ($\eta = +$) es singular, mientras que si $m > 0$ el eigenestado asociado a la banda de valencia ($\eta = -$) también es singular. Para tratar estas singulares, primero debemos definir el vector $\hat{\lambda}(\mathbf{k}) = \lambda(\mathbf{k})/\lambda(\mathbf{k})$ y expresarlo en coordenadas esféricas, es decir

$$\hat{\lambda}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \sin \theta_{\mathbf{k}} \sin \varphi_{\mathbf{k}} \\ \sin \theta_{\mathbf{k}} \cos \varphi_{\mathbf{k}} \\ \cos \theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (3.1.12)$$

con

$$\theta_{\mathbf{k}} = \arccos \left(\frac{\lambda_z(\mathbf{k})}{\lambda(\mathbf{k})} \right) \quad \text{y} \quad \varphi_{\mathbf{k}} = \arctan \left(\frac{\lambda_y(\mathbf{k})}{\lambda_x(\mathbf{k})} \right), \quad (3.1.13)$$

Así, podemos expresar los pseudo-espinores parametrizados por el vector $\hat{\lambda}$,

$$|\psi_+(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad |\psi_-(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (3.1.14)$$

El vector $\hat{\lambda}$ hace un mapeo del toro de Brillouin \mathbb{T}^2 a la esfera unitaria \mathbb{S}^2 , o esfera de Bloch [65]. Como se muestra en la Fig. 3.2, para cada \mathbf{k} existe un punto $\hat{\lambda}(\mathbf{k})$ en la esfera de Bloch que parametriza a un pseudo-espinor del hamiltoniano $\mathcal{H}(\mathbf{k})$. Por lo tanto, no podemos definir los eigenestados de manera continua en la esfera de Bloch. Esto es equivalente a decir que, en analogía al teorema de la bola peluda [83], es imposible definir un fibrado vectorial continuo que cubra toda la esfera [65].

Sin embargo, podemos proceder a definir dos eigenestados para cada banda, uno que cubra el hemisferio norte de la esfera U_N y otro que cubra el hemisferio sur de la esfera U_S [65, 84], esto se debe a que las singularidades se presentan con el cambio de signo de m , aunque en general es fácil observar que se presentan con el cambio de signo de la componente $\lambda_z(\mathbf{k})$, siempre que $\lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_y(\mathbf{k}) = 0$. En el límite cuando $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{K}_\xi$ tenemos que $\theta_{\mathbf{k}} \rightarrow \pi$ si $m < 0$ y $\theta_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ si $m > 0$, por lo tanto, los eigenestados son

$$\begin{aligned} |\psi_+(\mathbf{K}_\xi)\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} & \text{y} & |\psi_-(\mathbf{K}_\xi)\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \text{si } m < 0, \\ |\psi_+(\mathbf{K}_\xi)\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \text{y} & |\psi_-(\mathbf{K}_\xi)\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, & \text{si } m > 0, \end{aligned} \quad (3.1.15)$$

donde $\varphi_{\mathbf{k}}$ es una fase mal definida. Esto quiere decir que el $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{K}_\xi} \varphi_{\mathbf{k}}$ no existe y por tanto $\mathbf{k} = \mathbf{K}_\xi$ es una singularidad. Mediante una serie de Laurent es posible demostrar $\mathbf{k} = \mathbf{K}_\xi$ es una singularidad irremovible.

Es conveniente realizar una transformación gauge, que básicamente es multiplicar por una fase $e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}$ los eigenestados de una manera adecuada, evitando tener singularidades y definiendo los eigenestados para toda la zona de Brillouin. De modo que se recupera lo siguiente

$$\begin{aligned} |\psi_+^N(\mathbf{k})\rangle &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} & \text{y} & |\psi_+^S(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix}, \\ |\psi_-^N(\mathbf{k})\rangle &= \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix} & \text{y} & |\psi_-^S(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

donde los índices N y S corresponde al hemisferio U_N y U_S respectivamente.

Con base en la forma de los eigenestados de Ec. 3.1.16, podemos definir la función de transición $f_t = e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}$ que permite movernos entre los hemisferios realizando un cambio de fase en el ecuador ($\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\pi}{2}$), mediante las siguientes relaciones

$$|\psi_+^N(\mathbf{k})\rangle = f_t |\psi_+^S(\mathbf{k})\rangle \quad \text{y} \quad |\psi_-^S(\mathbf{k})\rangle = f_t |\psi_-^N(\mathbf{k})\rangle. \quad (3.1.17)$$

La imposibilidad de definir los estados propios (eigenestados) de manera continua en toda la esfera de Bloch, indica la no trivialidad del fibrado vectorial $\mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$. De tal manera que, para describir un fibrado vectorial, se requieren dos trivializaciones: U_N y U_S . El cambio de una trivialización a otra se acompaña de una fase no dinámica, que en este caso se conoce como función de transición f_t . En el modelo de grafeno con masa, la función de transición implica un cambio de signo de m , lo que resulta en un punto donde se cierra la brecha de energía. Este cierre está íntimamente relacionado con una transición de fase topológica [2, 85]. Para este modelo solo podemos encontrarnos en una de las trivializaciones debido a que el término de masa es constante. No obstante, tal como se mostrará más adelante, en otros sistemas mas complejos el cierre y la apertura de la brecha de energía va acompañada de una transición entre fases de diferente naturaleza.

3.1.2. Fermiones de Dirac con masa

Para el estudio a bajas energías en grafeno con masa, se procede de manera similar al tratamiento utilizado para grafeno prístino en el capítulo anterior. El hamiltoniano del grafeno con masa, difiere por la matriz $m\sigma_z$, con respecto al del grafeno prístino,

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^\dagger(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & -m \end{pmatrix}, \\ &= \mathcal{H}_G(\mathbf{k}) + \mathcal{H}_m,\end{aligned}\quad (3.1.18)$$

donde $\mathcal{H}_G(\mathbf{k})$ es el hamiltoniano de grafeno prístino, Ec. 2.2.24 y $\mathcal{H}_m = m\sigma_z$. Dado que \mathcal{H}_m es una matriz constante, al realizar la expansión en serie de Taylor a primer orden en la ecuación anterior, Ec. 2.3.2, obtenemos el siguiente hamiltoniano a bajas energías

$$\mathcal{H}_\xi(\mathbf{p}) = v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}_\xi + m\sigma_z, \quad (3.1.19)$$

donde $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{K}_\xi)$ es el momento relativo a los punto \mathbf{K}_ξ y $\boldsymbol{\sigma}_\xi = (\xi\sigma_x, \sigma_y)$. Resolviendo la ecuación de eigenvalor, la relación de dispersión lineal a bajas energías es

$$E_\eta^\xi(\mathbf{q}) = \eta \sqrt{\hbar^2 v_F^2 |\mathbf{q}|^2 + m^2} \quad (3.1.20)$$

y sus correspondientes funciones de onda,

$$|\psi_\eta^\xi(\mathbf{q})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda^\xi(\mathbf{q})}} \begin{pmatrix} e^{-i\xi\varphi_\mathbf{q}/2} \sqrt{\lambda^\xi(\mathbf{q}) + \eta m} \\ \eta e^{i\xi\varphi_\mathbf{q}/2} \sqrt{\lambda^\xi(\mathbf{q}) - \eta m} \end{pmatrix}, \quad (3.1.21)$$

donde $2\lambda^\xi(\mathbf{q}) = E_+^\xi(\mathbf{q}) - E_-^\xi(\mathbf{q})$ y $\varphi_\mathbf{q} = \tan^{-1}(q_y/q_x)$ es el ángulo azimutal en el espacio de momento. Por otro lado, aplicando la Ec. 2.3.15 a la relación de dispersión Ec. 3.1.20, podemos encontrar la masa efectiva en este sistema, esto es

$$m_{\text{eff}} = \frac{\sqrt{\hbar^2 v_F^2 q^2 + m^2}}{v_F^2}. \quad (3.1.22)$$

Para $q = 0$ ($\mathbf{k} = \mathbf{K}_\xi$) la masa efectiva está dada como

$$m_{\text{eff}} = \frac{|m|}{v_F^2}. \quad (3.1.23)$$

A diferencia del grafeno prístino, en este modelo encontramos que alrededor de los puntos de Dirac los electrones se comportan como partículas relativistas masivas. En base a esta analogía, tenemos que m juega el rol de energía de reposo y por lo tanto m_{eff} es la masa en reposo. Sustituyendo en la relación de dispersión tenemos que

$$E_\eta^\xi(\mathbf{q}) = \eta \sqrt{\hbar^2 v_F^2 |\mathbf{q}|^2 + m_{\text{eff}}^2 v_F^4}. \quad (3.1.24)$$

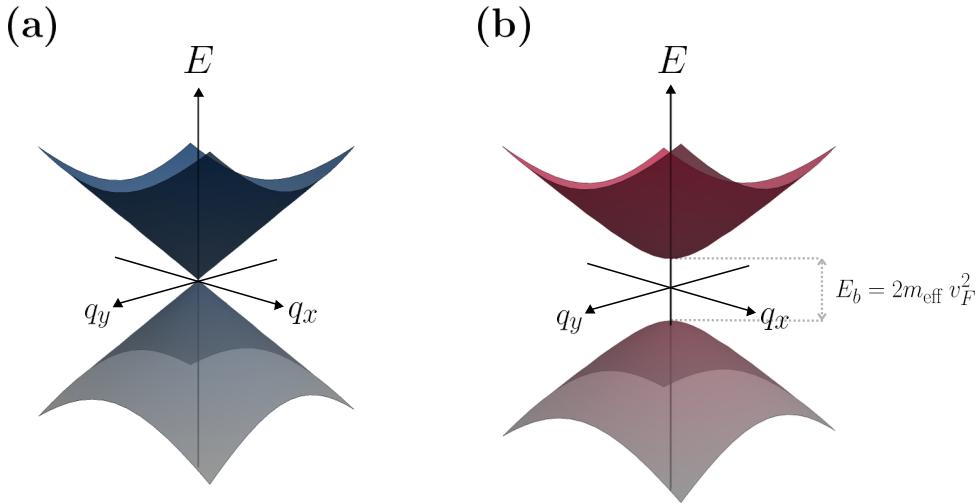


Figura 3.3 (a) Estructura de bandas de grafeno prístico alrededor de los puntos de Dirac, donde los electrones se comportan como partículas sin masa y por tanto no hay una brecha de energía. (b) Estructura de bandas de grafeno con masa alrededor de los puntos de Dirac, donde la masa que adquieren los electrones provoca una brecha de energía.

Así, la relación de dispersión anterior, que describe a los portadores de carga a bajas energías, es un análogo al correspondiente de partículas relativistas con masa. Esto justifica el nombre de *grafeno con masa*.

En un trabajo alterno, Hunt y colaboradores mostraron que al colocar grafeno sobre un sustrato de nitruro de boro hexagonal (h-BN), las propiedades electrónicas del grafeno eran modificadas. Encontraron que el sustrato induce un término de masa y una brecha de energía de ~ 30 meV [86]. Por lo tanto, si los electrones desarrollan una masa, entonces esto implica la existencia de una brecha de energía (véase Fig. 3.3), dada por

$$E_b = 2|m| = 2m_{\text{eff}} v_F^2. \quad (3.1.25)$$

De acuerdo con nuestra analogía con partículas relativistas en el hamiltoniano de Dirac del grafeno, esta energía es la necesaria para crear un electrón y un hueco (partícula y antipartícula) [85].

Por último, es posible modificar el hamiltoniano de Dirac, Ec. 3.1.19, tal que, en lugar de la masa ordinaria, se introduce un término m_ξ dependiente del valle,

$$\mathcal{H}_\xi(\mathbf{p}) = v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}_\xi + m_\xi \sigma_z. \quad (3.1.26)$$

Lo anterior permite tener un control sobre las simetrías del sistema, tal que términos de masa distintas, $m_+ \neq m_-$, da como consecuencia el rompimiento de la simetría de inversión temporal. En esta representación, dependiendo del valor de la masa en cada valle y entre valles podemos romper la simetría de inversión, la simetría de inversión temporal o ambas. El término m_ξ se puede justificar de varias maneras, tal como veremos en la siguiente sección.

3.2. Modelo de Haldane

La resistencia Hall es un fenómeno que ocurre cuando un material conductor se encuentra bajo la influencia de un campo magnético externo aplicado en una dirección perpendicular al plano donde se encuentra el material. La interacción de los electrones en movimiento con el campo magnético produce una deflexión perpendicular a su dirección original, debido a la fuerza de Lorentz. Esto tiene como efecto la aparición de una corriente conocida como corriente Hall, que se comporta linealmente con la intensidad del campo magnético.

En 1980, Von Klitzing y sus colaboradores descubrieron una nueva forma de resistencia Hall conocida como el efecto Hall cuántico entero (IQHE). En vez de la típica resistencia lineal, la resistencia Hall presentaba una conductividad escalonada, y se encontró que la posición de los escalones coincidía con un valor de conductividad múltiplo de valores enteros [38]. En 1982, Thouless, Kohmto, Nightingale y Nijs (TKNN) demostraron que este número entero estaba asociado con un invariante topológico llamado primer número de Chern [41]. Este número se relaciona intrínsecamente con los estados de borde en materiales finitos, lo que dio lugar al surgimiento de los aislantes topológicos, los cuales son materiales finitos caracterizados por ser aislantes en el bullo y conductores en los bordes.

El modelo TKNN requiere la presencia de un campo magnético perpendicular, sin embargo, en 1988, F.D. Haldane propuso un modelo en una red de grafeno similar a este modelo, pero que rompía ambas simetrías de inversión espacial y temporal sin necesidad de un campo magnético externo [48, 87]. Para comenzar, Haldane considera el modelo de grafeno con masa, que para entonces por el trabajo de Semenoff [78] se sabía que poseía una brecha de energía. Para romper la inversión temporal, en vez de introducir directamente un campo magnético, Haldane encontró que era suficiente añadir una fase compleja no dependiente del momento \mathbf{k} . En el contexto de la aproximación de amarre fuerte, es suficiente con introducir una fase a los parámetros de salto, denominada fase de Peierls [88] y está dada por

$$t_{ij} \rightarrow t_{ij} e^{i \frac{e}{\hbar} \phi_{ij}}, \quad \text{donde} \quad \phi_{ij} = \int_i^j \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}, \quad (3.2.1)$$

donde $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ el vector potencial. La idea de Haldane es introducir al grafeno con masa un flujo magnético a través del vector potencial, de tal manera que el campo magnético efectivo en el sistema se anule. Esto se logra si consideramos que el flujo magnético a través de una celda unitaria sea cero. Esto implica tener un hamiltoniano de la forma

$$H = m \sum_i a_i^\dagger a_i - m \sum_j b_j^\dagger b_j - \left[t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger b_j + t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} e^{i\nu_{ij}\phi} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j) + \text{H.c.} \right], \quad (3.2.2)$$

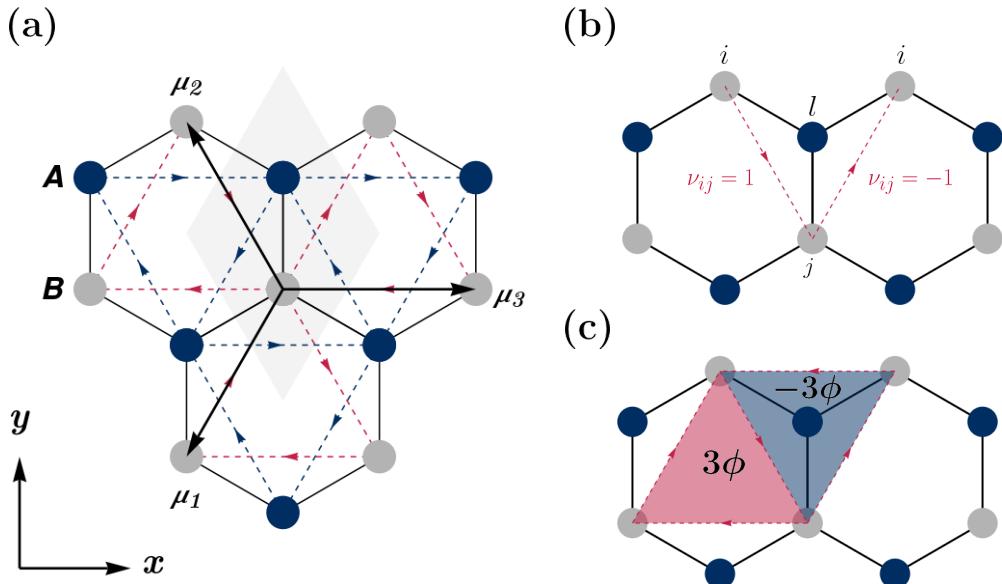


Figura 3.4 (a) Patrón de saltos definido por Haldane. Las flechas (rojas y azules) circulan en el sentido de las agujas del reloj alrededor del centro de cada hexágono de átomos de carbono. Los vectores $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ y \mathbf{b}_3 conectan cada sitio A (o B) con sus segundos vecinos. (b) Definición del índice ν_{ij} que corresponde al signo de la fase. (c) Representación de celda unitaria (paralelogramo) con los saltos a segundos vecinos (flechas rojas). El flujo global a través de dicha celda unitaria es cero.

donde $t' \neq 0$ es el parámetro de salto a segundos vecinos, ϕ es la fase de Aharonov–Bohm que adquieren los electrones [65, 89]. El índice ν_{ij} se define conforme al patrón de saltos seleccionados¹, Fig. 3.4 (a), esto es

$$\nu_{ij} = \frac{\boldsymbol{\delta}_{lj} \times \boldsymbol{\delta}_{il}}{|\boldsymbol{\delta}_{lj} \times \boldsymbol{\delta}_{il}|} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z \quad (3.2.3)$$

donde l es el primer vecino común del sitio i y del sitio j . En la Fig. 3.4 (b) se muestra un ejemplo, donde tenemos que $\boldsymbol{\delta}_{lj} = \boldsymbol{\delta}_3$, mientras que $\boldsymbol{\delta}_{il} = -\boldsymbol{\delta}_2$ para el sitio de la izquierda y $\boldsymbol{\delta}_{il} = -\boldsymbol{\delta}_1$ para el sitio de la derecha. En esta situación, el término de Haldane es la interacción a segundos vecinos de tal manera que el salto entre ellos implica un cambio de fase. Este cambio de fase es tal que la contribución de ambas subredes al flujo total interno sea cero, Fig. 3.4 (c).

El vector potencial puede relacionarse, mediante las ecuaciones de Maxwell, con un campo magnético interno, por lo que a este tipo de campos se les conoce como *campos pseudo-magnéticos*. Análogamente a la definición hecha de pseudo-espinor en la sección 2.3, podemos definir un campo pseudo-magnético como una cantidad que provoca en los portadores de carga un comportamiento

¹De forma sencilla, este índice es negativo a favor de las manecillas del reloj y positivo en caso contrario.

similar al que ocasiona un campo magnético. Por ejemplo, un campo pseudo-magnético aparece en las deformaciones de redes cristalinas mediante tensiones uniformes [90–92].

En la Ec. 3.2.2 la interacción a segundo vecinos solamente es entre átomos de la misma subred y los vectores que conectan estos sitios están dados por

$$\boldsymbol{\mu}_1 = \boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_3, \quad \boldsymbol{\mu}_2 = \boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_1, \quad \boldsymbol{\mu}_3 = \boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2. \quad (3.2.4)$$

que se pueden expresar de forma más general como $\boldsymbol{\mu}_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}(\boldsymbol{\delta}_j - \boldsymbol{\delta}_k)$, con $i = 1, 2, 3$ y ε_{ijk} el tensor de Levi-Civita. Como mencionamos antes, los saltos a segundos vecinos son definidos por un patrón en específico, como se muestra en la Fig. 3.4. Por lo tanto, el modelo de Haldane está dado como

$$H = m \sum_{\mathbf{r}_A} a_{\mathbf{r}_A}^\dagger a_{\mathbf{r}_A} - m \sum_{\mathbf{r}_B} b_{\mathbf{r}_B}^\dagger b_{\mathbf{r}_B} - t \sum_{\mathbf{r}_A} \sum_{n=1}^3 (a_{\mathbf{r}_A}^\dagger b_{\mathbf{r}_A + \boldsymbol{\delta}_n} + b_{\mathbf{r}_A + \boldsymbol{\delta}_n}^\dagger a_{\mathbf{r}_A}) - t' \left[\sum_{n=1}^3 \left(\sum_{\mathbf{r}_A} a_{\mathbf{r}_A}^\dagger a_{\mathbf{r}_A + \boldsymbol{\mu}_n} e^{i\phi} + \sum_{\mathbf{r}_B} b_{\mathbf{r}_B}^\dagger b_{\mathbf{r}_B + \boldsymbol{\mu}_n} e^{-i\phi} \right) + \text{H.c.} \right]. \quad (3.2.5)$$

donde la fase ϕ la restringimos al intervalo $[-\pi, \pi]$ y donde $\mathbf{r}_A \equiv \mathbf{r}$ y $\mathbf{r}_B = \mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}_3$ corresponden a la posición de los sitios A y B respectivamente. Procedemos como en las secciones anteriores para obtener el hamiltoniano en el espacio- \mathbf{k} dado por,

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ a_{\mathbf{k}}^\dagger m a_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}^\dagger m b_{\mathbf{k}} + \left[a_{\mathbf{k}}^\dagger f(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger h(\mathbf{k}) e^{i\phi} a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger h(\mathbf{k}) e^{-i\phi} b_{\mathbf{k}} + \text{H.c.} \right] \right\}, \quad (3.2.6)$$

donde para simplificar hemos definimos el factor de estructura a segundos vecinos

$$h(\mathbf{k}) = -t' \sum_{n=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n}. \quad (3.2.7)$$

Así, en forma matricial el hamiltoniano se escribe como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^\dagger & b_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi} h(\mathbf{k}) + e^{-i\phi} h^\dagger(\mathbf{k}) + m & f(\mathbf{k}) \\ f^\dagger(\mathbf{k}) & e^{-i\phi} h(\mathbf{k}) + e^{i\phi} h^\dagger(\mathbf{k}) - m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^\dagger \\ b_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3.2.8)$$

En los elementos que componen la diagonal de la matriz, es fácil observar que los términos que dependen de ϕ se pueden reescribir como la parte real de un número complejo. Por lo que el hamiltoniano de Bloch para el modelo de Haldane es

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 2\Re(e^{i\phi} h(\mathbf{k})) + m & f(\mathbf{k}) \\ f^\dagger(\mathbf{k}) & 2\Re(e^{-i\phi} h(\mathbf{k})) - m \end{pmatrix}. \quad (3.2.9)$$

La ecuación anterior se puede escribir como una suma de la forma,

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \mathcal{H}_G(\mathbf{k}) + \mathcal{H}_m(\mathbf{k}) + \mathcal{H}_\phi(\mathbf{k}), \quad (3.2.10)$$

donde $\mathcal{H}_G(\mathbf{k})$ es el hamiltoniano de Bloch del grafeno prístino, $\mathcal{H}_m(\mathbf{k}) = m\sigma_z$ es el término de masa y $\mathcal{H}_\phi(\mathbf{k}) = 2\operatorname{Re}\{\operatorname{diag}(e^{i\phi}h(\mathbf{k}), e^{-i\phi}h(\mathbf{k}))\}$ es la matriz que contiene la fase de Haldane.

Por otra parte, al igual que en los modelos anteriores, resulta conveniente escribir el hamiltoniano de Bloch como una combinación lineal de las matrices de Pauli, para eso debemos reescribir $\mathcal{H}_\phi(\mathbf{k})$. Primero observemos que

$$\operatorname{Re}(e^{\pm i\phi}h(\mathbf{k})) = \operatorname{Re}\left(-t' \sum_{n=1}^3 e^{i(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n \pm \phi)}\right) = -t' \sum_{n=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n \pm \phi), \quad (3.2.11)$$

y aplicando la identidad trigonométrica de sumas de ángulos para el coseno, la matriz \mathcal{H}_ϕ puede ser escrita en término de las matrices de Pauli, así

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\phi(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} -2t' \sum_{n=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n + \phi) & 0 \\ 0 & -2t' \sum_{n=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n - \phi) \end{pmatrix} \\ &= -2t' \cos \phi \sum_{n=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + 2t' \sin \phi \sum_{n=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= -2t' \cos \phi \sum_{n=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n) \mathbb{I}_{2 \times 2} + 2t' \sin \phi \sum_{n=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_n) \sigma_z, \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

donde $\mathbb{I}_{2 \times 2}$ es la matriz identidad de dimensión 2×2 . Por lo tanto, se recupera el siguiente hamiltoniano de Bloch para el modelo de Haldane

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \lambda_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.2.13)$$

donde $\sigma_0 = \mathbb{I}_{2 \times 2}$ es la matriz identidad, $\lambda_0 = -2t' \cos \phi \operatorname{Re}\{h(\mathbf{k})\}$ y $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) = (\operatorname{Re}\{f(\mathbf{k})\}, \operatorname{Im}\{f(\mathbf{k})\}, m + 2t' \sin \phi \operatorname{Im}\{h(\mathbf{k})\})$.

Al igual que con los dos modelos anteriores, la estructura electrónica de bandas se recupera al resolver el problema de eigenvalores. Entonces, se encuentra que la relación de dispersión para el modelo de Haldane es

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \lambda_0(\mathbf{k}) + \eta \lambda(\mathbf{k}), \quad (3.2.14)$$

y las eigenfunciones son

$$|\Psi_\eta(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\mathbf{k})(\lambda(\mathbf{k}) + \eta\lambda_z(\mathbf{k}))}} \begin{pmatrix} \lambda_z(\mathbf{k}) + \eta\lambda(\mathbf{k}) \\ \lambda_x(\mathbf{k}) + i\lambda_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (3.2.15)$$

Un aspecto interesante a notar es que, la estructura de bandas en el modelo de Haldane contiene el término $\lambda_0(\mathbf{k})$, a diferencia del grafeno prístino y del grafeno con masa que no lo contienen. No obstante, este término no se encuentra en las eigenfunciones, por lo que nuestra descripción del fibrado vectorial $\mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$ sigue siendo válido para el modelo de Haldane.

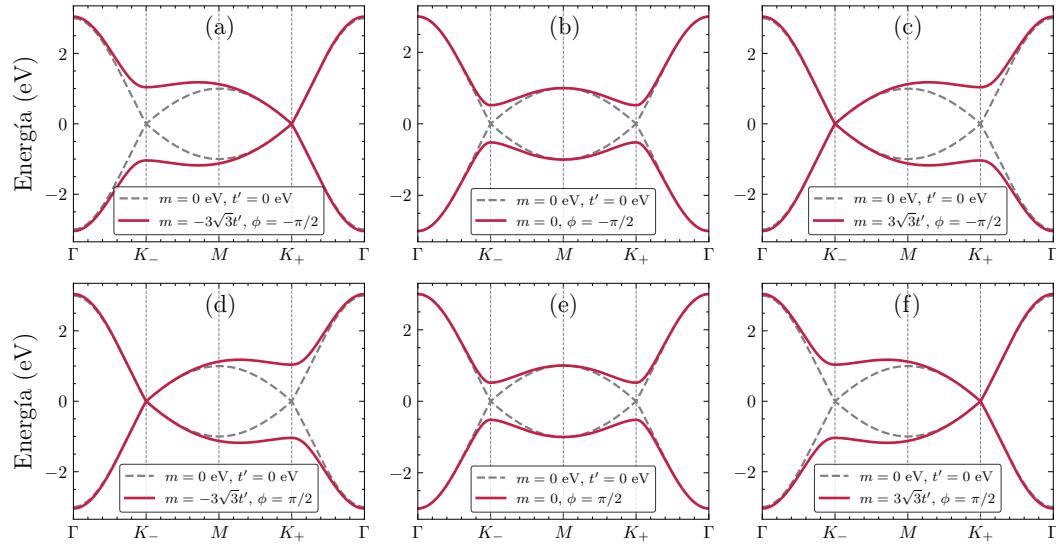


Figura 3.5 Estructura de bandas electrónicas del modelo de Haldane. Las líneas sólidas rojas corresponden al caso donde $t' = 0.1$ eV para varios valores de $m = \{-3\sqrt{3}t', 0, 3\sqrt{3}t'\}$ y un par de valores de $\phi = \{-\pi/2, \pi/2\}$. Las líneas punteadas grises corresponden al caso donde $t' = 0$ eV, $m = 0$ eV y para cualquier valor de ϕ . En ambos casos se considera que el término de salto $t = 1$ eV.

Por otro lado, tanto en grafeno prístino como en grafeno con masa, la brecha de energía se cierra y abre en ambos puntos \mathbf{K}_ξ . Sin embargo, en el modelo de Haldane no ocurre lo mismo, la brecha de energía evaluada en los puntos de Dirac es

$$\Delta E(\mathbf{K}_\xi) = 2|m - \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi|. \quad (3.2.16)$$

Esta expresión depende del sign($m - \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$), que a su vez depende del parámetro de masa m y la fase ϕ . Por lo que, tenemos tres casos de análisis:

- $m = \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: La brecha de energía se cierra en este caso, no obstante esto no ocurre a la vez para ambos valles, por lo que mientras en un valle la brecha está cerrada en el otro estará abierta.
- $|m| < \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: La brecha de energía se mantiene abierta, mientras esto se cumpla habrá una transición de apertura y cierre entre ambos valles. (véase Fig. 3.5).
- $|m| > \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: Nuevamente la brecha de energía se mantiene abierta sin importar el signo de m , de hecho, si $|m| \gg \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$, se recupera el modelo de grafeno con masa.

En la Fig. 3.5 se muestra la estructura de bandas del modelo de Haldane, en específico se muestran los primeros dos casos antes mencionados, mientras que el último caso es similar a lo antes visto de grafeno con masa, Fig. 3.1. Además, podemos observar que si fijamos la fase ϕ y se varía m , la brecha se va cerrando

en un valle mientras en el otro se abre, pero nunca se cierra en ambos valles a la vez.

Por otra parte, similar al modelo de grafeno con masa, es adecuado expresar el vector $\hat{\lambda}(\mathbf{k})$ en coordenadas esféricas y por tanto escribir los eigenestados como

$$|\psi_+(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad |\psi_-(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}. \quad (3.2.17)$$

donde ahora los eigenestados están parametrizados sobre la esfera de Bloch (véase Fig. (3.2)). Debemos recordar que los eigenestados no están bien definidos en toda la esfera de Bloch. En el límite cuando $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{K}_\xi$ tenemos que

$$\begin{aligned} \lambda_z(\mathbf{K}_\xi) &= m - \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi < 0, & \Rightarrow & \theta_{\mathbf{k}} = 0 \\ \lambda_z(\mathbf{K}_\xi) &= m - \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi > 0, & \Rightarrow & \theta_{\mathbf{k}} = \pi \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

y para simplificar definimos

$$m_H^\xi = m - \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi, \quad (3.2.19)$$

como *masa de Haldane*. Por lo que en el límite los eigenestados son

$$\begin{aligned} |\psi_+(\mathbf{K}_\xi)\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad |\psi_-(\mathbf{K}_\xi)\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \text{si } m_H^\xi < 0, \\ |\psi_+(\mathbf{K}_\xi)\rangle &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad |\psi_-(\mathbf{K}_\xi)\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, & \text{si } m_H^\xi > 0, \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

donde $\varphi_{\mathbf{k}}$ es una fase mal definida. Tal como se describió en la sección anterior, esto quiere decir que el $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{K}_\xi} \varphi_{\mathbf{k}}$ no existe y por tanto $\mathbf{k} = \mathbf{K}_\xi$ es una singularidad. Por lo tanto, nuevamente es conveniente multiplicar por una fase $f_t = e^{i\varphi_{\mathbf{k}}}$, tal que

$$\begin{aligned} |\psi_+^N(\mathbf{k})\rangle &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad |\psi_+^S(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix}, \\ |\psi_-^N(\mathbf{k})\rangle &= \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad |\psi_-^S(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \cos \frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.2.21)$$

son como los eigenestados (Ec. 3.1.16) antes definidos para grafeno con masa. El cambio de una trivialización a otra se acompaña de una fase no dinámica, que llamamos función de transición f_t . No obstante, recordemos que en grafeno con masa únicamente nos podemos encontrar en una de las trivializaciones, ya que el signo de m no cambia al recorrer la zona de Brillouin. Pero en el modelo de Haldane tenemos que la masa $m_H^\xi \equiv m_H^\xi(m, \phi)$, puede cambiar de signo, por lo que tendremos los siguientes casos de estudio:

- $m = \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: Caso crítico, tenemos que $\theta_{\mathbf{k}} = \pi/2$, porque $m_H^\xi = 0$. Por lo que nos encontramos en la frontera de las trivializaciones, y es donde la brecha de energía se cierra en alguno de los valles.

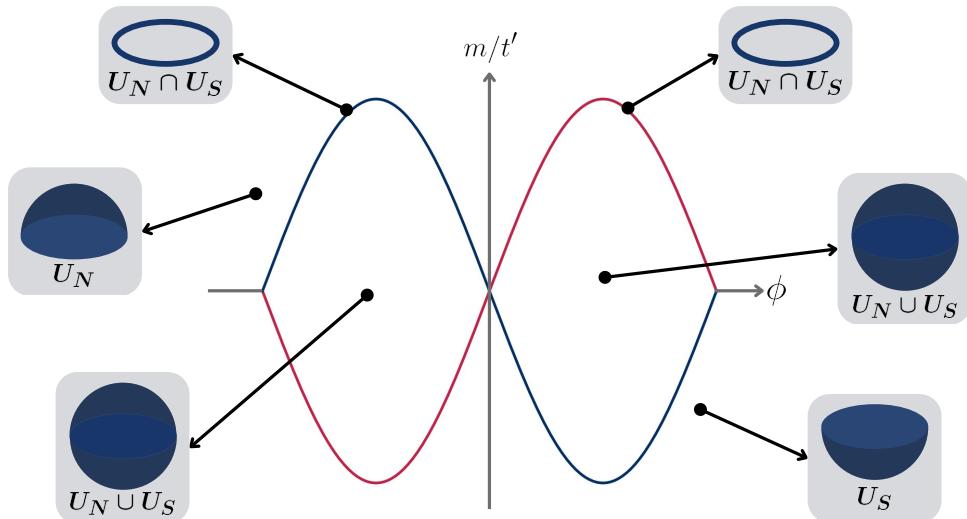


Figura 3.6 Representación del diagrama de fase del modelo de Haldane, considerando como parámetro la masa de Haldane m_H^ξ . Se ilustra para cada zona las trivializaciones a considerar para el fibrado vectorial. En el caso de las zonas cerradas el fibrado vectorial es no trivial. Las líneas roja y azul corresponden a los casos $m_H^+ = 0$ y $m_H^- = 0$ respectivamente.

- $|m| < \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: La masa de Haldane cambia de signo al recorrer la zona de Brillouin, por lo que es necesario la definición 3.2.21. En este caso habrá una transición de abertura y cierre entre ambos valles.
- $|m| > \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: En este caso a pesar que la brecha de energía se mantiene abierta, no hay cambio de signo de m_H^ξ y solo nos encontraremos en una de las trivializaciones, como en grafeno con masa.

En la Fig. 3.6 se muestra el diagrama de fase para el modelo de Haldane, donde la masa de Haldane, Ec. 3.2.19, es el parámetro que caracteriza las diferentes fases. Se ilustran las diferentes zonas de los casos antes mencionados, y es importante observar que las zonas encerradas por las líneas son donde el fibrado vectorial es no trivial, ya que al recorrer la zona de Brillouin se añadirá la fase f_t .

3.2.1. Aproximación a bajas energías

De forma similar al grafeno prístico y grafeno con masa, podemos realizar la aproximación a bajas energías para el modelo de Haldane, y describir el comportamiento electrónico en la vecindad de los puntos \mathbf{K}_ξ . Como mencionamos anteriormente, el hamiltoniano de Bloch del modelo de Haldane puede escribirse como en Ec. 3.2.10, por lo que al expandir en serie de Taylor esto resulta en expandir cada término, sin embargo ya conocemos la expansión de $\mathcal{H}_G(\mathbf{k})$ y $\mathcal{H}_m(\mathbf{k})$, entonces únicamente restaría expandir en serie $\mathcal{H}_\phi(\mathbf{k})$, esto es

$$\mathcal{H}_\phi(\mathbf{k}) \approx \mathcal{H}_\phi(\mathbf{K}_\xi) + (\mathbf{k} - \mathbf{K}_\xi) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_\phi(\mathbf{k})|_{\mathbf{K}_\xi}, \quad (3.2.22)$$

donde $\xi = \pm$ es el índice de valle. Así, al evaluar en \mathbf{K}_ξ , obtenemos

$$\mathcal{H}_\phi(\mathbf{K}_\xi) = 3t' \cos \phi \sigma_0 - \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi \sigma_z. \quad (3.2.23)$$

Mientras que al tomar el gradiente de $\mathcal{H}_\phi(\mathbf{k})$ y evaluar en los puntos \mathbf{K}_ξ se tiene que $\nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_\phi(\mathbf{k})|_{\mathbf{K}_\xi} = 0$. Por lo tanto, sumando todos los términos se recupera el siguiente hamiltoniano a bajas energías para el modelo de Haldane,

$$\mathcal{H}_\xi(\mathbf{q}) = \varepsilon_\phi \sigma_0 + v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + m_H^\xi \sigma_z, \quad (3.2.24)$$

donde $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{K}_\xi)$ es el momento relativo a los punto \mathbf{K}_ξ , $\boldsymbol{\sigma}_\xi = (\xi \sigma_x, \sigma_y)$, m_H^ξ es la masa de Haldane antes definida y $\varepsilon_\phi = 3t' \cos \phi$ es una energía asociada a un desplazamiento de energía. Resolviendo la ecuación de eigenvalor $\mathcal{H}_\xi(\mathbf{q}) |\psi_\xi(\mathbf{q})\rangle = E_\xi(\mathbf{q}) |\psi_\xi(\mathbf{q})\rangle$, la relación de dispersión lineal a bajas energías es

$$E_\eta^\xi(\mathbf{q}) = \varepsilon_\phi + \eta \sqrt{\hbar^2 v_F^2 |\mathbf{q}| + (m_H^\xi)^2}, \quad (3.2.25)$$

y las funciones de onda son

$$|\psi_\eta^\xi(\mathbf{q})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda^\xi(\mathbf{q})}} \begin{pmatrix} e^{-i\xi\varphi_{\mathbf{q}}/2} \sqrt{\lambda^\xi(\mathbf{q}) + \eta m_H^\xi} \\ \eta e^{i\xi\varphi_{\mathbf{q}}/2} \sqrt{\lambda^\xi(\mathbf{q}) - \eta m_H^\xi} \end{pmatrix} \quad (3.2.26)$$

donde $2\lambda^\xi(\mathbf{q}) = E_+^\xi(\mathbf{q}) - E_-^\xi(\mathbf{q})$ y $\varphi_{\mathbf{q}} = \tan^{-1}(q_y/q_x)$ es el ángulo azimutal en el espacio de momento.

Nuevamente la relación de dispersión Ec. 3.2.25 que describe a los portadores de carga a bajas energías, es un análogo al correspondiente de partículas relativistas con masa, con diferencia de un desplazamiento de energía. En contra parte al grafeno con masa, en el modelo de Haldane los electrones se comportan como fermiones de Dirac masivos con una masa m_H^ξ dependiente del valle. Se ha encontrado que es posible simular este sistema y generar una brecha energética en cada valle agregando al grafeno pristino una textura de espín en la estructura cristalina del sistema [93], pero también por la combinación de incidencia de luz circularmente polarizada [94].

3.2.2. Más allá del modelo de Haldane

Es importante mencionar que el modelo de Haldane no se apreció plenamente en la época que Haldane publicó su trabajo, porque el grafeno se consideraba un material puramente teórico e imposible de obtener [7]. Además, de que los términos de ruptura temporal implicados en el modelo de Haldane eran lo que los físicos llaman modelo de juguete (o *toy model* en inglés) los cuales son modelos muy simplificados que suelen utilizarse para explicar ciertas propiedades físicas de los materiales. No obstante, el modelo de Haldane se ha logrado realizar en algunos materiales de materia condensada y en sistemas de

átomos fríos [95–97]. El modelo de Haldane fue el primer ejemplo de lo que se conoce como aislante de Chern.

En 2005 los trabajos de C.L. Kane y E.J. Mele [49, 98] llevaron a un renacimiento del interés en el modelo de Haldane. Kane y Mele proponen una variante del modelo de Haldane en la que la topología no trivial surge de la simetría de inversión temporal, que se conserva por un término de espín-órbita [98], dicho modelo se conoce como modelo de Kane-Mele. A grandes rasgos, la interacción espín-órbita da como resultado dos copias del modelo de Haldane en donde las corrientes en los bordes no son de carga eléctrica, sino de espín. Por esta razón, este efecto se denomina efecto Hall cuántico de espín (*QHS* por sus siglas en inglés). Este modelo es considerado el primer ejemplo de los aislantes topológicos.

Sin embargo, la propuesta de Kane y Mele de un aislante topológico con inversión temporal en el grafeno no es realizable debido a que la interacción espín-órbita es débil [99–102] y por tanto la brecha de energía es pequeña [49, 71], del orden de 10^{-3} meV [103]. Por ello fué necesario considerar materiales con una fuerte interacción espín-órbita. En 2006, Bernevig, Hughes y Zhang realizan un desarrollo teórico del efecto Hall cuántico de espín en el pozo de potencial formado en un semiconductor de tipo III de HgTe-CdTe [103]. En 2007, el efecto se detecta experimentalmente [104].

4

Propiedades topológicas del grafeno

4.1. Teoría geométrica de bandas

Como se mencionó en el capítulo 2, la clasificación de las distintas fases de la materia es un tema central en la física de la materia condensada. Esta clasificación fue introducida por Félix Bloch con el famoso teorema que lleva su nombre [34]. El teorema de Bloch resulta fundamental en la física del estado sólido ya que implica que los electrones en los cristales periódicos están dispuestos en una estructura de bandas, indexados por su cuasi-momento $\hbar\mathbf{k}$ en la zona de Brillouin. Dependiendo de la forma de la estructura de bandas, se puede obtener una clasificación de los materiales que es bien conocida: metales, semiconductores y aislantes. Por otra parte, la teoría de Landau-Ginzburg-Wilson de las transiciones de fase [35–37] se basa en un mecanismo de ruptura de simetría para dar lugar a una clasificación. Por ejemplo, la superconductividad se caracteriza por la ruptura de la simetría gauge $U(1)$ [105, 106].

Sin embargo, todo esto cambió con el descubrimiento de nuevas fases de la materia, como los aislantes topológicos, donde se encontró que existen materiales que pueden presentar conductividad en su superficie o bordes, pero ser aislantes en su interior. En estos materiales, la conductividad está protegida por algo llamado simetría topológica, lo que significa que es robusta frente a ciertas perturbaciones, como la presencia de impurezas o defectos en la estructura cristalina [38, 41, 48]. Hoy en día, estas fases son conocidas como *fases topológicas*, y abren paso a una teoría moderna de bandas donde la geometría y la topología de las funciones de onda son la base para la clasificación de los materiales [73, 74]. Estas fases se presentan en materiales exóticos llamados materiales topológicos, tales como aislantes topológicos [71], semimetales de Dirac y de Weyl [107], y superconductores topológicos [108].

En esta sección, nos centramos en los aislantes topológicos, que poseen una estructura de bandas análoga a la de los aislantes, pero con la diferencia de que exhiben una conductividad no nula. Además, estos materiales cuentan con un número cuántico topológico que está caracterizado por el hamiltoniano

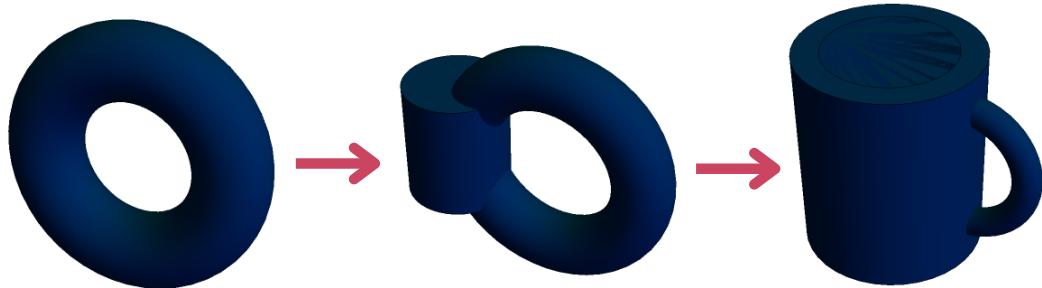


Figura 4.1 Existe una homotopía entre un toro y una taza, por lo que podemos deformar continuamente uno y obtener el otro. Además ambas superficies están caracterizadas por un invariante topológico, en este caso es el género $g = 1$, es decir el número de huecos de la superficie.

del sistema. Este número es intrínseco y se caracteriza por ser invariante bajo deformaciones continuas del sistema, lo que se conoce formalmente como *invariante topológico*.

Para comprender la descripción anterior, consideremos dos sistemas A y B con hamiltonianos respectivos H_A y H_B . Decimos que H_A y H_B son equivalentes si es posible deformar continuamente H_A y obtener H_B , manteniendo invariantes las simetrías del sistema. Matemáticamente, esto es equivalente a decir que existe una función $f(t)$ con $0 \leq t \leq 1$, tal que $f(0) = H_A$ y $f(1) = H_B$ ¹. Si H_A y H_B son equivalentes, entonces se distinguen por un invariante topológico (véase Ref. [84]). Por ejemplo, como se muestra en la Fig. 4.1, la superficie de un toro se distingue topológicamente por su género g , el número de huecos, en este caso $g = 1$; por esa razón, una taza que posee un hueco, es equivalente topológicamente a un toro. Aunque, esto no ocurre con una esfera, ya que el genero es $g = 0$, por lo que no es posible deformar un toro y obtener una esfera (o viceversa).

En los sistemas de materia condensada, el invariante topológico está codificado en las propiedades geométricas del sistema, más precisamente en el *tensor geométrico cuántico*, compuesto de la métrica cuántica y de la curvatura de Berry [45–47]. En el caso de los sistemas abordados en este trabajo, el invariante topológico es el número de Chern, que como veremos es la integral de la curvatura de Berry sobre la zona de Brillouin.

4.1.1. Fase y curvatura de Berry

En mecánica cuántica, una fase geométrica es una fase que un sistema adquiere al recorrer adiabáticamente un ciclo en el espacio de parámetros del hamiltoniano. Este fenómeno fue ignorado durante mucho tiempo, ya que se pensaba que esta fase podía ser despreciada mediante una transformación gau-

¹La función $f(t)$ se define como un homotopía. Si dos objetos se relacionan por una homotopía, entonces estos objetos son homeomorfos y se distinguen por un invariante topológico.

ge. Sin embargo, en 1984 Michael Berry ofreció una elegante interpretación geométrica de esta fase, hoy en día conocida como fase de Berry [47]. La fase de Berry también es conocida como fase de Berry-Pancharatnam, porque fue generalizada por Berry pero anteriormente había sido descrita por S. Pancharatnam en óptica clásica [109]. Muchos años antes, H. C. Longuet-Higgins y colaboradores habían descrito un fenómeno similar en física molecular [110]. A continuación, se introducirá el concepto de la fase de Berry y su asociación con la conexión y curvatura de Berry.

Consideremos un sistema descrito por un hamiltoniano $\mathcal{H}(\boldsymbol{\kappa})$, que depende del tiempo a través de un conjunto de parámetros $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_n)$. El espectro de energía $E_\alpha(\boldsymbol{\kappa})$ y los eigenestados $|\psi_\alpha(\boldsymbol{\kappa})\rangle$ pueden obtenerse resolviendo la ecuación de eigenvalor

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\kappa}) |\psi_\alpha(\boldsymbol{\kappa})\rangle = E_\alpha(\boldsymbol{\kappa}) |\psi_\alpha(\boldsymbol{\kappa})\rangle, \quad (4.1.1)$$

donde $\alpha = 1, 2, \dots, n$ y $E_\alpha(\boldsymbol{\kappa})$ es un nivel de energía no degenerado del sistema. Si variamos adiabáticamente los parámetros $\boldsymbol{\kappa}(t)$ alrededor de un circuito, por el teorema adiabático tendremos que el sistema regresará a su estado inicial pero la fase habrá cambiado [111, 112], así el eigenestado a tiempo t estaría dado por

$$|\Psi(\boldsymbol{\kappa}(t))\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_\alpha(\boldsymbol{\kappa}(t')) dt'} e^{i\gamma_\alpha(t)} |\psi_\alpha(\boldsymbol{\kappa}(0))\rangle, \quad (4.1.2)$$

donde el primer término en el producto de exponentiales es la fase dinámica. El segundo término es la llamada la fase de Berry [47, 113] y está definida como

$$\gamma^\alpha(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_\mu^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) d\kappa^\mu, \quad (4.1.3)$$

donde hemos utilizando la convención de sumas de Einstein. \mathcal{C} es el camino trazado en el espacio de parámetros y $\mathcal{A}_\mu^\alpha(\boldsymbol{\kappa})$ es conocida como la conexión de Berry, que se define como

$$\mathcal{A}_\mu^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) = i \langle \psi^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) | \partial_\mu \psi^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) \rangle. \quad (4.1.4)$$

Debemos observar que se ha omitido la dependencia en t , porque la fase de Berry solo depende de la forma del camino en el espacio de parámetros y es independiente de la variación de $\boldsymbol{\kappa}(t)$ con respecto al tiempo. Haciendo una analogía con la teoría electromagnética donde la conexión de Berry es el vector potencial de un campo electromagnético. Bajo una transformación de gauge, los eigenestados y la conexión de Berry se transforma como

$$|\psi^\alpha(\boldsymbol{\kappa})\rangle \rightarrow e^{i\phi(\boldsymbol{\kappa})} |\psi^\alpha(\boldsymbol{\kappa})\rangle, \quad \mathcal{A}_\mu^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) \rightarrow \mathcal{A}_\mu^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) - \partial_\mu \phi(\boldsymbol{\kappa}), \quad (4.1.5)$$

por lo que la conexión es dependiente de gauge. Siguiendo con la analogía, podemos definir el campo magnético como el rotacional de la conexión de Berry. Mediante el teorema generalizado de Stokes la fase de Berry puede expresarse como

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{S}} \Omega_{\mu\nu}^\alpha(\boldsymbol{\kappa}) d\kappa^\mu \wedge d\kappa^\nu, \quad (4.1.6)$$

donde

$$\Omega_{\mu\nu}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) = \partial_{\mu}\mathcal{A}_{\nu}(\boldsymbol{\kappa}) - \partial_{\nu}\mathcal{A}_{\mu}(\boldsymbol{\kappa}) \quad (4.1.7)$$

es la curvatura de Berry [47, 114]. Así, la fase de Berry es el flujo de la curvatura de Berry a través de la superficie \mathcal{S} delimitada por el camino $\mathcal{C} = \partial\mathcal{S}$. Por ejemplo, en un espacio bidimensional, $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_x, \kappa_y)$, la curvatura de Berry es

$$\Omega_{xy}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) = \partial_{\kappa_x}\mathcal{A}_{\kappa_y}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) - \partial_{\kappa_y}\mathcal{A}_{\kappa_x}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}), \quad (4.1.8)$$

la cual puede expresarse como una suma sobre todos los estados [113]:

$$\Omega_{\mu\nu}^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) = i \sum_{\alpha' \neq \alpha} \frac{\langle \psi^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) | \partial_{\mu}\mathcal{H}(\boldsymbol{\kappa}) | \psi^{\alpha'}(\boldsymbol{\kappa}) \rangle \langle \psi^{\alpha'} | \partial_{\nu}\mathcal{H}(\boldsymbol{\kappa}) | \psi^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) \rangle - (\nu \leftrightarrow \mu)}{[E^{\alpha}(\boldsymbol{\kappa}) - E^{\alpha'}(\boldsymbol{\kappa})]^2}. \quad (4.1.9)$$

Esta expresión nos indica que la curvatura de Berry no es una propiedad única de la banda, sino más bien una propiedad general de la estructura de bandas del sistema. Otro aspecto importante es que la curvatura es singular si dos niveles de energía son iguales en algún punto $\boldsymbol{\kappa}$. Siguiendo la analogía electromagnética, este punto de degeneración corresponde a un monopolo magnético. Si los puntos degenerados forman una cuerda, se conoce como cuerda de Dirac [2, 113, 115].

Por último, un ejemplo de espacio de parámetros es el momento cristalino en el toro de Brillouin, $\mathbf{k} \in \mathbb{T}^n$, que podemos variar mediante una perturbación en el sistema. En general, la curvatura de Berry es un tensor de rango dos, que forma parte de un objeto geométrico llamado *tensor geométrico cuántico* [45, 46]. La curvatura de Berry es proporcional a la parte imaginaria de dicho tensor.

4.2. Número de Chern

En 1980 Von Klitzing, Dorda y Pepper, usando una muestra semiconductora descubrieron el efecto Hall cuántico entero (*IQHE* por sus siglas en inglés), en el cual un material presenta una conductividad Hall que es múltiplo de valores enteros, esto es [38]:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \nu, \quad (4.2.1)$$

donde $\nu \in \mathbb{Z}$ y e es la carga eléctrica elemental del electrón. Este fenómeno se explica mediante la cuantización de Landau. De hecho, en la ecuación anterior, el número ν corresponde a los niveles de Landau [116]. En 1981, un año después, Laughlin propuso que la cuantización en el efecto se debe a la invarianza gauge [39]. Otra característica importante del efecto Hall cuántico es que en el material se presentan estados de borde [116]. Utilizando el argumento de Laughlin, B.I. Halperin [40] demostró que cuando la energía de Fermi se encuentra entre dos niveles de Landau, el material es aislante y la corriente es

transportada por estados en el borde del material. Sin embargo, los análisis de Laughlin [39] y Halperin [40] consideraban el efecto Hall cuántico en un gas de electrones.

En 1982, Thouless, Kohmto, Nightingale y den Nijs (TKNN) estudiaron el efecto Hall cuántico en un cristal y demostraron que el número entero ν está asociado a una forma geométrica, un invariante topológico [41, 43]. Esto se puede describir de la siguiente manera; consideremos un sistema periódico bidimensional en un campo magnético y mediante el formalismo de Kubo, la conductividad Hall está dada por [42]:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\alpha} C^{\alpha}, \quad (4.2.2)$$

donde

$$C^{\alpha} = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} \Omega_{xy}^{\alpha}(\mathbf{k}) d^2k, \quad (4.2.3)$$

es conocido como primer número de Chern. En base a las expresiones 4.1.3 y 4.2.3, podemos observar que existe una conexión entre el número de Chern, o también conocido como invariante TKNN, y la fase de Berry, esto es

$$C^{\alpha} = 2\pi\gamma^{\alpha}(\mathcal{C}). \quad (4.2.4)$$

Este resultado fue demostrado por Barry Simon, donde además mostró que la fase de Berry es la holonomía de un fibrado vectorial [44]. El número de Chern tiene gran relevancia, debido a que está intrínsecamente relacionado con los estados de borde en materiales finitos [117–119], y dio lugar al nacimiento de los aislantes topológicos. Estos materiales, que a diferencia de los aislantes y conductores convencionales, son aislantes en el bullo pero conductores en los bordes.

A continuación calcularemos el número de Chern para los tres modelos del grafeno que se han tratado en este trabajo: pristino, con masa y modelo de Haldane. Para hacerlo, es necesario integrar la curvatura de Berry en toda la zona de Brillouin utilizando las funciones de onda correspondientes de cada sistema. En el apéndice C se muestra el cálculo del tensor de curvatura de Berry para un modelo de dos bandas, que está dado como

$$\Omega_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{k}) = -\frac{\eta}{2} \hat{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot (\partial_{\mu}\hat{\lambda}(\mathbf{k}) \times \partial_{\nu}\hat{\lambda}(\mathbf{k})), \quad (4.2.5)$$

donde $\hat{\lambda}(\mathbf{k}) : \mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$. Por lo tanto el número de Chern está dado por

$$C^{\eta} = -\frac{\eta}{4\pi} \int_{BZ} \hat{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot (\partial_x\hat{\lambda}(\mathbf{k}) \times \partial_y\hat{\lambda}(\mathbf{k})) d^2k. \quad (4.2.6)$$

donde, para simplificar la notación, $k_x \equiv x$ y $k_y \equiv y$. Dependiendo de la complejidad del vector $\hat{\lambda}(\mathbf{k})$ será la dificultad de calcular el número de Chern, pero más adelante mostraremos una forma práctica de calcular dicho número.

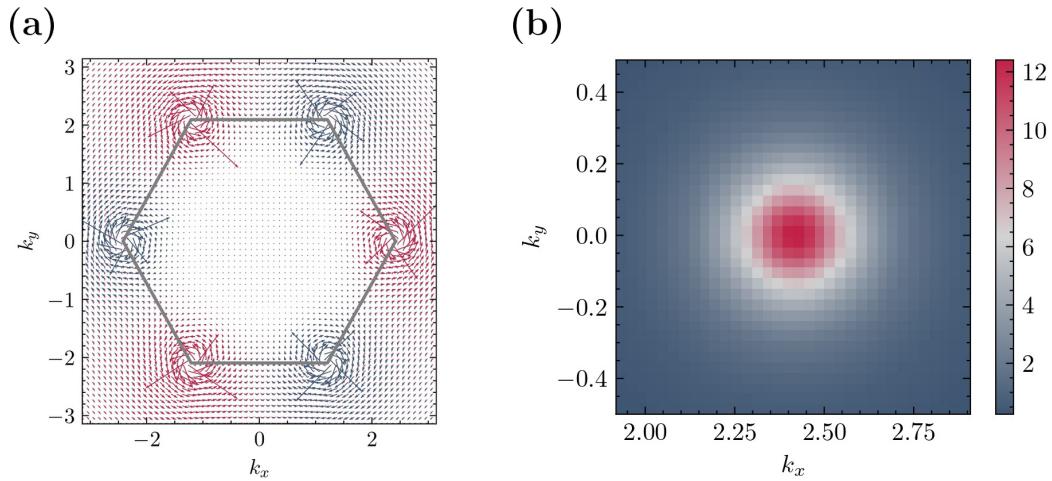


Figura 4.2 (a) Conexión de Berry a bajas energía de grafeno prístico, se observa como la conexión parece girar alrededor de los puntos de Dirac en direcciones opuestas en cada valle y además diverge en dichos puntos. (b) Curvatura de Berry alrededor del punto K_+ , entre más nos acercamos al punto la curvatura aumenta. Algo similar ocurre en el punto K_- , pero en lugar de aumentar, la curvatura decae cerca de dicho punto.

4.2.1. Grafeno prístico

Al igual que el hamiltoniano de Bloch, la curvatura de Berry cumple ciertas propiedades ante simetrías. Por ejemplo, si se conserva la inversión espacial tenemos que $\Omega(\mathbf{k}) = \Omega(-\mathbf{k})$, mientras que si se conserva inversión temporal, entonces $\Omega(\mathbf{k}) = -\Omega(-\mathbf{k})$ [113]. En grafeno prístico, ambas simetrías se conservan, por lo que, en principio, la curvatura de Berry es cero en la zona de Brillouin. Otro argumento es que, en grafeno prístico debido a la simetría de quiralidad tenemos que $\lambda_z(\mathbf{k}) = 0$, entonces según la Ec. 4.2.5, la curvatura de Berry es cero. Sin embargo, debemos tener precaución, porque en los puntos de Dirac la curvatura de Berry diverge y no está bien definida. Para estudiar lo que ocurre cerca de los puntos de Dirac es conveniente analizar el sistema a bajas energías, ya que la problemática ocurre en los puntos \mathbf{K}_ξ . En este caso, la conexión de Berry es

$$\mathcal{A}_\xi^\eta(\mathbf{q}) = \langle \Psi_\eta^\xi(\mathbf{q}) | \nabla_{\mathbf{q}} | \Psi_\eta^\xi(\mathbf{q}) \rangle = \frac{\xi}{2} \nabla_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}}, \quad (4.2.7)$$

donde $|\Psi_\eta^\xi(\mathbf{q})\rangle$ está dado por Ec. 2.3.11. Como se observa en la Fig. 4.2, su campo vectorial parece girar alrededor de los puntos de Dirac con dirección contraria en cada valle, y además diverge en dichos puntos. Entonces, si calculamos la fase de Berry en un camino \mathcal{C} alrededor de estos puntos, tenemos que

$$\begin{aligned} \gamma_\xi(\mathcal{C}) &= \frac{\xi}{2} \int_{\mathcal{C}} \nabla_{\mathbf{q}} \varphi_{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q}, \\ &= \frac{\xi}{2} \int_{\mathcal{C}} d\varphi. \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

El ángulo φ recorre de 0 a 2π , por lo tanto, si el camino encierra a los puntos de Dirac, entonces

$$\gamma_\xi(\mathcal{C}) = \xi\pi, \quad (4.2.9)$$

es la fase que adquieren las funciones de onda al circular alrededor de un punto de Dirac. Al sumar las contribuciones de ambos valles, obtenemos que la fase de Berry es cero, $\gamma_\eta(\mathcal{C}) = 0$, y por tanto el número de Chern también lo es, $C_\eta = 0$.

No obstante, dado que la fase de Berry puede expresarse como el flujo de la curvatura de Berry a través de la superficie encerrada por la trayectoria, debe haber un flujo distinto de cero en los puntos de Dirac, como se muestra en la Fig. 4.2. Por lo tanto la curvatura de Berry para el grafeno prístino puede expresarse como

$$\Omega_{xy}^\eta(\mathbf{k}) = \pi \sum_{j=1}^3 [\delta(\mathbf{k} - \mathbf{K}_j^+) - \delta(\mathbf{k} - \mathbf{K}_j^-)], \quad (4.2.10)$$

donde \mathbf{K}_j^\pm son los puntos equivalentes del punto \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- respectivamente, es decir, todos los puntos corresponden a las seis esquinas de la zona de Brillouin. Siguiendo la analogía electromagnética, la curvatura de Berry en cada uno de los puntos de Dirac puede ser identificada como un monopolo magnético. Experimentalmente en 2005 se observó la existencia de una fase de Berry distinta de cero en grafeno prístino [120]. Luego, en 2011 mediante estudios de espectroscopia de fotoemisión (ARPES) fue posible medir directamente su fase de Berry [121].

4.2.2. Grafeno con masa

En el caso del grafeno con masa tenemos que $\lambda_z(\mathbf{k}) \neq 0$ en Ec. 3.1.6, por lo que no se preservan las simetrías de inversión espacial y quiral. Es importante destacar que, en el capítulo anterior, se mencionó que el grafeno con masa es un modelo trivial. Sin embargo, para poder demostrarlo es necesario analizar la curvatura de Berry y calcular el número de Chern correspondiente a este modelo. Por lo que la curvatura de Berry está dada como

$$\Omega_{\mu\nu}^\eta(\mathbf{k}) = -\frac{\eta}{2\lambda^3(\mathbf{k})} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}). \quad (4.2.11)$$

donde $\lambda(\mathbf{k}) = |\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})|$ con $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) = \{\text{Re}\{f(\mathbf{k})\}, \text{Im}\{f(\mathbf{k})\}, m\}$, tal que $2\lambda(\mathbf{k}) = E_+(\mathbf{k}) - E_-(\mathbf{k})$.

Sin embargo, dado que la componente $\lambda_z(\mathbf{k}) = m$, es una constante, el producto vectorial se reduce a una sola componente, por tanto la curvatura de Berry es

$$\Omega_{\mu\nu}^\eta(\mathbf{k}) = -\eta \frac{m}{2\lambda^3(\mathbf{k})} [\partial_\mu \lambda_x(\mathbf{k}) \partial_\nu \lambda_y(\mathbf{k}) - \partial_\mu \lambda_y(\mathbf{k}) \partial_\nu \lambda_x(\mathbf{k})], \quad (4.2.12)$$

donde $\eta = \pm 1$ es un índice de banda. Ahora, debido a la forma del vector $\lambda(\mathbf{k})$ donde las componentes $\lambda_x(\mathbf{k})$ y $\lambda_y(\mathbf{k})$, son sumas de funciones cosenos y senos respectivamente, entonces la curvatura de Berry se reduce a

$$\begin{aligned}\Omega_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{k}) &= \frac{\eta mt^2}{2\lambda^3(\mathbf{k})} \left\{ \sum_{i,j=1}^3 \delta_{\mu,i} \delta_{\nu,j} [\sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i) \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j) - \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j) \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i)] \right\}, \\ &= \frac{\eta mt^2}{2\lambda^3(\mathbf{k})} \left[\sum_{i,j=1}^3 \delta_{\mu,i} \delta_{\nu,j} \sin(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_i - \boldsymbol{\delta}_j)) \right],\end{aligned}\quad (4.2.13)$$

donde $\delta_{\mu,i}$ hace referencia a la componente μ del vector $\boldsymbol{\delta}_i$ ². Nos interesan las componentes no triviales, las que están fuera de la diagonal, por lo que la curvatura de Berry es

$$\begin{aligned}\Omega_{xy}^{\eta}(\mathbf{k}) &= \eta \frac{\sqrt{3}amt^2}{4\lambda^3(\mathbf{k})} \left\{ \sum_{j=1}^3 \delta_{j,y} [\sin(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_j)) - \sin(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_j))] \right\}, \\ &= \eta \frac{\sqrt{3}a^2mt^2}{4\lambda^3(\mathbf{k})} [\sin(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2)) + \sin(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_3)) + \sin(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_1))].\end{aligned}\quad (4.2.14)$$

Esta expresión puede reescribirse de una forma ya conocida, notemos que los vectores dentro de las funciones trigonométricas son los vectores a segundos vecinos $\{\boldsymbol{\mu}_i\}$. Por lo que la curvatura de Berry se reescribe como

$$\Omega_{xy}^{\eta}(\mathbf{k}) = \eta \frac{\sqrt{3}a^2mt^2}{4\lambda^3(\mathbf{k})} \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_i). \quad (4.2.15)$$

Por simplicidad y para cálculos posteriores definimos $S_{\mathbf{k}} = \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_i)$. Utilizando identidades trigonométricas podemos reescribir la sumatoria, esto es

$$\begin{aligned}S_{\mathbf{k}} &= 2 \left\{ \sin \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2}{2} \right) \left[\cos \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2}{2} \right) - \cos \left(\mathbf{k} \cdot \frac{2\boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2}{2} \right) \right] \right\}, \\ &= -4 \sin \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2}{2} \right) \sin \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_3}{2} \right) \sin \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_1}{2} \right).\end{aligned}\quad (4.2.16)$$

Por lo tanto la curvatura de Berry para el grafeno con masa está dada como

$$\Omega_{xy}^{\eta}(\mathbf{k}) = -\eta a^2 \frac{\sqrt{3}mt^2}{\lambda^3(\mathbf{k})} \sin \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_1 - \boldsymbol{\delta}_2}{2} \right) \sin \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_2 - \boldsymbol{\delta}_3}{2} \right) \sin \left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_3 - \boldsymbol{\delta}_1}{2} \right). \quad (4.2.17)$$

²Utilizamos esta notación para no confundir con el tensor delta de Kronecker δ_{μ}^{ν} .

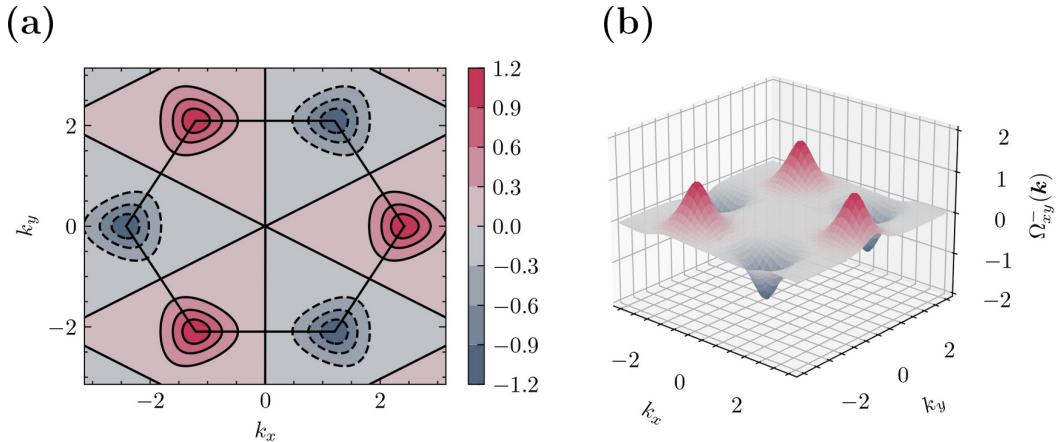


Figura 4.3 (a) Curvatura de Berry de grafeno con masa de la banda de valencia ($\eta = -1$), con parámetro $m = 1$ eV. Se observa como la curvatura crece (decrece) en los puntos equivalentes de \mathbf{K}_+ (\mathbf{K}_-). (b) Curvatura de Berry en 3D de grafeno con masa de la banda de valencia, con parámetro $m = 1$ eV, se muestra como los picos son más pronunciados cuando el valor de m disminuye.

Dado que $\eta = \pm 1$, la curvatura es de signo opuesto en cada banda. Además, evaluando en los puntos de Dirac, tenemos que la curvatura local es

$$\Omega_{xy}^\eta(\mathbf{K}_\xi) = -\eta a^2 \frac{\xi 9t^2}{8m^2} \operatorname{sgn}(m). \quad (4.2.18)$$

En la Fig. 4.3 se muestra la curvatura de Berry y se observa que se producen picos en los puntos de Dirac, entre más disminuya m más pronunciados se hacen los picos, como indica 4.2.18. Además, en el límite $m \rightarrow 0$, la curvatura de Berry es cero, excepto en los puntos \mathbf{K}_ξ , en ese caso se recupera la expresión 4.2.10.

El número de Chern, y por tanto el flujo total de la curvatura de Berry debe desaparecer debido a la invariancia temporal del modelo. Esto se debe a que la simetría de inversión temporal implica que la curvatura de Berry es una función impar, $\Omega_{\mu\nu}^\alpha(-\mathbf{k}) = -\Omega_{\mu\nu}^\alpha(\mathbf{k})$, entonces según Ec. 4.2.3 el número de Chern es

$$C^\eta = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} \Omega_{xy}^\eta(\mathbf{k}) d^2k \quad (4.2.19)$$

donde estamos integrando sobre todo el toro de Brillouin \mathbb{T}^2 , que presenta la periodicidad $\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$. Así, siempre es posible realizar un cambio de variable de tal manera que los intervalos de integración sean simétricos, y debido a que la curvatura de Berry es impar, el número de Chern se anula, $C^\eta = 0$. Como se observa en la Fig. 4.3, en este modelo al integrar la curvatura de Berry de los dos valles se compensan entre sí. Esta cancelación del número de Chern también confirma la ausencia del efecto Hall cuántico en este modelo y por lo tanto el grafeno con masa se considera un aislante trivial.

4.2.3. Modelo de Haldane

En el grafeno con masa tenemos que el flujo de Berry se cancela entre valles, y esto está relacionado con el hecho de que el signo de m es idéntico en ambos valles. Por lo tanto, tener un número de Chern distinto de cero requiere tener signos opuestos de esas masas mediante la inversión de las bandas en un solo valle, y eso es lo que hace el modelo de Haldane. En el modelo de Haldane el desarrollo para obtener la curvatura de Berry es más elaborado con respecto al grafeno con masa ya que cada una de las componentes del vector $\lambda(\mathbf{k})$ no contiene términos constantes. En general, la curvatura de Berry está dada como

$$\Omega_{\mu\nu}^\eta(\mathbf{k}) = -\frac{\eta}{2\lambda^3(\mathbf{k})} \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})), \quad (4.2.20)$$

donde $\lambda(\mathbf{k}) = |\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})|$ con $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) = (\text{Re}\{f(\mathbf{k})\}, \text{Im}\{f(\mathbf{k})\}, m + 2t' \sin \phi \text{Im}\{h(\mathbf{k})\})$, tal que $2\lambda(\mathbf{k}) = E_+(\mathbf{k}) - E_-(\mathbf{k})$. Estas ecuaciones se obtuvieron en el capítulo anterior. Por simplicidad, calcularemos por partes el producto mixto, primero definimos el término

$$\Delta_{\mu\nu}^\rho(\mathbf{k}) = \lambda^\rho(\mathbf{k}) (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}))^\rho, \quad (4.2.21)$$

donde $\rho = \{x, y, z\}$ y por simplicidad ignoraremos la dependencia en \mathbf{k} de los términos $\Delta_{\mu\nu}^\rho$. Así, los términos correspondientes a $\rho = \{x, y\}$ son muy similares, mientras que el término $\rho = z$ es parecido al antes obtenido para grafeno con masa, esto es

$$\begin{aligned} \Delta_{\mu\nu}^x &= \lambda_x(\mathbf{k}) [\partial_\mu \lambda_y(\mathbf{k}) \partial_\nu \lambda_z(\mathbf{k}) - \partial_\mu \lambda_z(\mathbf{k}) \partial_\nu \lambda_y(\mathbf{k})], \\ &= 2t't^2 \sin \phi \sum_{i,j,l=1}^3 (\boldsymbol{\delta}_{\mu,j} \boldsymbol{\mu}_{\nu,l} - \boldsymbol{\delta}_{\nu,j} \boldsymbol{\mu}_{\mu,l}) \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j) \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_l) \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i), \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{\mu\nu}^y &= \lambda_y(\mathbf{k}) [\partial_\mu \lambda_z(\mathbf{k}) \partial_\nu \lambda_x(\mathbf{k}) - \partial_\mu \lambda_x(\mathbf{k}) \partial_\nu \lambda_z(\mathbf{k})], \\ &= 2t't^2 \sin \phi \sum_{i,j,l=1}^3 (\boldsymbol{\delta}_{\mu,j} \boldsymbol{\mu}_{\nu,l} - \boldsymbol{\delta}_{\nu,j} \boldsymbol{\mu}_{\mu,l}) \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_j) \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_l) \sin(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_i). \end{aligned} \quad (4.2.23)$$

Sumando los dos primeros términos y mediante identidades trigonométricas recuperamos la siguiente expresión simplificada

$$\Delta_{\mu\nu}^x + \Delta_{\mu\nu}^y = 2t't^2 \sin \phi \sum_{i,j,l=1}^3 (\boldsymbol{\delta}_{\mu,j} \boldsymbol{\mu}_{\nu,l} - \boldsymbol{\delta}_{\nu,j} \boldsymbol{\mu}_{\mu,l}) \cos(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_i - \boldsymbol{\delta}_j)) \cos(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\mu}_l). \quad (4.2.24)$$

Mientras que el término $\Delta_{\mu\nu}^z$ es similar al de grafeno con masa, solo se cambia m por $\lambda_z(\mathbf{k})$. Así, los términos no diagonales, $\mu = k_x$, $\nu = k_y$, son

$$\Delta_{xy}^x + \Delta_{xy}^y = -2\sqrt{3}a^2t't^2 \sin \phi N_{\mathbf{k}}, \quad \Delta_{xy}^z = -\frac{\sqrt{3}a^2t^2}{2}(m + 2t' \sin \phi S_{\mathbf{k}})S_{\mathbf{k}}, \quad (4.2.25)$$

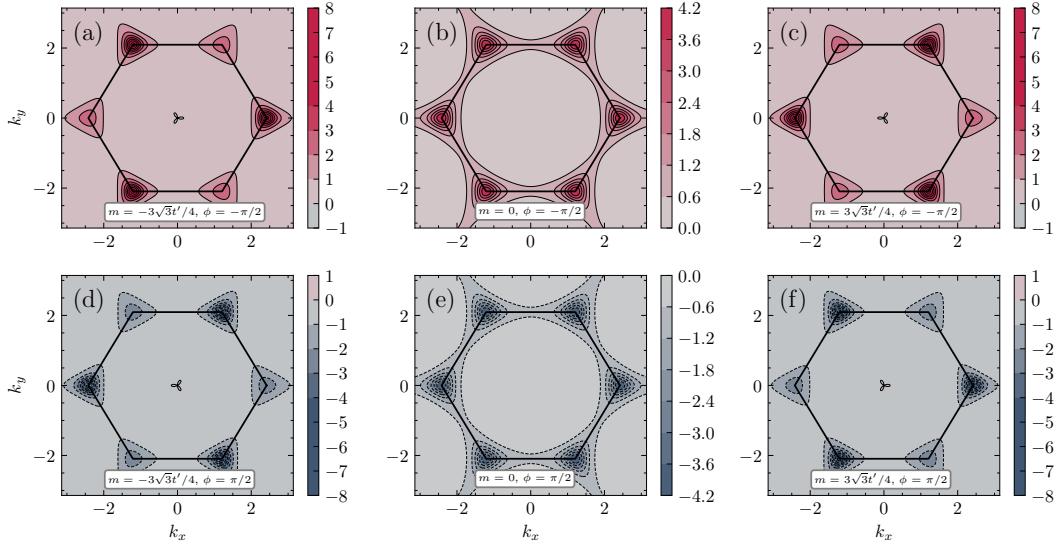


Figura 4.4 Curvatura de Berry del modelo de Haldane de la banda valencia ($\eta = -1$). Todos los casos corresponden a $t' = 0.1$ eV para varios valores de $m = \{-3\sqrt{3}t'/4, 0, 3\sqrt{3}t'/4\}$ y un par de valores de $\phi = \{-\pi/2, \pi/2\}$. En todos los casos se considera que el término de salto $t = 1$ eV.

donde $S_{\mathbf{k}}$ está dado por la expresión 4.2.16 y $N_{\mathbf{k}}$ es una sumatoria que puede expresarse como:

$$\begin{aligned} N_{\mathbf{k}} &= \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_i - \boldsymbol{\delta}_{i+1})) [\cos(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_i - \boldsymbol{\delta}_{i+1})) - \cos(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_i - \boldsymbol{\delta}_{i+2}))], \\ &= -2 \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\delta}_i - \boldsymbol{\delta}_{i+1})) \sin\left(\mathbf{k} \cdot \frac{3\boldsymbol{\delta}_i}{2}\right) \sin\left(\mathbf{k} \cdot \frac{\boldsymbol{\delta}_{i+2} - \boldsymbol{\delta}_{i+1}}{2}\right). \end{aligned} \quad (4.2.26)$$

donde i es un índice cíclico, es decir, $i+3 = i$. Por lo tanto, en forma compacta, la curvatura de Berry para el modelo de Haldane está dada como

$$\Omega_{xy}^{\eta}(\mathbf{k}) = \eta a^2 \frac{\sqrt{3}t^2}{4\lambda^3(\mathbf{k})} [4t' \sin \phi N_{\mathbf{k}} + (m + 2t' \sin \phi S_{\mathbf{k}}) S_{\mathbf{k}}]. \quad (4.2.27)$$

Al igual que en grafeno con masa, la curvatura toma signos opuestos en cada banda. Evaluando en los puntos de Dirac, tenemos que $N_{\mathbf{K}_{\xi}} = 0$, porque implícitamente depende de $\lambda_x(\mathbf{k})$ y $\lambda_y(\mathbf{k})$, así recuperamos la siguiente expresión

$$\Omega_{xy}^{\eta}(\mathbf{K}_{\xi}) = -\eta a^2 \frac{\xi 9t^2}{8|m_H^{\xi}|^2} \operatorname{sgn}(m_H^{\xi}), \quad (4.2.28)$$

que es bastante similar a la obtenida en grafeno con masa. Sin embargo, es importante destacar que en esta situación hay una dependencia en m y ϕ , por lo cual se tienen los tres siguientes casos clave:

- *Caso crítico* $m = \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: la curvatura de Berry no está definida en uno de los valles, mientras que en el otro tiende a un valor finito.
- *Caso no trivial* $|m| < \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: dado que $\text{sgn}(m_H^\xi)$ es distinto en cada valle, entonces la curvatura de Berry toma el mismo signo en cada valle, tal como se muestra en la Fig. 4.4.
- *Caso trivial* $|m| > \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: la curvatura toma signos opuestos en cada valle, este caso es idéntico al de la Ec. 4.2.18 para grafeno con masa (véase Fig. 4.3).

La curvatura está íntimamente relacionada a la proximidad entre bandas, tal como se indica en la Ec 4.1.9. Dependiendo del signo de la masa, si la brecha de energía se cierra en alguno de los puntos de Dirac, la curvatura crece (o decrece) en ese mismo punto (véase Fig. 3.5 y Fig. 4.4). Mientras que en el caso $m = 0$, incluso con la brecha de energía presente, la curvatura de Berry solamente es positiva (o negativa), algo que en grafeno con masa no ocurre. En ese caso (caso trivial) la curvatura toma signos opuestos cerca de los puntos de Dirac y en otras regiones se cancela.

Por otro lado, calcular el número de Chern para el modelo de Haldane, e incluso para otros modelos³, no es una tarea sencilla debido a la forma de la curvatura de Berry (Ec. 4.2.17). Por lo que para dar una interpretación al número de Chern, podemos usar un modelo simplificado de dos bandas dado por

$$C^\eta = -\frac{\eta}{4\pi} \int_{\text{BZ}} \hat{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot (\partial_x \hat{\lambda}(\mathbf{k}) \times \partial_y \hat{\lambda}(\mathbf{k})) d^2k. \quad (4.2.29)$$

El mapeo $\mathbf{k} \rightarrow \hat{\lambda}(\mathbf{k})$ es una función que parte del toro de Brillouin hacia la esfera unitaria 2-dimensional, es decir $\mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$. Esto nos permite reexpresar la Ec. 4.2.29, tal que

$$C^\eta = -\frac{\eta}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} d\Omega'. \quad (4.2.30)$$

donde Ω' es el ángulo sólido. Esta fórmula se justifica observando que $\hat{\lambda}(\mathbf{k})$ es el vector unitario de posición con respecto al origen, mientras que el vector $\partial_x \hat{\lambda}(\mathbf{k}) \times \partial_y \hat{\lambda}(\mathbf{k})$ es el vector normal a la esfera. Así, el resultado de la integral es proporcional a 4π , por lo tanto $C^\eta \in \mathbb{Z}$. Por tanto, el número de Chern es el número de veces que el vector $\hat{\lambda}(\mathbf{k})$ rodea la esfera de Bloch cuando \mathbf{k} recorre el toro de Brillouin [56], lo que en la literatura inglesa se conoce como *winding number*. El argumento anterior nos indica que el número de Chern es un número entero. En particular para la banda de valencia partimos de

$$C^- = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} \Omega_{xy}^-(\mathbf{k}) d^2k. \quad (4.2.31)$$

³Frecuentemente el número de Chern se estima de forma numérica utilizando un método eficiente [122] que consiste en aplicar el teorema de Stokes discretizado.

La curvatura de Berry puede escribirse en términos de la conexión de Berry, esto es,

$$C^- = \frac{1}{2\pi} \int_{BZ} [\partial_x \mathcal{A}_y^-(\mathbf{k}) - \partial_y \mathcal{A}_x^-] d^2k. \quad (4.2.32)$$

Integrar sobre toda la zona de Brillouin implica añadir una fase no dinámica a las funciones de onda y por consecuencia dividir en dos regiones el fibrado vectorial, U_N y U_S . Si bien, la fase que se añade no afecta a la curvatura de Berry, debido a su invarianza gauge, la conexión es dependiente de gauge, por lo que Ec. 4.2.32 debe escribirse como

$$C^- = \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_{K_N} [\partial_x \mathcal{A}_y^{N-}(\mathbf{k}) - \partial_y \mathcal{A}_x^{N-}] d^2k + \int_{K_S} [\partial_x \mathcal{A}_y^{S-}(\mathbf{k}) - \partial_y \mathcal{A}_x^{S-}] d^2k \right\}. \quad (4.2.33)$$

donde \mathcal{A}^{N-} (\mathcal{A}^{S-}) es la conexión de Berry de la banda de valencia del hemisferio U_N (U_S) y donde $K_N = \{\mathbf{k} \mid \theta_{\mathbf{k}} \in [0, \pi/2]\}$, $K_S = \{\mathbf{k} \mid \theta_{\mathbf{k}} \in (\pi/2, \pi]\}$ son las regiones en que se divide el toro de Brillouin, tal que $U_N = \{\hat{\lambda}(\mathbf{k}) \mid \mathbf{k} \in K_N\}$ y $U_S = \{\hat{\lambda}(\mathbf{k}) \mid \mathbf{k} \in K_S\}$. Aplicando el teorema de Stokes, tenemos que

$$C^- = \frac{1}{2\pi} \left\{ \oint_{\partial K_N} \mathcal{A}^{N-}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} + \oint_{\partial K_S} \mathcal{A}^{S-}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} \right\}, \quad (4.2.34)$$

donde ∂K_N y ∂K_S son las fronteras de las superficies de K_N y K_S respectivamente. Notemos que ambas fronteras corresponden a la misma ∂K , ya que $\partial K = \{\mathbf{k} \mid \theta_{\mathbf{k}} = \pi/2\}$ que corresponde al ecuador de la esfera de Bloch, por lo que las orientaciones de ∂K_N y ∂K_S están invertidas. Dado que K_S mapea al hemisferio sur entonces la orientación es negativa, por lo que

$$C^- = \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial K} [\mathcal{A}^{N-}(\mathbf{k}) - \mathcal{A}^{S-}(\mathbf{k})] \cdot d\mathbf{k}. \quad (4.2.35)$$

Recordemos que las funciones de onda, Ec. 3.2.21, se relacionan por la función de transición, tal que $|\psi_-^S(\mathbf{k})\rangle = f_t |\psi_-^N(\mathbf{k})\rangle$, entonces

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{N-}(\mathbf{k}) - \mathcal{A}^{S-}(\mathbf{k}) &= i\{\langle \psi_-^N(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} \psi_-^N(\mathbf{k}) \rangle - \langle \psi_-^S(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} \psi_-^S(\mathbf{k}) \rangle\} \\ &= i\{\langle \psi_-^N(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} \psi_-^N(\mathbf{k}) \rangle - \langle \psi_-^N(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} \psi_-^N(\mathbf{k}) \rangle - f_t^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} f_t\} \\ &= -if_t^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} f_t. \end{aligned} \quad (4.2.36)$$

Dado que $f_t = e^{i\varphi(\mathbf{k})}$ y observando que si tomamos la banda de conducción, resulta algo similar, solamente difiere en un signo. Por lo tanto, el número de Chern es

$$C^\eta = -\frac{\eta}{2\pi} \oint_{\partial K} \nabla_{\mathbf{k}} \varphi(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k}. \quad (4.2.37)$$

donde $\eta = \pm 1$ es el índice de banda. En principio, si $\nabla_{\mathbf{k}} \varphi(\mathbf{k})$ fuera continuo podríamos decir que el número de Chern es cero. Sin embargo, $\varphi(\mathbf{k})$ contiene singularidades en los puntos de Dirac, por lo que los valores finitos del número de Chern provienen de las singularidades.

Para analizar que ocurre alrededor de las singularidades que se localizan en los punto de Dirac, es conveniente considerar la aproximación a bajas energías. Así, el número de Chern estará dado (aproximadamente) por la suma de la contribución de cada valle, esto es

$$C^\eta = \sum_{\xi=\pm} C_\xi^\eta \quad (4.2.38)$$

donde C_ξ^η es el número de Chern alrededor del valle ξ de la banda η . En el modelo de Haldane tenemos que el hamiltoniano a bajas energías es

$$\mathcal{H}_\xi(\mathbf{q}) = \varepsilon_\phi \sigma_0 + \boldsymbol{\lambda}_\xi(\mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_\xi, \quad (4.2.39)$$

donde $\boldsymbol{\lambda}_\xi(\mathbf{q}) = (\xi \hbar v_F q_x, \hbar v_F q_y, m_H^\xi)$, $\boldsymbol{\sigma}_\xi = (\xi \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, y $\varepsilon_\phi = 3t' \cos \phi$ es una energía que se asocia a un desplazamiento de energía. En base a Ec. 4.2.20, la curvatura de Berry está dada por

$$\Omega_{xy}^{\eta\xi}(\mathbf{q}) = -\eta \frac{\xi \hbar^2 v_F^2}{2\lambda_\xi^3(\mathbf{q})} m_H^\xi = -\eta \frac{\xi \hbar^2 v_F^2 m_H^\xi}{(\hbar^2 v_F^2 q^2 + (m_H^\xi)^2)^{1/2}}, \quad (4.2.40)$$

donde $q = |\mathbf{q}|$. Por lo que el número de Chern es

$$C_\xi^\eta = -\frac{\eta}{2\pi} \int \frac{\xi \hbar^2 v_F^2 m_H^\xi}{(\hbar^2 v_F^2 q^2 + (m_H^\xi)^2)^{1/2}} d^2 q. \quad (4.2.41)$$

Al utilizar la aproximación a bajas energías, no tenemos periodicidad, el sistema ahora se encuentra en un plano continuo. En este caso integraremos en una superficie que encierre al valle ($q = 0$). Realizamos un cambio de variable a coordenadas polares, tendremos que

$$\begin{aligned} C_\xi^\eta &= -\frac{\eta}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{\xi \hbar^2 v_F^2 m_H^\xi q}{(\hbar^2 v_F^2 q^2 + (m_H^\xi)^2)^{1/2}} dq d\varphi, \\ &= -\xi \frac{\eta}{2} \text{sign}(m_H^\xi), \end{aligned} \quad (4.2.42)$$

es el número de Chern de cada valle ξ . La forma de la curvatura de Berry en Ec. 4.2.40, es análogo a un monopolo magnético, por tanto al calcular el flujo del monopolo determinaremos su carga magnética, Ec. 4.2.41. Así, el número C_ξ^η podemos asociarlo a una *carga topológica*. Por lo tanto, el número de Chern es

$$C^\eta = -\frac{\eta}{2} [\text{sign}(m_H^+) - \text{sign}(m_H^-)]. \quad (4.2.43)$$

Para la banda de valencia, el número de Chern para el modelo de Haldane es

$$C^- = \frac{1}{2} [\text{sign}(m - 3\sqrt{3}t' \sin \phi) - \text{sign}(m + 3\sqrt{3}t' \sin \phi)]. \quad (4.2.44)$$

Este resultado es consistente con otros dos métodos analíticos para calcular el número de Chern [56, 123]. El primer método consiste en determinar el

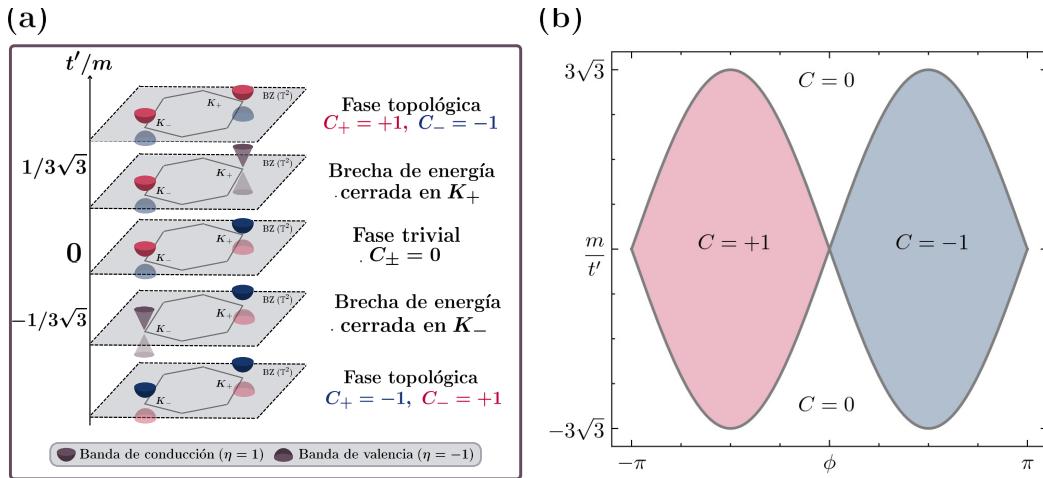


Figura 4.5 Diagramas de fase en el modelo de Haldane. **(a)** Representación de las diferentes fases topológicas de ambas bandas, considerando $\phi = \pi/2$. Se muestran las bandas en los puntos de Dirac y el color indica el signo de la curvatura, color rojo (azul) corresponde a curvatura positiva (negativa). **(b)** Diagrama de fase del modelo de Haldane, igual a Fig. 3.6, pero en este caso se ilustra el número de Chern para las diferentes regiones.

grado de Brouwer del mapeo $\hat{\lambda}(\mathbf{k})$ [56]. En topología el grado de un mapeo continuo, $\hat{\lambda}(\mathbf{k})$, entre dos variedades de la misma dimensión es un número que representa el número de veces que la variedad de dominio (\mathbb{T}^2) envuelve la variedad de rango (\mathbb{S}^2) bajo el mapeo [83]. Mientras que el segundo tratamiento consiste en aplicar un método de regularización que asemeja al teorema de los residuos [123], similar al aplicado en este trabajo. El número de Chern está determinado por los signos que toma la masa de Haldane y el valor del flujo en cada valle. Analizamos los tres casos clave (véase Fig. 4.5) :

- *Caso crítico* $m = \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: El número de Chern no está bien definido por Ec. 4.2.44, ya que según Ec. 4.2.40 se requiere que $m_H^\xi \neq 0$.
- *Caso no trivial* $|m| < \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: El número de Chern puede tomar dos valores:
 - Caso $\phi \in [-\pi/2, 0]$: Tenemos que $\text{sign}(m_H^+) = +1$, mientras que $\text{sign}(m_H^-) = -1$, por lo tanto $C^- = +1$.
 - Caso $\phi \in (0, \pi/2]$: Tenemos que $\text{sign}(m_H^+) = -1$, mientras que $\text{sign}(m_H^-) = +1$, por lo tanto $C^- = -1$.
- *Caso trivial* $|m| > \xi 3\sqrt{3}t' \sin \phi$: Sin importar el signo (m), el número de Chern es $C^- = 0$. Caso equivalente a grafeno con masa.

Por lo tanto, el modelo de Haldane en ciertos regímenes presenta fases no triviales, que son equivalentes a las que presentan en el efecto Hall cuántico. Las fases no triviales aparecen cuando no hay simetría de inversión temporal, lo

que implica que el número de Chern puede ser distinto de cero. En ese sentido, sistemas similares que presenten estas fases se les llama aislantes de Chern. Estos sistemas han mostrado ser grandes candidatos a la próxima generación de tecnologías de información, computación y de almacenamiento [124–131]. En el siguiente capítulo finalizaremos el estudio del modelo de Haldane, determinando la correspondencia bulto-frontera, donde asociamos el número de Chern a estados en el borde.

4.2.4. Aislantes topológicos y el invariante \mathbb{Z}_2

Al final del capítulo 3, mencionamos que aunque el modelo de Haldane no se ha realizado experimentalmente en grafeno, se ha logrado obtener en otros sistemas de materia condensada [95–97]. Sin embargo, Kane y Mele [49, 98] propusieron una variante del modelo de Haldane que se basa en la simetría de inversión temporal y la conservación de un término de espín-órbita.

En el modelo de Kane-Mele, la simetría de inversión temporal conduce al teorema de Kramers, que establece que hay pares de Kramers [132, 133] en ciertos puntos $\mathbf{k} \in \mathbb{T}^2$, denominados Momentos Invariantes de Reversión Temporal (TRIM, por sus siglas en inglés). En estos puntos, las funciones de onda son singulares. Mediante un análisis similar al del modelo de Haldane, se pueden identificar diferentes fases, tanto triviales como no triviales. Sin embargo, la presencia de inversión temporal implica que el número de Chern es cero, lo que significa que las fases no triviales deben estar caracterizadas por otro invariante topológico. En esta situación, se define un índice ν que depende del Pfaffiano de la representación matricial del operador \mathcal{T} y que indica el número de pares de ceros complejos del Pfaffiano [98]. El índice ν es un invariante topológico que solo puede tomar valores de 0 o 1, por lo que se conoce como invariante \mathbb{Z}_2 [98, 134–138].

El modelo de Kane-Mele ha abierto el camino al estudio de nuevos materiales conocidos como aislantes topológicos [71]. A diferencia de los aislantes de Chern, en los aislantes topológicos, las fases no triviales están protegidas por la simetría de inversión temporal. Estos materiales, a diferencia de los aislantes convencionales, son aislantes en el bulto y conductores en los bordes. Además, la fase topológica predicha por Kane y Mele, conocida como efecto Hall cuántico de espín (*QSH*), se ha reproducido de manera experimental [103, 104] y posteriormente se ha generalizado a tres dimensiones [139–141].

5

Sistemas finitos

5.1. Estados de borde

En física de la materia condensada, muchos fenómenos están relacionados con la formación de estados de borde o superficie a lo largo de la interfaz de dos medios distintos. Estos estados se forman debido a la transición brusca entre medios con propiedades distintas. Su existencia usualmente se ha explicado como la manifestación de los mecanismos de Tamm [142] o Shockley [143]. Aunque no hay una distinción física estricta entre estos mecanismos, son distintos cualitativa y matemáticamente. Los estados de borde o de superficie tipo Tamm son aquellos generados por una fuerte perturbación debida a la terminación asimétrica de un potencial periódico. Mientras tanto, los estados de borde tipo Shockley son aquellos que resultan del cruce de bandas adyacentes y pueden existir sin una perturbación superficial.

En el contexto de materia topológica no trivial, los estados de borde son estados topológicos que viven en la frontera entre dos regiones topológicamente distintas [71]. El primer ejemplo de estado de borde topológico fue introducido por R. Jackiw y C. Rebbi en el contexto de la teoría de campos en una dimensión [144]. Por otro lado, en materia condensada existen estados topológicos unidimensionales en el poliacetileno, mejor conocido como modelo SSH [145, 146]. Este modelo describe el poliacetileno como un polímero unidimensional que consiste en una cadena dimerizada de átomos. En este modelo se presenta una topología no trivial debido a la dimerización, que se considera como una distorsión de la red (distorsión de Peierls [147]). Además, si la cadena es finita, aparecen estados de borde que están relacionados con las propiedades topológicas del material [2].

En el capítulo anterior se mencionó una de las características del efecto Hall cuántico [38] es la presencia de estados de borde [40]. Para caracterizarlos se consideró una cinta infinita de ancho $x_1 - x_2$ (véase Fig. 5.1 (a)), en la que se replicó el efecto Hall. El argumento utilizado para la aparición de los estados de borde, se basa en flexionamiento de los niveles de Landau en los límites de la

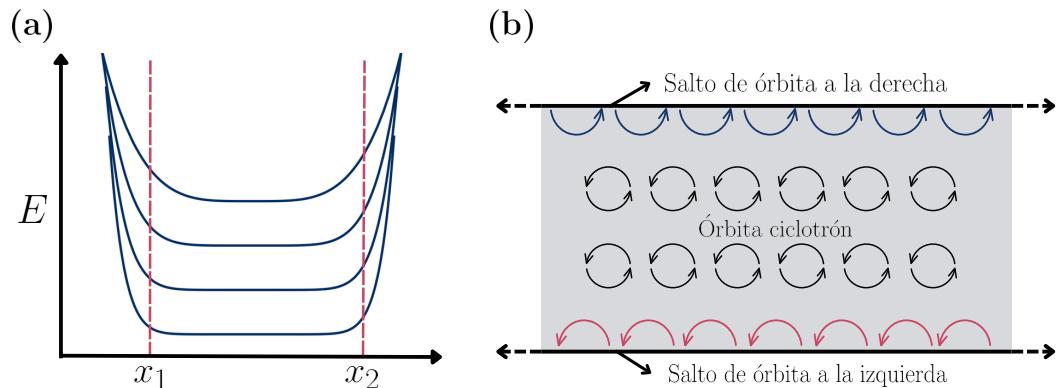


Figura 5.1 Estados de borde en el efecto Hall cuántico. (a) Niveles de Landau de una cinta infinita de ancho $x_2 - x_1$. Cerca del borde de la muestra los niveles de Landau se flexionan, por lo que hay estados que cruzan el nivel de Fermi. (b) Los electrones en el bullo de una muestra tienen un movimiento orbital tipo ciclotrón. Mientras que los electrones en el borde no pueden completar la órbita, por lo que se produce un salto de órbita que se propaga a lo largo del borde.

muestra debido a la diferencia de potencial entre esta y el vacío. Además, estos estados en el borde se relacionan con la cuantización de la conductividad Hall. Posteriormente, Thouless y colaboradores demostraron que el número entero obtenido en el efecto Hall cuántico es un invariante topológico [41], y años después, Hatsugai demostró la correspondencia entre este invariante topológico y el número de estados de borde [117, 118]. En el efecto Hall cuántico, el número de estados de borde es proporcional al número de niveles de Landau. Estos estados se pueden entender mediante el salto de órbita ciclotrónico (véase Fig. 5.1 (b)), los electrones cercanos en los extremos de la muestra no pueden realizar órbitas completas, por lo que los electrones rebotan contra el extremo de la muestra y se desplazan en una dirección. En cada borde solo hay estados que se mueven en una dirección, y la dirección es opuesta para los bordes opuestos. Estos estados se denominan estados de borde *quirales* [71, 148].

En los aislantes de Chern bidimensionales, pueden existir estados metálicos en la interfaz entre dos regiones con invariantes topológicos diferentes. El vacío se considera una región topológica trivial. Cuando la simetría de inversión temporal se rompe, el invariante topológico que caracteriza a estos materiales es el número de Chern. Además, existe una correspondencia bien conocida entre el invariante topológico del volumen del material y el número de estados de borde en el material [71, 119], esta correspondencia se conoce como correspondencia bullo-frontera o en la literatura inglesa como *bulk-edge correspondence*. En la siguiente sección, tomando como ejemplo los modelos anteriores pero en su representación finita, mostraremos la correspondencia bullo frontera obteniendo la estructura de bandas y los estados de borde en cada una de sus correspondientes fases topológicas.

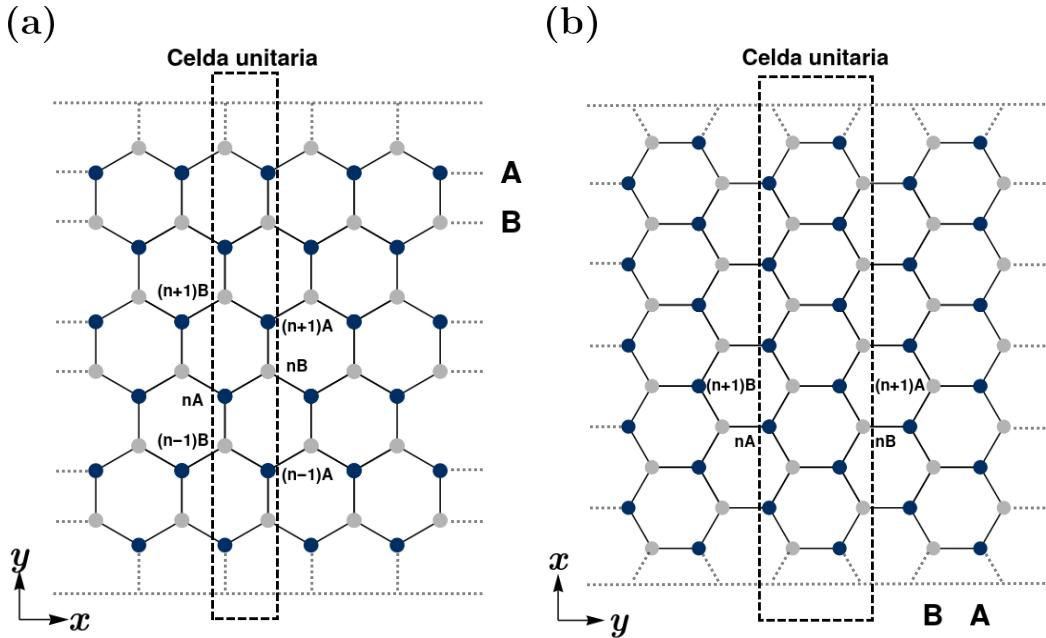


Figura 5.2 Estructura de nanocintas de grafeno con **(a)** borde zigzag (cinta zigzag) y **(b)** borde armchair (cinta armchair). Los rectángulos punteados definen las celdas unitarias. El ancho de la cinta está determinado por el número total de sitios, ambos sistemas tienen $2N$ sitios, $N = 6$ para cinta zigzag y $N = 11$ para cinta armchair.

5.2. Nanocintas de grafeno

En los modelos analizados en los capítulos 2 y 3, se asumió que la red de grafeno era periódica en ambas direcciones, lo que implica que no tiene bordes. Sin embargo, en una red con bordes, la periodicidad se rompe en la dirección perpendicular a este. Por lo tanto, para el estudio de los estados de borde utilizaremos una red que es periódica en una dirección, pero finita en la otra. A estos sistemas se les denomina *cintas* o *nanocintas* de grafeno.

Las nanocintas de grafeno han sido estudiadas durante muchos años, sin embargo, en la década de los 90's fueron de particular importancia los estudios de M. Fujita y colaboradores [149–151], debido al creciente interés que en esa época existía debido al descubrimiento de los nanotubos de carbono [1, 6]. Para describir las propiedades electrónicas de una nanocinta utilizaremos un modelo de amarre fuerte, Ec. 2.2.9, el cual reescribimos aquí,

$$H = -t \sum_{\mathbf{r}} \sum_{m=1}^3 a_{\mathbf{r}}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta_m} + \text{H.c..} \quad (5.2.1)$$

En una nanocinta, la periodicidad de la red se rompe en la dirección perpendicular al borde, entonces la representación de Fourier de operadores de creación y aniquilación en Ec. 2.2.10 deja de ser aplicable. Para tener en cuenta la falta

de invariancia de traslación, tomamos una transformada parcial de Fourier

$$a_{\alpha,\beta} = \frac{1}{\sqrt{N_\alpha}} \sum_{k_\alpha \in \text{BZ}} e^{ik_\alpha \alpha} a_{k_\alpha}(\beta), \quad a_{\alpha,\beta}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_\alpha}} \sum_{k_\alpha \in \text{BZ}} e^{-ik_\alpha \alpha} a_{k_\alpha}^\dagger(\beta), \quad (5.2.2)$$

donde N_α es el número de celdas unitarias en la dirección α . En la Ec. 5.2.1, cada sitio \mathbf{r} tiene coordenadas (α, β) y hemos supuesto un borde a lo largo de la dirección α con los operadores que satisfacen $a_{\alpha,\beta} = a_{\alpha+N_\alpha,\beta}$. En la ecuación anterior, $a_{k_\alpha}(\beta)$ es un operador mixto, ya que depende de la posición β y momento k_α . Sustituyendo los operadores de creación y aniquilación en el hamiltoniano, y remplazando $k_\alpha \rightarrow k$ tenemos que

$$H = -t \sum_{\alpha,\beta} \sum_{m=1}^3 \left[\frac{1}{N_\alpha} \sum_{k,k'} \left(e^{-ik\alpha} a_k^\dagger(\beta) e^{ik'(\alpha+\delta_{\alpha,m})} b_{k'}(\beta + \delta_{\beta,m}) \right) \right] + \text{H.c.}, \quad (5.2.3)$$

donde $\delta_{\alpha,m}$ denota la coordenada α del vector δ_m . Reordenando términos e intercambiando las sumas,

$$H = -t \sum_{\beta,k,k'} \sum_{m=1}^3 \left[\left(\frac{1}{N_\alpha} \sum_\alpha e^{i(k'-k)\alpha} \right) e^{ik'\delta_{\alpha,m}} a_k^\dagger(\beta) b_k(\beta + \delta_{\beta,m}) \right] + \text{H.c..} \quad (5.2.4)$$

Utilizando la definición delta de Kronecker, Ec. 2.2.13, sumando sobre k' y reorganizando índices, el hamiltoniano resultante toma la forma

$$H = -t \sum_{k,\beta} \sum_{m=1}^3 \left[e^{ik\delta_{\alpha,m}} a_k^\dagger(\beta) b_k(\beta + \delta_{\beta,m}) + e^{-ik\delta_{\alpha,m}} b_k^\dagger(\beta + \delta_{\beta,m}) a_k(\beta) \right], \quad (5.2.5)$$

donde podemos definir $f_{k,m} = -te^{ik\delta_{\alpha,m}}$. Por lo tanto la transformación del hamiltoniano está dada por

$$H = \sum_{k,\beta} \sum_{m=1}^3 \left[a_k^\dagger(\beta) f_{k,m} b_k(\beta + \delta_{\beta,m}) + b_k^\dagger(\beta + \delta_{\beta,m}) f_{k,m}^* a_k(\beta) \right]. \quad (5.2.6)$$

El hamiltoniano anterior es la representación en espacio y momento del modelo de amarre fuerte. Es importante mencionar que no hemos utilizado ninguna suposición sobre el tipo de borde e incluso tampoco hemos restringido la derivación a algún tipo particular de red cristalina. Por lo que con las definiciones apropiadas en el factor de estructura $f_{k,m}$ y en los operadores, el hamiltoniano anterior puede ser utilizado para estudiar nanocintas con cualquier geometría, siempre y cuando se cumplan las condiciones periódicas establecidas.

En el caso particular de una red de panal de abeja, como el grafeno, existen dos formas básicas del borde, *zigzag* [149] y *armchair* [152, 153], como se muestra en la Fig. 5.2 (a) y Fig. 5.2 (b) respectivamente. El ancho de las

cintas está determinado por $2N$ el número total de sitios. Así, el ancho de una nanocinta *zigzag* W_z , y de una nanocinta *armchair* W_a están dados por

$$W_z = a \left(\frac{3}{2}N - 1 \right), \quad W_a = a \frac{\sqrt{3}}{2}(N - 1) \quad (5.2.7)$$

donde $a \approx 1.42$ Å es la distancia entre átomos de carbono. También existen otras combinaciones, que no abordaremos en este trabajo, tal es el caso del borde de Klein [154, 155].

5.2.1. Borde *zigzag*

Consideremos el caso del borde *zigzag*, Fig. 5.2 (a). La red es periódica en la dirección x y finita en la dirección transversal y . Así, en base a la Ec. 5.2.6, tenemos que $\alpha = x$ y $\beta = y$, por lo que el hamiltoniano es

$$H = \sum_{k,y} \sum_{m=1}^3 \left[a_k^\dagger(y) f_{k,m} b_k(y + \delta_{y,m}) + b_k^\dagger(y + \delta_{y,m}) f_{k,m}^* a_k(y) \right]. \quad (5.2.8)$$

En la dirección y la nanocinta es finita, por lo que podemos usar coordenadas discretas. Para este sistema se tiene un total de $2N$ sitios en la celda unitaria. En la Fig. 5.2 (a) los sitios A y B tienen tres vecinos correspondientes, por lo que

$$H = -t \sum_k \sum_{n=1}^N \left[(e^{ik\delta_{x,1}} + e^{ik\delta_{x,2}}) a_k^\dagger(n) b_k(n) + e^{ik\delta_{x,3}} a_k^\dagger(n) b_k(n-1) + \text{H.c.} \right]. \quad (5.2.9)$$

Para simplificar y usar posteriormente, definimos los términos $J_1 = -t(e^{ik\delta_{x,1}} + e^{ik\delta_{x,2}}) = -2t \cos(k\sqrt{3}a/2)$, $J_2 = -te^{ik\delta_{x,3}} = -t$. Así, el hamiltoniano se reescribe como

$$H = \sum_k \sum_{n=1}^N \left[J_1 a_k^\dagger(n) b_k(n) + J_2 a_k^\dagger(n) b_k(n-1) + \text{H.c.} \right]. \quad (5.2.10)$$

Notemos que el hamiltoniano anterior es idéntico al de una cadena SSH con parámetros de salto alternados [145], por lo que hemos reducido el problema bidimensional de nanocinta, al de una cadena unidimensional. Para simplificar la ecuación anterior, es útil definir un operador de desplazamiento \mathbb{D} tal que $\mathbb{D}a_k(n) = a_k(n+1)$ y $\mathbb{D}^T a_k(n) = a_k(n-1)$ cuya forma matricial es

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (5.2.11)$$

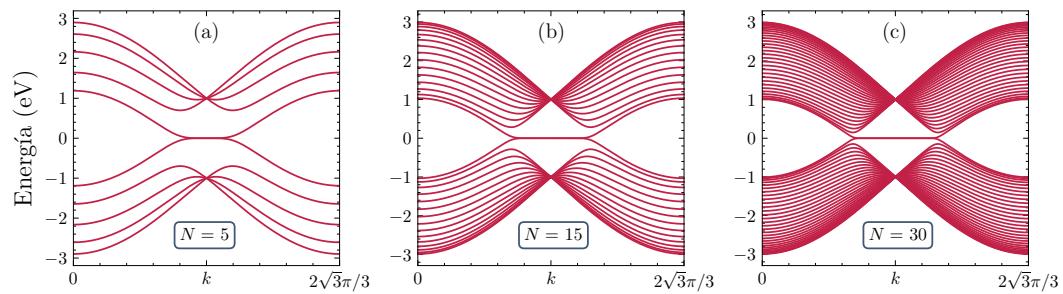


Figura 5.3 Estructura de bandas para grafeno prístico con borde zigzag para **(a)** $N = 5$, **(b)** $N = 15$ y **(c)** $N = 30$. En el nivel de Fermi ($E_F = 0$) aparece una banda plana degenerada que aumenta su anchura de forma proporcional al ancho de la cinta.

y tiene dimensión $N \times N$. Por tanto, el hamiltoniano se reescribe como

$$H = \sum_k \sum_{n=1}^N \left[J_1 a_k^\dagger(n) b_k(n) + J_2 a_k^\dagger(n) \mathbb{D}^T b_k(n) + \text{H.c.} \right]. \quad (5.2.12)$$

La ecuación anterior está simplificada, sin embargo, es conveniente definir los operadores globales

$$\Psi_{k,A}^\dagger = \left\{ a_k^\dagger(1), a_k^\dagger(2), \dots, a_k^\dagger(N) \right\}, \quad \Psi_{k,B}^\dagger = \left\{ b_k^\dagger(1), b_k^\dagger(2), \dots, b_k^\dagger(N) \right\}, \quad (5.2.13)$$

los cuales son vectores de dimensión $1 \times N$ y contienen la información de cada sitio de la red. Por lo tanto, la representación matricial de la Ec. 5.2.12 es de la forma

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} \Psi_{k,A}^\dagger & \Psi_{k,B}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{0}_N & J_1 \mathbb{I}_N + J_2 \mathbb{D}^T \\ J_1 \mathbb{I}_N + J_2 \mathbb{D} & \mathbb{0}_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{k,A} \\ \Psi_{k,B} \end{pmatrix}, \quad (5.2.14)$$

donde \mathbb{I}_N y $\mathbb{0}_N$ son la matriz identidad y la matriz de ceros, ambas de dimensión $N \times N$, respectivamente. Por lo que el hamiltoniano de Bloch para una nanocinta es,

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} \mathbb{0}_N & J_1 \mathbb{I}_N + J_2 \mathbb{D}^T \\ J_1 \mathbb{I}_N + J_2 \mathbb{D} & \mathbb{0}_N \end{pmatrix}, \quad (5.2.15)$$

donde la dependencia en k es a través del término J_1 . En esta nueva representación, el hamiltoniano toma la forma

$$H = \sum_k \Psi_k^\dagger \mathcal{H}(k) \Psi_k, \quad (5.2.16)$$

el cual se puede escribir en una nueva base tal que $\mathcal{H} = \mathcal{P}^{-1} \mathcal{D} \mathcal{P}$ donde \mathcal{D} es la matriz de eigenvalores y \mathcal{P} la matriz cuyas columnas son los eigenvectores de \mathcal{H} . Por lo que para encontrar la estructura de bandas del sistema finito solo basta con diagonalizar la matriz \mathcal{H} .

La Fig. 5.3 presenta los resultados numéricos obtenidos para nanocintas de distintos tamaños. Se puede observar que el número de bandas en la nanocinta está relacionado con el número de sitios que la componen. Es interesante destacar la aparición de un estado no dispersivo que se localiza en un intervalo claramente definido. Este estado fue reportado previamente por Fujita *et al.* [149].

Como lo mostraremos de forma analítica mas adelante, la aparición de este estado se debe a las condiciones de contorno impuestas en la nanocinta. Además, en la Fig. 5.3 se pueden apreciar las diferentes formas de las bandas y cómo varían en función del tamaño de la nanocinta. En las nanocintas más pequeñas, las bandas están muy separadas entre si, mientras que en las nanocintas más grandes las bandas están mas compactas. Cabe destacar que las bandas que están compactas son llamados estado de bullo, es decir, son estados que están distribuidos en la nanocinta. Como lo demostraremos mas adelante, la banda plana es un estado que solo está localizado en los sitios cercanos al borde [149].

5.2.2. Borde *armchair*

Consideremos ahora el caso del borde *armchair*, Fig. 5.2 (a). La red es infinitamente larga en la dirección x y finita en la dirección transversal y . Así, en base a la Ec. 5.2.6, tenemos que $\alpha = x$, $\beta = y$, por lo que el hamiltoniano es

$$H = \sum_{k,x} \sum_{m=1}^3 \left[a_k^\dagger(x) f_{k,m} b_k(x + \delta_{x,m}) + b_k^\dagger(x + \delta_{x,m}) f_{k,m}^* a_k(x) \right]. \quad (5.2.17)$$

En la Fig. 5.2 (a) los sitios A y B tienen tres vecinos correspondientes, por lo que

$$\begin{aligned} H = -t \sum_k \sum_{n=1}^N & \left[e^{ik\delta_{y,1}} a_k^\dagger(n) b_k(n-1) + e^{ik\delta_{y,2}} a_k^\dagger(n) b_k(n+1) + \right. \\ & \left. + e^{ik\delta_{y,3}} a_k^\dagger(n) b_k(n) + \text{H.c.} \right]. \end{aligned} \quad (5.2.18)$$

Similarmente al borde *zigzag*, para simplificar y usar posteriormente, definimos los términos $T_1 = -te^{ik\delta_{y,3}} = -te^{-ik}$, y $T_2 = -te^{ik\delta_{y,1}} = -te^{ik\delta_{y,2}} = -te^{ik\frac{k}{2}}$. Por lo que, el hamiltoniano se reescribe como

$$H = \sum_k \sum_{n=1}^N \left\{ T_1 a_k^\dagger(n) b_k(n) + T_2 [a_k^\dagger(n) b_k(n-1) + a_k^\dagger(n) b_k(n+1)] + \text{H.c.} \right\}. \quad (5.2.19)$$

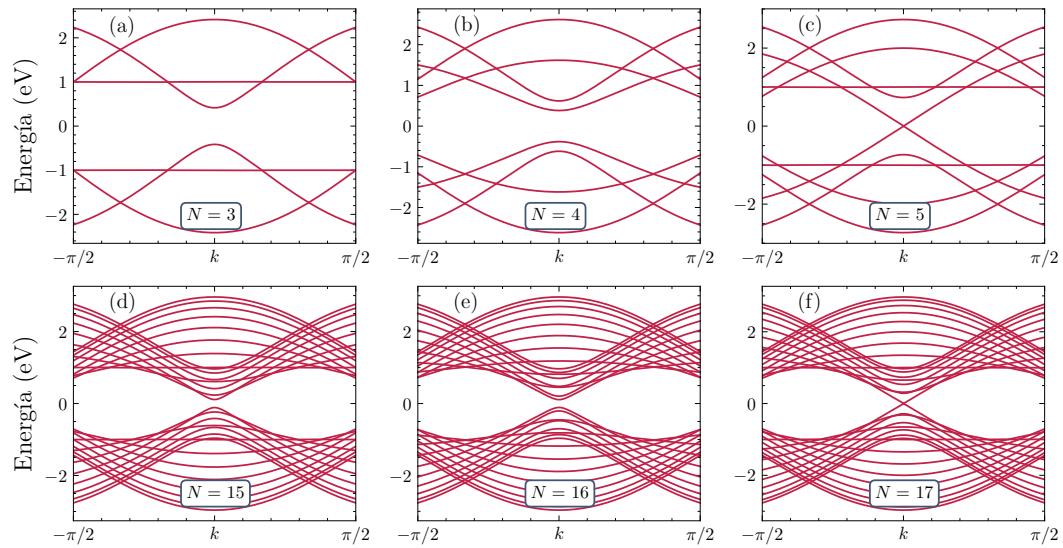


Figura 5.4 Estructura de bandas para grafeno prístico con borde *armchair* para **(a)** $N = 3$, **(b)** $N = 4$, **(c)** $N = 4$, **(d)** $N = 15$, **(e)** $N = 16$, **(f)** $N = 17$. La estructura de bandas depende de la anchura de la cinta, por lo que existen tres tipos de cintas *armchair*: semiconductoras para $N = 3m$ y $N = 3m + 1$ [(a), (b), (d) y (e)] y metálicas para $N = 3m + 2$ [(c) y (f)], con $m \in \mathbb{Z}$.

Nuevamente hacemos uso del operador \mathbb{D} , por lo que se recupera el hamiltoniano

$$\begin{aligned} H &= \sum_k \sum_{n=1}^N \left\{ T_1 a_k^\dagger(n) b_k(n) + T_2 [a_k^\dagger(n) \mathbb{D}^T b_k(n) + a_k^\dagger(n) \mathbb{D} b_k(n)] + \text{H.c.} \right\}. \\ &= \sum_k \sum_{n=1}^N \left\{ a_k^\dagger(n) [T_1 + T_2(\mathbb{D}^T + \mathbb{D})] b_k(n) + \text{H.c.} \right\}. \end{aligned} \quad (5.2.20)$$

La ecuación anterior expresada en forma matricial, al igual que el caso *zigzag*, es

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} \Psi_{k,A}^\dagger & \Psi_{k,B}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{0}_N & T_1 \mathbb{I}_N + T_2(\mathbb{D} + \mathbb{D}^T) \\ T_1^\dagger \mathbb{I}_N + T_2^\dagger(\mathbb{D} + \mathbb{D}^T) & \mathbb{0}_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{k,A} \\ \Psi_{k,B} \end{pmatrix}, \quad (5.2.21)$$

donde \mathbb{I}_N y $\mathbb{0}_N$ son la matriz identidad y la matriz de ceros, ambas de dimensión $N \times N$, respectivamente. Identificamos el hamiltoniano de Bloch, tal que

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} \mathbb{0}_N & T_1 \mathbb{I}_N + T_2(\mathbb{D} + \mathbb{D}^T) \\ T_1^\dagger \mathbb{I}_N + T_2^\dagger(\mathbb{D} + \mathbb{D}^T) & \mathbb{0}_N \end{pmatrix}. \quad (5.2.22)$$

Los resultados numéricos para nanocintas de distinto tamaño se muestran en la Fig. 5.4. En este caso, la estructura de bandas depende fuertemente de la anchura de la cinta. Se ha demostrado que mediante un modelo de amarre

fuerte existen tres tipos de cintas con borde *armchair*: la cinta es semiconductora para $N = 3m$ y $N = 3m + 1$, mientras que para $N = 3m + 2$ es metálica [156] (véase Fig. 5.4), con m algún entero. No obstante, de acuerdo a cálculos *ab initio*¹, más específicamente cálculos DFT (*Density Functional Theory* en inglés), revelan que incluso para $N = 3m + 2$ las bandas son semiconductoras [157, 158].

Finalmente, notemos que, contrario a lo que ocurre en el borde zigzag, en este caso no aparecen estados de borde [159]. Además, debido a que en el borde se dan átomos de las dos subredes, los valles están mezclados y no se puede distinguir los valles \mathbf{K}_\pm .

5.2.3. Soluciones analíticas para los estados de borde

El formalismo de matrices que hemos utilizado para determinar la estructura de bandas en nanocintas con ambas geometrías es muy útil para encontrar formas analíticas para los estados de borde. En esta sección, solo describiremos la metodología para encontrarlos en una red zigzag pero el método se puede generalizar a cualquier sistema finito con condiciones de frontera periódicas.

En general, la ecuación de eigenvalor para un sitio arbitrario n en ambas geometrías se escribe como

$$\mathcal{H} \begin{pmatrix} \psi_A(n) \\ \psi_B(n) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A(n) \\ \psi_B(n) \end{pmatrix}. \quad (5.2.23)$$

Donde hemos omitido la dependencia en k y $\psi_{A/B}(n)$ son las eigenfunciones del hamiltoniano en el n -ésimo sitio. Para una red con borde zigzag usamos el hamiltoniano en Ec. 5.2.15, es decir,

$$\begin{pmatrix} 0 & J_1 \mathbb{I}_N + J_2 \mathbb{D}^T \\ J_1 \mathbb{I}_N + J_2 \mathbb{D} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A(n) \\ \psi_B(n) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A(n) \\ \psi_B(n) \end{pmatrix}. \quad (5.2.24)$$

El operador de desplazamiento simplemente desplaza un sitio en el índice de la función de onda, es decir $\mathbb{D}\psi(n) = \psi(n+1)$ y $\mathbb{D}^T\psi(n) = \psi(n-1)$, por lo que se obtiene,

$$\begin{aligned} J_1 \psi_B(n) + J_2 \psi_B(n-1) &= E \psi_A(n), \\ J_1 \psi_A(n) + J_2 \psi_A(n+1) &= E \psi_B(n). \end{aligned} \quad (5.2.25)$$

La ecuación anterior es un sistema de ecuaciones acopladas y se les conoce como ecuaciones de Harper [160, 161]. Para resolver el sistema anterior, supongamos que la función de onda es de la forma $\psi_A(n) = Az^n$ donde z es en general un número complejo y A una constante de normalización². Para encontrar una

¹Proviene del latín que significa "a partir de primeros principios", que quiere decir que sólo se asumen leyes básicas y bien establecidas. El modelo de amarre fuerte no es un cálculo *ab initio*, ya que requiere parámetros experimentales, los saltos t .

²En general se puede utilizar $\psi_A(n) = Az^n + A'z^{-n}$, sin embargo cada término corresponde a una solución particular de un borde de la nanocinta. Si el sistema es suficientemente ancho entonces las soluciones se pueden considerar de manera independiente.

solución para el estado de borde notemos que la ecuación anterior se tiene que modificar para $n = 1$ ya que una condición de frontera es que el sitio $\psi_B(0) = 0$. Para $n = 1$ escribimos

$$\begin{aligned} J_1\psi_B(1) &= E\psi_A(1), \\ J_1\psi_A(1) + J_2\psi_A(2) &= E\psi_B(1), \end{aligned} \quad (5.2.26)$$

como una consecuencia de la condición de frontera. Para el otro borde en $n = N$ el procedimiento es idéntico, sin embargo, para simplificar el problema solo consideraremos las soluciones para un lado de la nanocinta. Además, supondremos que la nanocinta es infinitamente ancha de tal manera que los estados en lados opuestos no se mezclan entré si. Reescribimos ambos sistemas de ecuaciones, Ec. 5.2.25 y Ec. 5.2.26, en términos del número complejo z , donde

$$\begin{aligned} J_1Bz^n + J_2Bz^{n-1} &= EAz^n, \\ J_1Az^n + J_2Az^{n+1} &= EBz^n, \end{aligned} \quad (5.2.27)$$

son las ecuaciones para el bulto. Mientras que

$$\begin{aligned} J_1Bz &= EAz, \\ J_1Az + J_2Az^2 &= EBz, \end{aligned} \quad (5.2.28)$$

corresponden a las ecuaciones del borde. Ambas ecuaciones se pueden escribir en forma matricial, es decir

$$\begin{pmatrix} -E & J_1 + J_2z^{-1} \\ J_1 + J_2z & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Az^n \\ Bz^n \end{pmatrix} = 0, \quad (5.2.29)$$

$$\begin{pmatrix} -E & J_1 \\ J_1 + J_2z & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Az \\ Bz \end{pmatrix} = 0. \quad (5.2.30)$$

La solución no trivial es cuando los determinantes de ambas ecuaciones son nulos, lo cual nos lleva al siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} E^2 - J_1^2 - J_2^2 - J_1J_2(z + z^{-1}) &= 0, \\ E^2 - J_1^2 - J_1J_2z &= 0. \end{aligned} \quad (5.2.31)$$

Entonces, las soluciones que satisfacen ambas ecuaciones son $E = 0$ y $z = -\frac{J_1}{J_2}$, las cuales corresponden a un estado no dispersivo (banda plana) a energía cero, tal como se observa en la Fig. 5.3. Para encontrar la forma de la función de onda nos apoyamos en la solución de la Ec. 5.2.30 ya que si $E = 0$ y $J_1 \neq 0$, entonces $B = 0$. Por lo que la función de onda de este estado es

$$\psi(n) = A \left(-\frac{J_1}{J_2} \right)^n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.2.32)$$

con energía $E = 0$. La solución corresponde a un estado localizado en el borde de la nanocinta. Este estado de borde fué obtenido en [162] con un método diferente al mostrado en este trabajo. La función de onda solo tiene componentes en los sitios A para un borde de la nanocinta y por simetría en los sitios B para el borde opuesto. Además, debido a que la función de onda debe satisfacer $|z| < 1$ para que la solución no sea divergente, entonces el término $J_1(k) = -2t \cos(k\sqrt{3}a/2)$ determina la región en el espacio de momento en el que el estado de borde está definido, el cuál está dado por $k \in (2\sqrt{3}\pi/9, 4\sqrt{3}\pi/9)$. La relación de dispersión de este estado se puede observar en Fig. 5.3 (c). Notese que cuando la nanocinta es mas estrecha, Fig. 5.3 (a) y (b), la estructura de bandas del estado de borde cerca de sus extremos deja de ser plana. Esto se debe a que hay una hibridación con el estado del borde opuesto. Finalmente, con el mismo procedimiento al descrito en esta sección, se puede demostrar que una nanocinta de grafeno con bordes armchair no admite estados de borde [159], eso se puede observar en la Fig. 5.4.

5.3. Nanocintas de grafeno con masa

En el capítulo 3 estudiamos el grafeno con masa, que consiste en introducir energías de sitio m y $-m$ a los sitios A y B respectivamente. Determinamos que esta modificación al grafeno prístino rompe la simetría de inversión espacial \mathcal{I} y por tanto se abre una brecha de energía. No obstante, en el capítulo 4 calculamos el número de Chern, $C = 0$, y concluimos que este sistema es un aislante trivial. En este apartado, calcularemos las bandas para el grafeno con masa finito con ambos bordes.

El hamiltoniano de amarre fuerte para el grafeno con masa está dado por Ec. 3.1.2, que puede ser reescrito como

$$H = H_G + H_m, \quad (5.3.1)$$

donde H_G es el hamiltoniano de grafeno prístino,

$$H_m = m \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}}^\dagger a_{\mathbf{r}} - b_{\mathbf{r}+\delta_3}^\dagger b_{\mathbf{r}+\delta_3}), \quad (5.3.2)$$

es el hamiltoniano que contiene los términos de *masa*. Repetimos el mismo proceso que en grafeno prístino para expresar el hamiltoniano en el espacio- k ,

$$H_m = \sum_k \begin{pmatrix} \Psi_{k,A}^\dagger & \Psi_{k,B}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{M}_N & \mathbb{0}_N \\ \mathbb{0}_N & -\mathbb{M}_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{k,A} \\ \Psi_{k,B} \end{pmatrix}, \quad (5.3.3)$$

donde $\mathbb{M}_N = m\mathbb{I}_N$. Utilizando el mismo método que en las secciones anteriores es sencillo demostrar que la representación matricial para grafeno con masa con borde *zigzag*, $\mathcal{H}_z(k)$, es,

$$\mathcal{H}_z(k) = \begin{pmatrix} \mathbb{M}_N & J_1\mathbb{I}_N + J_2\mathbb{D}^T \\ J_1\mathbb{I}_N + J_2\mathbb{D} & -\mathbb{M}_N \end{pmatrix}, \quad (5.3.4)$$

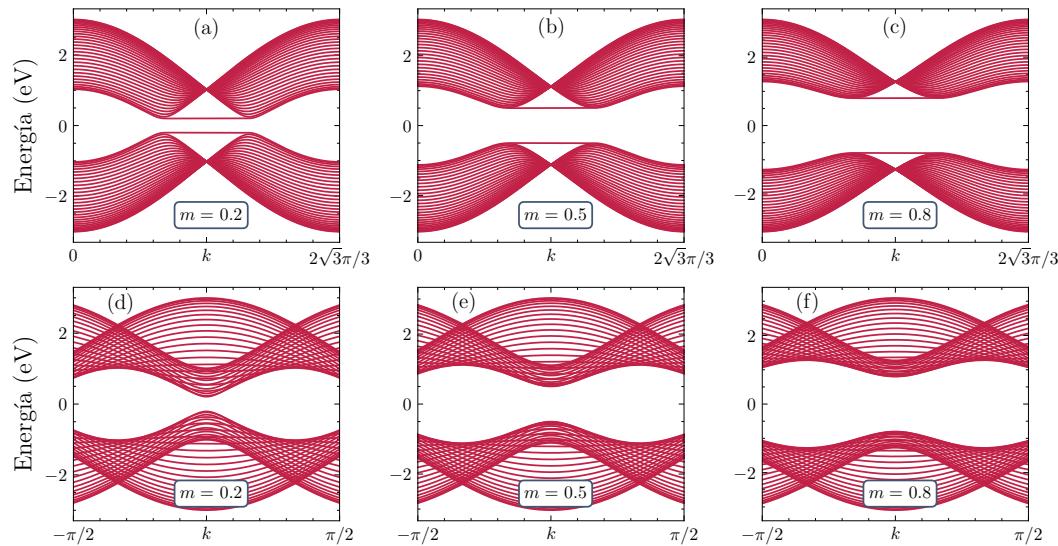


Figura 5.5 Estructura de bandas para grafeno con masa con borde *zigzag* (fila superior) y *armchair* (fila inferior). En ambos casos las bandas se separan, tenemos una brecha de energía similar al caso infinito y no hay estados de borde. En el borde *zigzag* desaparecen los estados metálicos.

y la correspondiente al borde *armchair*, $\mathcal{H}_a(k)$, está dado por

$$\mathcal{H}_a(k) = \begin{pmatrix} \mathbb{M}_N & T_1\mathbb{I}_N + T_2(\mathbb{D} + \mathbb{D}^T) \\ [T_1\mathbb{I}_N + T_2(\mathbb{D} + \mathbb{D}^T)]^\dagger & -\mathbb{M}_N \end{pmatrix} \quad (5.3.5)$$

En la Fig. 5.5 se muestra la estructura de bandas para grafeno con masa con borde *zigzag* (fila superior) y *armchair* (fila inferior). Similarmente al caso infinito (véase Fig 3.1), existe una brecha de energía proporcional a $|m|$. Para ambos bordes las bandas se separan y en el borde *zigzag* tenemos que los estados metálicos que formaban una banda plana se separan. Esto confirma que el grafeno con masa es un aislante trivial.

5.4. Correspondencia bulto-frontera en el modelo de Haldane

En el modelo de Haldane, en ciertos regímenes, pueden presentarse fases equivalentes al efecto Hall cuántico. La aparición de estas fases se relaciona con la ausencia de simetría de inversión temporal y están caracterizadas por un invariante topológico [41, 48]. Al inicio de este capítulo, mencionamos que el efecto Hall cuántico presenta estados de borde [40]. Así, una consecuencia de la presencia de fases topológicas no triviales es la llamada correspondencia bulto-frontera [119], que nos indica que el número de estados de borde en un aislante topológico está relacionado con el correspondiente invariante topológico. Por lo tanto, identificando la fase en la que se encuentra el material, se puede

determinar el número máximo de estados de borde que puede presentar en su representación finita. Para una demostración formal de esto, véase [119].

A continuación, utilizando el formalismo de matrices descrito en las secciones anteriores, construiremos el modelo de Haldane para un sistema finito y obtendremos la estructura de bandas en sus diferentes fases topológicas, Fig. 4.5, mostrando así la correspondencia bulto-frontera para este sistema.

Para comenzar, consideremos el hamiltoniano completo para el modelo de Haldane, que está dado por Ec. 3.2.5, y que podemos reescribir como

$$H = H_m + H_G + H_\phi \quad (5.4.1)$$

donde H_m es el hamiltoniano que contiene las energías de sitios, H_G el hamiltoniano de grafeno prístico y

$$H_\phi = -t' \left[\sum_{n=1}^3 \left(\sum_{\mathbf{r}_A} a_{\mathbf{r}_A}^\dagger a_{\mathbf{r}_A + \mu_n} e^{i\phi} + \sum_{\mathbf{r}_B} b_{\mathbf{r}_B}^\dagger b_{\mathbf{r}_B + \mu_n} e^{-i\phi} \right) + \text{H.c.} \right], \quad (5.4.2)$$

es el hamiltoniano que contiene la fase de Haldane. Aplicando el mismo método que se utilizó para nanocintas de grafeno prístico, el hamiltoniano anterior puede escribirse como

$$H_\phi = \sum_{k,\beta} \sum_{m=1}^3 \left[a_k^\dagger(\beta) h_{k,m} e^{i\phi} a_k(\beta + \mu_{\beta,m}) + b_k^\dagger(\beta) h_{k,m} e^{-i\phi} b_k(\beta + \mu_{\beta,m}) + \text{H.c.} \right]. \quad (5.4.3)$$

donde hemos supuesto que cada sitio \mathbf{r} tiene coordenadas (α, β) , con un borde a lo largo de la dirección α y donde $h_{k,m} = -te^{i\mu_{\alpha,m}}$ es el factor de estructura. Similarmente al caso de las nanocintas prísticas, no hemos utilizado ninguna suposición sobre el tipo de borde. Por lo que con las definiciones apropiadas en el factor de estructura $h_{k,m}$, considerar H_m y H_G , el hamiltoniano anterior puede ser utilizado para estudiar nanocintas con cualquier geometría.

En este sentido, calcularemos H_ϕ para nanocintas *zigzag* y un procedimiento similar se puede seguir para nanocintas *armchair*. Entonces, la red es periódica en la dirección x y finita en la dirección transversal y . Así, tenemos que $\alpha = x$ y $\beta = y$, por lo que, el hamiltoniano de forma simplificada puede escribirse como

$$H_\phi = -t' \sum_k \sum_{n=1}^N [H_\phi(n) + \text{H.c.}], \quad (5.4.4)$$

donde en base a la Fig 5.2 tenemos

$$\begin{aligned} H_\phi(n) = & \left\{ e^{i\phi} \left[e^{ik\mu_{x,1}} a_k^\dagger(n) a_k(n-1) + e^{ik\mu_{x,2}} a_k^\dagger(n) a_k(n+1) + e^{ik\mu_{x,3}} a_k^\dagger(n) a_k(n) \right] + \right. \\ & \left. + e^{-i\phi} \left[e^{ik\mu_{x,1}} b_k^\dagger(n) b_k(n-1) + e^{ik\mu_{x,2}} b_k^\dagger(n) b_k(n+1) + e^{ik\mu_{x,3}} b_k^\dagger(n) b_k(n) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.4.5)$$

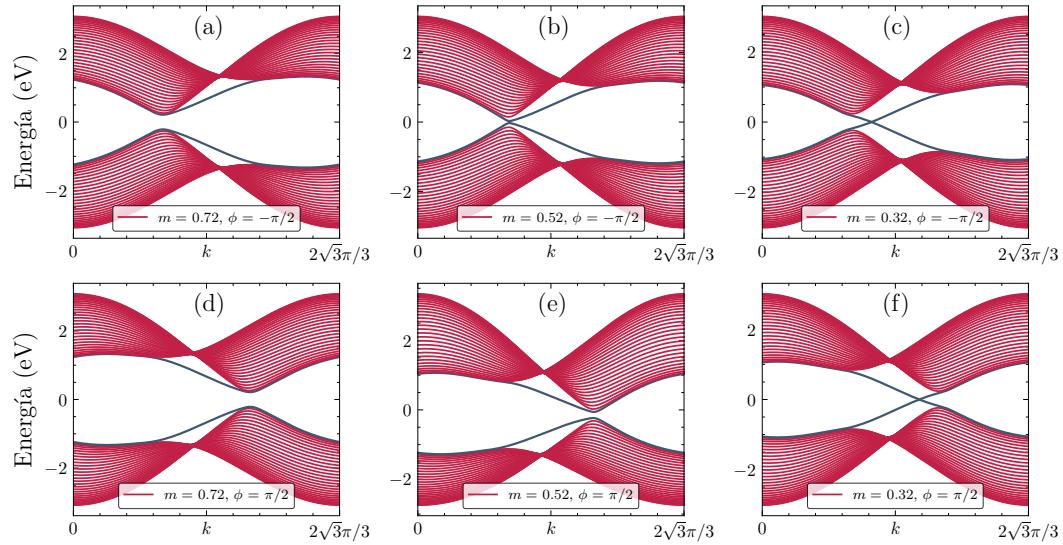


Figura 5.6 Estructura de bandas del modelo de Haldane con borde zigzag. Se considera varios valores de $m = \{3\sqrt{3}t' + \Delta, 3\sqrt{3}t', 3\sqrt{3}t' - \Delta\}$, con $\Delta = 0.1$, y para un par de valores de $\phi = \{-\pi/2, \pi/2\}$. En todos los casos se toma los saltos como $t = 1$ eV y $t' = 0.1$ eV.

En la ecuación anterior no hemos considerado el operador hermitiano conjugado por simplicidad, pero se considera en Ec. 5.4.4. Hacemos uso de la definición de operador \mathbb{D} , por lo que

$$H_\phi(n) = \left\{ e^{i\phi} \left[e^{ik\mu_{x,1}} a_k^\dagger(n) \mathbb{D}^T a_k(n) + e^{ik\mu_{x,2}} a_k^\dagger(n) \mathbb{D} a_k(n) + e^{ik\mu_{x,3}} a_k^\dagger(n) a_k(n) \right] + e^{-i\phi} \left[e^{ik\mu_{x,1}} b_k^\dagger(n) \mathbb{D}^T b_k(n) + e^{ik\mu_{x,2}} b_k^\dagger(n) \mathbb{D} b_k(n) + e^{ik\mu_{x,3}} b_k^\dagger(n) b_k(n) \right] \right\} \quad (5.4.6)$$

Dado que las componentes $\mu_{x,1} = \mu_{x,2} = -\sqrt{3}a/2$ y $\mu_{x,3} = \sqrt{3}a$, entonces se recupera lo siguiente

$$H_\phi(n) = \left\{ a_k^\dagger(n) \left[e^{-i\frac{\sqrt{3}ka}{2} + i\phi} (\mathbb{D}^T + \mathbb{D}) + e^{i\sqrt{3}ka + i\phi} \right] a_k(n) + b_k^\dagger(n) \left[e^{-i\frac{\sqrt{3}ka}{2} - i\phi} (\mathbb{D}^T + \mathbb{D}) + e^{i\sqrt{3}ka - i\phi} \right] b_k(n) \right\}. \quad (5.4.7)$$

Por lo tanto, al sumar el operador hermitiano conjugado podemos simplificar y definir los términos $J_3(\phi) = -2t' \cos(\phi - \sqrt{3}ka/2)$, $J_4(\phi) = -2t' \cos(\phi + \sqrt{3}ka)$ y $J'_3 = J_3(-\phi)$, $J'_4 = J_4(-\phi)$. Así, el hamiltoniano en Ec. 5.4.4 se puede escribir como

$$H_\phi = \sum_k \begin{pmatrix} \Psi_{k,A}^\dagger & \Psi_{k,B}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_3 \mathbb{I} + J_4(\mathbb{D}^T + \mathbb{D}) & \mathbb{0}_N \\ \mathbb{0}_N & J'_3 \mathbb{I} + J'_4(\mathbb{D}^T + \mathbb{D}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{k,A} \\ \Psi_{k,B} \end{pmatrix}. \quad (5.4.8)$$

Por último, al agregar H_m y H_G correspondiente al borde zigzag, Ec. 5.3.4, el hamiltoniano de Bloch para el modelo de Haldane es

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} \mathbb{M}_N + J_3 \mathbb{I} + J_4(\mathbb{D}^T + \mathbb{D}) & J_1 \mathbb{I}_N + J_2 \mathbb{D}^T \\ J_1 \mathbb{I}_N + J_2 \mathbb{D} & -\mathbb{M}_N + J'_3 \mathbb{I} + J'_4(\mathbb{D}^T + \mathbb{D}) \end{pmatrix}. \quad (5.4.9)$$

En la Fig. 5.6 se muestra la estructura de bandas del modelo de Haldane. Hemos considerado una nanocinta con borde *zigzag* y tamaño $N = 30$. Para describir la correspondencia bulto-frontera, consideremos ahora los diferentes casos mostrados en el diagrama de fase de la Fig. 3.6, es decir los tres casos de estudio:

- En la fase trivial con número de Chern $C = 0$, que corresponde a las figuras (a) y (d) de la Fig. 3.5, la nanocinta es semiconductor con una brecha de energía proporcional a la masa de Haldane (véase Cap. 3). Los estados de borde que aparecen en esta fase no cruzan la brecha y son muy similares a los obtenidos en el caso de grafeno con masa. Estos estados, aunque están localizados en el borde, no son topológicos ya que no cruzan la brecha de energía. Además, desaparecen si cambiamos el tipo de borde (véase Fig. 5.5).
- En el caso crítico, mostrado en los paneles (b) y (e) de la Fig. 3.5, el número de Chern no está definido debido a que no hay una brecha de energía. Los estados que cruzan entre las bandas del bulto tienen componentes en los bordes pero, como en el caso trivial, estos estados desaparecen si cambiamos el tipo de borde.
- Finalmente, en el caso no trivial donde $C = -1$ en la Fig. 3.5 (c) y $C = +1$ en Fig. 3.5 (f), los estados claramente cruzan la brecha de energía. En esta fase, si observamos las bandas de izquierda a derecha, los estados de borde aparecen en la región donde están los múltiples estados del bulto en la región de valencia y se fusionan con los estados del bulto de la región de conducción. Aquí, los estados del bulto están separados por una brecha de energía y solo los estados que cruzan la brecha son metálicos. Por lo tanto, los electrones que se propagan por la nanocinta, lo hacen por el borde metálico porque el bulto es aislante. Esta es una característica de un aislante topológico.

En el primer caso con $C = 0$ existen estados de borde, pero estos no cruzan la brecha de energía, por lo que el sistema es un aislante trivial. En el segundo caso, la nanocinta es metálica ya que no hay brecha de energía. En el ultimo caso con $C = \pm 1$, tenemos un estado que cruza el borde (un estado por cada lado de la nanocinta), por lo que el sistema es un aislante en el bulto y conductor en el borde, es decir, un aislante topológico. Esta descripción general nos permite escribir la correspondencia bulto-frontera de la siguiente manera: El número de estados de borde que cruzan la brecha de energía, es igual al número de Chern de la banda anterior a la brecha y su dirección de propagación es igual al signo de este número. Esto se observa, por ejemplo, en la Fig. 3.5 (c). El estado que se origina desde las bandas superiores cruzando la brecha con pendiente negativa es debido a que $C = -1$ en la banda inferior. La banda con pendiente opuesta que también cruza la brecha corresponde al

estado en el borde opuesto de la nanocinta. Este es uno de los resultados mas importantes en los aislantes topológicos ya que con el solo hecho de calcular el número de Chern en el sistema infinito, se puede predecir una propiedad del sistema finito.

6

Conclusiones

En este trabajo se realizó un estudio detallado de las propiedades electrónicas y topológicas de tres tipos de sistemas de grafeno, prístino, con masa y tipo Haldane. En el **Capítulo 2** y **Capítulo 3** se encontraron soluciones analíticas para la estructura de bandas y sus correspondientes funciones de onda. En el **Capítulo 4**, la fase de Berry y su correspondiente número de Chern se obtuvieron analíticamente y numéricamente para describir las diferentes fases topológicas de cada sistema. Adicionalmente, en el **Capítulo 5** se estudió cada sistema en su representación finita y se describió la correspondencia bulto-frontera. Se evidenció que las propiedades topológicas de cada sistema están relacionadas con la existencia o no de estados de borde.

En resumen, en esta tesis se ha realizado una descripción detallada de las propiedades topológicas de una red cristalina de grafeno en presencia de términos de masa y del modelo de Haldane. Se ha llevado a cabo un análisis teórico completo de las simetrías y propiedades electrónicas. Una de las contribuciones más importantes de este trabajo es el nivel de detalle con el que se ha descrito cada sistema, lo que permite una comprensión más profunda y sistemática de sus propiedades topológicas y electrónicas. Aunque existen algunos trabajos en la literatura que describen estos sistemas [2, 65, 71], consideramos que este trabajo unifica y amplía las descripciones existentes. Además, se ha enfocado en describir las propiedades topológicas y electrónicas paso a paso, lo que hace que este trabajo sea una guía útil para otros investigadores interesados en estos temas.

Es importante destacar que los materiales bidimensionales, especialmente el grafeno, tienen un gran potencial en aplicaciones tecnológicas en campos como la informática y el almacenamiento de información. Pero también representan un campo de interés teórico, en particular los aislantes topológicos, cuya descripción está estrechamente ligada con matemáticas complejas y otras ramas de la física, como la Física de Altas Energías. Por lo tanto, el estudio profundo de las propiedades de estos materiales no solo es importante para su aplicación en tecnología, sino que también permite una mejor comprensión de los fenómenos físicos en sistemas complejos.

Finalmente, es importante destacar que aún quedan problemas abiertos para futuras investigaciones. En particular, en el **Capítulo 4** se describió la teoría geométrica de bandas y se calculó la curvatura de Berry. No obstante, para obtener esta cantidad se utiliza el llamado tensor métrico, el cual contiene otra cantidad física importante conocida como métrica cuántica. Sería interesante estudiar en detalle su relación con las propiedades topológicas de los sistemas en cuestión, ya que esta métrica cuántica es una medida de la distancia entre estados cuánticos.

Además, en el **Capítulo 5** se describió la correspondencia bulto-frontera. Se encontraron diferentes estados de borde que no necesariamente son topológicos, sin embargo, dependen mucho del tipo de borde. Recientemente, se ha encontrado que los estados de borde en el grafeno prístico se pueden caracterizar con otro invariante topológico relacionado con algo llamado Fase de Zak [66]. Esto sugiere que dichos estados también tienen un carácter topológico. Sería muy útil encontrar una clasificación más general de los estados de borde tipo Berry o tipo Zak y describir sus diferencias.

A

Hamiltoniano de modelo de dos bandas

El Hamiltoniano para un modelo de dos bandas está dado por

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \lambda_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{A.0.1})$$

donde $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) = \{\lambda_x(\mathbf{k}), \lambda_y(\mathbf{k}), \lambda_z(\mathbf{k})\}$, $\sigma_0 = \mathbb{1}_{2 \times 2}$ es la matriz identidad y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de Pauli. La ecuación de eigenvalor a resolver es

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) |\Psi(\mathbf{k})\rangle = E(\mathbf{k}) |\Psi(\mathbf{k})\rangle, \quad (\text{A.0.2})$$

donde $|\Psi(\mathbf{k})\rangle$ es un pseudo-espinor con componentes $\{\psi_1(\mathbf{k}), \psi_2(\mathbf{k})\}$, $E(\mathbf{k})$ es la relación de dispersión. Así, los eigenvalores están dado por la ecuación característica

$$\det\{[\lambda_0(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k})]\sigma_0 + \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}\} = 0. \quad (\text{A.0.3})$$

Omitiendo la dependencia en \mathbf{k} por simplicidad, el determinante se escribe como

$$\begin{vmatrix} \lambda_0 + \lambda_z - E & \lambda_x - i\lambda_y \\ \lambda_x + i\lambda_y & \lambda_0 - \lambda_z - E \end{vmatrix} = (\lambda_0 - E)^2 - (\lambda_x^2 + \lambda_y^2 + \lambda_z^2) = 0. \quad (\text{A.0.4})$$

Así, al resolver, obtenemos la relación de dispersión,

$$E_\eta = \lambda_0 + \eta\lambda, \quad (\text{A.0.5})$$

donde $\eta = \pm 1$ es el índice de banda y $\lambda = |\boldsymbol{\lambda}|$. Por otra parte para calcular los eigenvectores o funciones de onda, se tiene la siguiente ecuación matricial

$$\begin{pmatrix} \lambda_z - \eta\lambda & \lambda_x - i\lambda_y \\ \lambda_x + i\lambda_y & -\lambda_z - \eta\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.6})$$

De aquí se obtienen las siguientes identidades

$$\psi_1 = -\frac{\lambda_x - i\lambda_y}{\lambda_z - \eta d} \psi_2, \quad \psi_1 = \frac{\lambda_z + \eta\lambda}{\lambda_x + i\lambda_y} \psi_2. \quad (\text{A.0.7})$$

Si utilizamos la segunda identidad la función de onda es de la forma

$$|\Psi_\eta\rangle = \frac{\psi_2}{\lambda_z + \eta\lambda} \begin{pmatrix} \lambda_z + \eta\lambda \\ \lambda_x + i\lambda_y \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.8})$$

Mediante la condición de normalización $\langle\Psi_\xi|\Psi_\xi\rangle = 1$, podemos determinar el valor de ψ_2 , por lo que

$$\begin{aligned} \langle\Psi_\eta|\Psi_\eta\rangle &= \frac{(\psi_2)^2}{(\lambda_z + \eta\lambda)^2} (\lambda_z + \eta\lambda \quad \lambda_x - i\lambda_y) \begin{pmatrix} \lambda_z + \eta\lambda \\ \lambda_x + i\lambda_y \end{pmatrix} \\ &= \frac{(\psi_2)^2}{(\lambda_z + \eta\lambda)^2} [(\lambda_z + \eta\lambda)^2 + \lambda_x^2 + \lambda_y^2] \\ &= \frac{(\psi_2)^2}{(\lambda_z + \eta\lambda)^2} [\lambda_z^2 + \eta 2\lambda_z\lambda + \lambda^2 + \lambda_x^2 + \lambda_y^2] \\ &= \frac{(\psi_2)^2}{(\lambda_z + \xi\lambda)^2} 2\lambda(\lambda + \eta\lambda_z). \end{aligned} \quad (\text{A.0.9})$$

Por lo tanto la función de onda normalizada está dada como

$$|\Psi_\eta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda(\lambda + \eta\lambda_z)}} \begin{pmatrix} \lambda_z + \eta\lambda \\ \lambda_x + i\lambda_y \end{pmatrix}. \quad (\text{A.0.10})$$



Simetrías discretas en modelo de dos bandas

Aplicaremos los operadores de inversión temporal \mathcal{T} , agujero-partícula \mathcal{P} , quiralidad \mathcal{S} e inversión espacial \mathcal{I} , descritos en la sección 2.4, a un hamiltoniano de dos bandas, para determinar las condiciones necesarias que debe tener el hamiltoniano para ser invariante ante estos operadores. Consideraremos el hamiltoniano para un modelo de dos bandas

$$\mathcal{H}(\mathbf{k}) = \lambda_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{B.0.1})$$

donde $\mathbf{k} \in \mathbb{T}^n$ y $\lambda_0(\mathbf{k})$ y $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k})$ son funciones reales.

Simetría de inversión espacial.

La condición de simetría de inversión espacial está dada como

$$\sigma_x \mathcal{H}(\mathbf{k}) \sigma_x = \mathcal{H}(-\mathbf{k}), \quad (\text{B.0.2})$$

entonces, sustituyendo Ec. B.0.1 en la ecuación anterior

$$\begin{aligned} \sigma_x \mathcal{H}(\mathbf{k}) \sigma_x &= \sigma_x (d_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \boldsymbol{\lambda}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sigma_x \\ &= \lambda_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \lambda_x(\mathbf{k}) \sigma_x - \lambda_y(\mathbf{k}) \sigma_y - \lambda_z(\mathbf{k}) \sigma_z \\ &= \lambda_0(-\mathbf{k}) \sigma_0 + \lambda_x(-\mathbf{k}) \sigma_x + \lambda_y(-\mathbf{k}) \sigma_y + \lambda_z(-\mathbf{k}) \sigma_z. \end{aligned} \quad (\text{B.0.3})$$

Para preservar la simetría de inversión es necesario que, término a término se cumpla que,

$$\lambda_0(\mathbf{k}) = \lambda_0(-\mathbf{k}), \quad \lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}), \quad \lambda_z(\mathbf{k}) = -\lambda_z(-\mathbf{k}), \quad (\text{B.0.4})$$

lo cual implica que las funciones $\lambda_0(\mathbf{k})$ y $\lambda_x(\mathbf{k})$ tienen que ser pares, mientras que $\lambda_y(\mathbf{k}), \lambda_z(\mathbf{k})$ tendrían que ser impares.

Simetría de inversión temporal.

Por otro lado, la condición de simetría de inversión temporal es

$$\mathcal{H}(\mathbf{k})^* = \mathcal{H}(-\mathbf{k}), \quad (\text{B.0.5})$$

así, al aplicarlo a Ec. (B.0.1) tenemos

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(\mathbf{k})^* &= (d_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \lambda(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma})^* \\ &= \lambda_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \lambda_x(\mathbf{k}) \sigma_x - \lambda_y(\mathbf{k}) \sigma_y + \lambda_z(\mathbf{k}) \sigma_z \\ &= \lambda_0(-\mathbf{k}) \sigma_0 + \lambda_x(-\mathbf{k}) \sigma_x + \lambda_y(-\mathbf{k}) \sigma_y + \lambda_z(-\mathbf{k}) \sigma_z,\end{aligned}\quad (\text{B.0.6})$$

por lo cual se satisfacen las siguientes relaciones

$$\lambda_0(\mathbf{k}) = \lambda_0(-\mathbf{k}), \quad \lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}), \quad \lambda_z(\mathbf{k}) = \lambda_z(-\mathbf{k}). \quad (\text{B.0.7})$$

esto implica que $\lambda_0(\mathbf{k})$, $\lambda_x(\mathbf{k})$, $\lambda_z(\mathbf{k})$ son funciones pares y $\lambda_y(\mathbf{k})$ es impar.

Simetría quiral.

Por otra parte, la simetría quiral se lee

$$\sigma_z \mathcal{H}(\mathbf{k}) \sigma_z = -\mathcal{H}(\mathbf{k}), \quad (\text{B.0.8})$$

esto es

$$\begin{aligned}\sigma_z \mathcal{H}(\mathbf{k}) \sigma_z &= \sigma_z (d_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \lambda(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sigma_z \\ &= \lambda_0(\mathbf{k}) \sigma_0 - \lambda_x(\mathbf{k}) \sigma_x - \lambda_y(\mathbf{k}) \sigma_y + \lambda_z(\mathbf{k}) \sigma_z \\ &= -\lambda_0(\mathbf{k}) \sigma_0 - \lambda_x(\mathbf{k}) \sigma_x - \lambda_y(\mathbf{k}) \sigma_y - \lambda_z(\mathbf{k}) \sigma_z,\end{aligned}\quad (\text{B.0.9})$$

$$\Rightarrow \lambda_0(\mathbf{k}) = -\lambda_0(\mathbf{k}), \quad \lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = \lambda_y(\mathbf{k}), \quad \lambda_z(\mathbf{k}) = -\lambda_z(\mathbf{k}), \quad (\text{B.0.10})$$

esto implica que necesariamente $\lambda_0(\mathbf{k}) = \lambda_z(\mathbf{k}) = 0$.

Simetría agujero-partícula.

Por último la simetría agujero-partícula \mathcal{P} es la combinación de la simetría quiral y simetría de inversión temporal $\mathcal{P} = \mathcal{S} \cdot \mathcal{T}$, por lo que la condición es

$$\sigma_z \mathcal{H}(\mathbf{k})^* \sigma_z = -\mathcal{H}(-\mathbf{k}), \quad (\text{B.0.11})$$

entonces

$$\begin{aligned}\sigma_z \mathcal{H}(\mathbf{k})^* \sigma_z &= \sigma_z (d_0(\mathbf{k}) \sigma_0 + \lambda(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}) * \sigma_z \\ &= \lambda_0(\mathbf{k}) \sigma_0 - \lambda_x(\mathbf{k}) \sigma_x + \lambda_y(\mathbf{k}) \sigma_y + \lambda_z(\mathbf{k}) \sigma_z \\ &= -\lambda_0(-\mathbf{k}) \sigma_0 - \lambda_x(-\mathbf{k}) \sigma_x - \lambda_y(-\mathbf{k}) \sigma_y - \lambda_z(-\mathbf{k}) \sigma_z,\end{aligned}\quad (\text{B.0.12})$$

por lo tanto debe cumplirse que

$$\lambda_0(\mathbf{k}) = -\lambda_0(-\mathbf{k}), \quad \lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}), \quad \lambda_z(\mathbf{k}) = -\lambda_z(-\mathbf{k}), \quad (\text{B.0.13})$$

entonces $\lambda_0(\mathbf{k})$, $\lambda_y(\mathbf{k})$ y $\lambda_z(\mathbf{k})$ son impares, mientras que $\lambda_x(\mathbf{k})$ es par.

Las cuatro condiciones encontradas serán de utilidad para identificar simetrías en un sistema de dos bandas. Además, notemos que un sistema de dos bandas que presente estas cuatro simetrías a la vez, debe cumplir que

$$\lambda_0(\mathbf{k}) = 0, \quad \lambda_x(\mathbf{k}) = \lambda_x(-\mathbf{k}), \quad \lambda_y(\mathbf{k}) = -\lambda_y(-\mathbf{k}), \quad \lambda_z(\mathbf{k}) = 0. \quad (\text{B.0.14})$$

En el capítulo 2 se muestra que el grafeno prístino presenta estas cuatro simetrías.



Tensor métrico de modelo de dos bandas

En esta sección mostraremos el cálculo para encontrar el tensor geométrico cuántico (TGC) [45, 46, 114] de un modelo de dos bandas. Considerando un modelo n -dimensional de m bandas, el TGC está dado por

$$Q_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{k}) = g_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{k}) - \frac{i}{2}\Omega_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{k}), \quad (\text{C.0.1})$$

donde $\eta = 1, 2, \dots, m$ es el índice de banda, $\mathbf{k} \in \mathbb{T}^n$ es el momento cristalino¹, $g_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{k})$ es la métrica cuántica y $\Omega_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{k})$ es la curvatura de Berry.

Se ha demostrado que un enfoque basado en el operador proyector es útil para encontrar con facilidad el TGC en un modelo de m bandas [163]. En términos del operador proyector el TGC se escribe como [114, 163]:

$$Q_{\mu\nu}^{\eta} = \langle \partial_{\mu} \Psi^{\eta} | (\mathbb{1} - P^{\eta}) | \partial_{\nu} \Psi^{\eta} \rangle \equiv \text{Tr}\{\partial_{\mu} P^{\eta} (\mathbb{1} - P^{\eta}) \partial_{\nu} P^{\eta}\}, \quad (\text{C.0.2})$$

donde $\mathbb{1}_m$ es la matriz identidad de dimensión $m \times m$, $|\Psi^{\eta}\rangle$ son las eigenfunciones, $P^{\eta} = |\Psi^{\eta}\rangle \langle \Psi^{\eta}|$ el operador proyector y además hemos omitido la dependencia en \mathbf{k} por simplicidad.

En base a las soluciones obtenidas para un modelo de dos bandas en el apéndice A, el operador proyector estará dado por

$$\begin{aligned} P^{\eta} &= |\Psi^{\eta}\rangle \langle \Psi^{\eta}|, \\ &= \frac{1}{2\lambda(\lambda + \eta\lambda_z)} \begin{pmatrix} \lambda_z + \eta\lambda \\ \lambda_x + i\lambda_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_z + \eta\lambda & \lambda_x - i\lambda_y \end{pmatrix}, \\ &= \frac{1}{2\lambda(\lambda + \eta\lambda_z)} \begin{pmatrix} (\lambda_z + \eta\lambda)^2 & (\lambda_z + \eta\lambda)(\lambda_x - i\lambda_y) \\ (\lambda_x + i\lambda_y)(\lambda_z + \eta\lambda) & \lambda_x^2 + \lambda_y^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.0.3}) \\ &= \frac{\eta}{2\lambda} \begin{pmatrix} \lambda_z + \eta\lambda & (\lambda_x - i\lambda_y) \\ (\lambda_x + i\lambda_y) & \lambda_z - \eta\lambda \end{pmatrix}, \\ &= \frac{1}{2} [\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{\lambda}^{\eta} \cdot \boldsymbol{\sigma}], \end{aligned}$$

¹En general se puede considerar cualquier espacio de parámetros $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_m)$, como se menciona en el capítulo 4.

donde $\boldsymbol{\lambda}^\eta = \eta \boldsymbol{\lambda} / \lambda$. Entonces el operador $\partial_\mu P^\eta (\mathbb{1}_2 - P^\eta) \partial_\nu P^\eta$ está dado por

$$\begin{aligned}\partial_\mu P^\eta (\mathbb{1}_2 - P^\eta) \partial_\nu P^\eta &= \frac{1}{8} [\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}] [\mathbb{1}_2 - \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}] [\partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}] \\ &= \frac{1}{8} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) - \frac{1}{8} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma})\end{aligned}\quad (\text{C.0.4})$$

Para cuales quiera vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} , se cumple la siguiente propiedad

$$(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \mathbb{1}_{2 \times 2} + i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (\text{C.0.5})$$

la cuál es útil para reescribir Ec. C.0.4. Por simplicidad reescribiremos término a término el operador C.0.4, esto es

$$\begin{aligned}\frac{1}{8} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= \frac{1}{8} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta) \mathbb{1}_2 + i(\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ \frac{1}{8} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= \frac{1}{8} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta) \mathbb{1}_2 + i(\boldsymbol{\lambda}^\eta \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \\ &= \frac{1}{8} [(\boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta) \partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta - \partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \times (\boldsymbol{\lambda}^\eta \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta)] \cdot \boldsymbol{\sigma} + \\ &\quad + \frac{i}{8} [\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot (\boldsymbol{\lambda}^\eta \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta)] \mathbb{1}_2.\end{aligned}\quad (\text{C.0.7})$$

Una de las propiedades de las matrices de Pauli es que $\text{Tr}(\sigma_i) = 0$, entonces $\text{Tr}\{\mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma}\} = 0, \forall \mathbf{h}$. Por lo que,

$$\text{Tr} \left\{ \frac{1}{8} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) \right\} = \frac{1}{8} \partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta \mathbb{1}_2, \quad (\text{C.0.8})$$

$$\text{Tr} \left\{ \frac{1}{8} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \boldsymbol{\sigma}) \right\} = \frac{i}{8} [\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot (\boldsymbol{\lambda}^\eta \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta)] \mathbb{1}_2. \quad (\text{C.0.9})$$

Dado que la $\text{Tr}\{\mathbb{1}_2\} = 2$, entonces el TGC se reduce a

$$Q_{\mu\nu}^\eta = \frac{1}{4} [\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta + i \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta)]. \quad (\text{C.0.10})$$

Identificamos la métrica cuántica y la curvatura de Berry:

$$g_{\mu\nu}^\eta = \frac{1}{4} \partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta, \quad \Omega_{\mu\nu}^\eta = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta). \quad (\text{C.0.11})$$

No obstante podemos reescribir ambos tensores en términos de $\boldsymbol{\lambda}$, lo cuál es de utilidad porque es fácil identificar en el hamiltoniano. Para la métrica cuántica tenemos

$$\begin{aligned}g_{\mu\nu}^\eta &= \frac{1}{4} \partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta, \\ &= \frac{1}{4} \left[\left(\frac{1}{\lambda} \partial_\mu \boldsymbol{\lambda} - \frac{\partial_\mu \lambda}{\lambda^2} \boldsymbol{\lambda} \right) \cdot \left(\frac{1}{\lambda} \partial_\nu \boldsymbol{\lambda} - \frac{\partial_\nu \lambda}{\lambda^2} \boldsymbol{\lambda} \right) \right], \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{1}{d^2} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\partial_\mu \lambda}{\lambda^3} (\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\partial_\nu \lambda}{\lambda^3} (\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\mu \boldsymbol{\lambda}) + \frac{1}{\lambda^2} \partial_\mu \lambda \partial_\nu \lambda \right].\end{aligned}\quad (\text{C.0.12})$$

Considerando que $\partial_\mu d = (\mathbf{d} \cdot \partial_\mu \mathbf{d})/d$, entonces

$$\begin{aligned} g_{\mu\nu}^\eta &= \frac{1}{4} \left[\frac{1}{\lambda^2} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\partial_\mu \lambda}{\lambda^3} (\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\partial_\nu \lambda}{\lambda^3} (\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\mu \boldsymbol{\lambda}) + \frac{1}{\lambda^2} \partial_\mu \lambda \partial_\nu \lambda \right], \\ &= \frac{1}{4} \left[\frac{1}{\lambda^2} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) - \frac{1}{\lambda^4} (\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\mu \boldsymbol{\lambda})(\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) \right], \\ &= \frac{1}{4\lambda^2} \left[\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda} - \frac{(\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\mu \boldsymbol{\lambda})(\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda})}{\lambda^4} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.0.13})$$

Por otro lado, la curvatura de Berry se reescribe como

$$\begin{aligned} \Omega_{\mu\nu}^\eta &= -\frac{1}{2} \boldsymbol{\lambda}^\eta \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda}^\eta \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}^\eta), \\ &= -\frac{\eta}{2\lambda} \boldsymbol{\lambda} \cdot \left[\left(\frac{1}{\lambda} \partial_\mu \boldsymbol{\lambda} - \frac{\partial_\mu \lambda}{\lambda^2} \boldsymbol{\lambda} \right) \times \left(\frac{1}{\lambda} \partial_\nu \boldsymbol{\lambda} - \frac{\partial_\nu \lambda}{\lambda^2} \boldsymbol{\lambda} \right) \right], \\ &= -\frac{\eta}{2\lambda} \boldsymbol{\lambda} \cdot \left[\frac{1}{\lambda^2} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\partial_\mu \lambda}{\lambda^3} (\boldsymbol{\lambda} \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) - \frac{\partial_\nu \lambda}{\lambda^3} (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \times \boldsymbol{\lambda}) \right], \\ &= -\frac{\eta}{2\lambda^3} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}). \end{aligned} \quad (\text{C.0.14})$$

Por lo tanto, para un modelo de dos bandas el tensor geométrico cuántico está dado por

$$Q_{\mu\nu}^\eta = \frac{1}{4\lambda^2} \left[\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda} - \frac{(\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\mu \boldsymbol{\lambda})(\boldsymbol{\lambda} \cdot \partial_\nu \boldsymbol{\lambda})}{\lambda^4} + i \frac{\eta}{\lambda} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\partial_\mu \boldsymbol{\lambda} \times \partial_\nu \boldsymbol{\lambda}) \right]. \quad (\text{C.0.15})$$

En la ecuación anterior se muestra la dependencia explícita del vector $\boldsymbol{\lambda}$. Por lo que, este vector es de gran importancia para describir las propiedades geométricas y topológicas del sistema. Así, los resultados encontrados en esta sección serán de utilidad para calcular la curvatura de Berry y por tanto el número de Chern de los sistemas tratados en este trabajo (Capítulo 4).

Referencias

- [1] L. E. F. F. Torres, S. Roche, and J.-C. Charlier, *Introduction to graphene-based nanomaterials: from electronic structure to quantum transport* (Cambridge University Press, 2014).
- [2] J. Cayssol and J. N. Fuchs, *Journal of Physics: Materials* **4**, 034007 (2021).
- [3] P. Avouris, Z. Chen, and V. Perebeinos, *Nature Nanotechnology* 2007 **2:10** **2**, 605 (2007).
- [4] P. A. Tran, L. Zhang, and T. J. Webster, *Advanced Drug Delivery Reviews* **61**, 1097 (2009).
- [5] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, *Nature* 1985 **318:6042** **318**, 162 (1985).
- [6] S. Iijima, *Nature* **354**, 56 (1991).
- [7] N. D. Mermin, *Physical Review* **176**, 250 (1968).
- [8] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [9] H. P. Boehm, A. Clauss, G. O. Fischer, and U. Hofmann, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* **316**, 119 (1962).
- [10] E. Fitzen, K. H. Köchling, H. P. Boehm, and H. Marsh, *Pure and Applied Chemistry* **67**, 473 (1995).
- [11] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **102**, 10451 (2005).

-
- [12] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* **2005** *438*:7065 **438**, 197 (2005).
 - [13] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Reviews of Modern Physics* **81**, 109 (2009).
 - [14] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Materials* **2007** *6*:3 **6**, 183 (2007).
 - [15] X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E. Y. Andrei, *Nature Nanotechnology* **2008** *3*:8 **3**, 491 (2008).
 - [16] K. Bolotin, K. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H. Stormer, *Solid State Communications* **146**, 351 (2008).
 - [17] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim, *Science* **320**, 1308 (2008).
 - [18] K. F. Mak, M. Y. Sfeir, Y. Wu, C. H. Lui, J. A. Misewich, and T. F. Heinz, *Physical Review Letters* **101**, 196405 (2008).
 - [19] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
 - [20] K. S. Kim, Y. Zhao, H. Jang, S. Y. Lee, J. M. Kim, K. S. Kim, J. H. Ahn, P. Kim, J. Y. Choi, and B. H. Hong, *Nature* **2009** *457*:7230 **457**, 706 (2009).
 - [21] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau, *Nano Letters* **8**, 902 (2008).
 - [22] D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. Mohiuddin, S. V. Morozov, P. Blake, M. P. Halsall, A. C. Ferrari, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, *Science* **323**, 610 (2009).
 - [23] X. Wang, X. Li, L. Zhang, Y. Yoon, P. K. Weber, H. Wang, J. Guo, and H. Dai, *Science* **324**, 768 (2009).
 - [24] A. C. Ferrari, F. Bonaccorso, V. Fal'ko, K. S. Novoselov, S. Roche, P. Bøggild, S. Borini, F. H. L. Koppens, V. Palermo, N. Pugno, J. A. Garrido, R. Sordan, A. Bianco, L. Ballerini, M. Prato, E. Lidorikis, J. Kivioja, C. Marinelli, T. Ryhänen, A. Morpurgo, J. N. Coleman, V. Nicolosi, L. Colombo, A. Fert, M. Garcia-Hernandez, A. Bachtold, G. F. Schneider, F. Guinea, C. Dekker, M. Barbone, Z. Sun, C. Gallois, A. N. Grigorenko, G. Konstantatos, A. Kis, M. Katsnelson, L. Vandersypen, A. Loiseau, V. Morandi, D. Neumaier, E. Treossi, V. Pellegrini, M. Polini, A. Tredicucci, G. M. Williams, B. Hee Hong, J.-H. Ahn, J. Min Kim, H. Zirath, B. J. van Wees, H. van der Zant, L. Occhipinti, A. Di Matteo, I. A. Kinloch, T. Seyller, E. Quesnel, X. Feng, K. Teo, N. Rupesinghe,

- P. Hakonen, S. R. T. Neil, Q. Tannock, T. Löfwander, and J. Kinaret, *Nanoscale* **7**, 4598 (2015).
- [25] Dirac Paul Adrien Maurice, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **117**, 610 (1928).
- [26] M. Katsnelson and K. Novoselov, *Solid State Communications* **143**, 3 (2007).
- [27] T. O. Wehling, A. M. Black-Schaffer, and A. V. Balatsky, <https://doi.org/10.1080/00018732.2014.927109> **63**, 1 (2014).
- [28] A. Raoux, M. Morigi, J. N. Fuchs, F. Piéchon, and G. Montambaux, *Physical Review Letters* **112**, 026402 (2014).
- [29] C. Gutiérrez, C. J. Kim, L. Brown, T. Schiros, D. Nordlund, E. B. Lochocki, K. M. Shen, J. Park, and A. N. Pasupathy, *Nature Physics* **2016 12:10** **12**, 950 (2016).
- [30] C. Bao, H. Zhang, T. Zhang, X. Wu, L. Luo, S. Zhou, Q. Li, Y. Hou, W. Yao, L. Liu, P. Yu, J. Li, W. Duan, H. Yao, Y. Wang, and S. Zhou, *Physical Review Letters* **126**, 206804 (2021).
- [31] O. V. Gamayun, V. P. Ostroukh, N. V. Gnezdilov, I. Adagideli, and C. W. Beenakker, *New Journal of Physics* **20**, 023016 (2018).
- [32] X.-F. Zhou, X. Dong, A. R. Oganov, Q. Zhu, Y. Tian, and H.-T. Wang, *Physical Review Letters* **112**, 085502 (2014).
- [33] A. D. Zabolotskiy and Y. E. Lozovik, *Physical Review B* **94**, 165403 (2016).
- [34] F. Bloch, *Zeitschrift für Physik* **52**, 555 (1929).
- [35] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics: Volume 5*, Vol. 5 (Elsevier, 2013).
- [36] K. Wilson, *Physics Reports* **12**, 75 (1974).
- [37] A. Beekman, L. Rademaker, and J. van Wezel, *SciPost Physics Lecture Notes* , 11 (2019).
- [38] K. V. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *Physical Review Letters* **45**, 494 (1980).
- [39] R. B. Laughlin, *Physical Review B* **23**, 5632 (1981).
- [40] B. I. Halperin, *Physical Review B* **25**, 2185 (1982).

-
- [41] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Physical Review Letters* **49**, 405 (1982).
 - [42] M. Kohmoto, *Annals of Physics* **160**, 343 (1985).
 - [43] J. E. Avron, R. Seiler, and B. Simon, *Physical Review Letters* **51**, 51 (1983).
 - [44] B. Simon, *Physical Review Letters* **51**, 2167 (1983).
 - [45] J. P. Provost and G. Vallee, *Communications in Mathematical Physics* **1980 76:3** **76**, 289 (1980).
 - [46] R. Cheng, (2010), 10.48550/arxiv.1012.1337.
 - [47] M. V. Berry, *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **392**, 45 (1984).
 - [48] F. D. Haldane, *Physical Review Letters* **61**, 2015 (1988).
 - [49] C. L. Kane and E. J. Mele, *Physical Review Letters* **95**, 226801 (2005).
 - [50] I. N. Karnaukhov, *Physics Letters A* **383**, 2114 (2019).
 - [51] T. Mizoguchi, H. Araki, and Y. Hatsugai, <https://doi.org/10.7566/JPSJ.88.104703> **88** (2019), 10.7566/JPSJ.88.104703.
 - [52] F. Liu, M. Yamamoto, and K. Wakabayashi, *Journal of the Physical Society of Japan* **86**, 123707 (2017).
 - [53] S. K. Kim, H. Ochoa, R. Zarzuela, and Y. Tserkovnyak, *Physical Review Letters* **117**, 227201 (2016).
 - [54] P. A. Pantaleón, R. Carrillo-Bastos, and Y. Xian, *Journal of Physics: Condensed Matter* **31**, 085802 (2019).
 - [55] A. Farjami, M. D. Horner, C. N. Self, Z. Papić, and J. K. Pachos, *Physical Review B* **101**, 245116 (2020).
 - [56] D. Sticlet, F. Piéchon, J. N. Fuchs, P. Kalugin, and P. Simon, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **85**, 165456 (2012).
 - [57] L.-H. Wu and X. Hu, *Scientific Reports* **6**, 24347 (2016).
 - [58] P. R. Wallace, *Physical Review* **71**, 622 (1947).
 - [59] C. Bena and G. M. Baux, *New Journal of Physics* **11**, 095003 (2009).
 - [60] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón, *Physical Review B* **66**, 035412 (2002).

- [61] J. C. Slater and G. F. Koster, *Physical Review* **94**, 1498 (1954).
- [62] C. M. Gorringe, D. R. Bowler, and E. Hernández, *Reports on Progress in Physics* **60**, 1447 (1997).
- [63] W. P. Lima, F. R. V. Araújo, D. R. da Costa, S. H. R. Sena, and J. M. Pereira, *Brazilian Journal of Physics* **52**, 42 (2022).
- [64] Y. Ashida, Z. Gong, and M. Ueda, *Advances in Physics* **69**, 249 (2020).
- [65] M. Fruchart and D. Carpentier, *Comptes Rendus Physique* **14**, 779 (2013).
- [66] P. Delplace, D. Ullmo, and G. Montambaux, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **84**, 195452 (2011).
- [67] A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov, and R. A. Duine, *Nature Materials* 2015 14:9 **14**, 871 (2015).
- [68] B. J. Powell, *Computational Methods for Large Systems: Electronic Structure Approaches for Biotechnology and Nanotechnology* , 309 (2009).
- [69] G. G. Naumis, *Revista Mexicana de Física* **67**, 22 (2021).
- [70] E. Noether, <http://dx.doi.org/10.1080/00411457108231446> **1**, 186 (2006).
- [71] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Reviews of Modern Physics* **82**, 3045 (2010).
- [72] X. L. Qi and S. C. Zhang, *Reviews of Modern Physics* **83**, 1057 (2011).
- [73] C. K. Chiu, J. C. Teo, A. P. Schnyder, and S. Ryu, *Reviews of Modern Physics* **88**, 035005 (2016).
- [74] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *New Journal of Physics* **12**, 065010 (2010).
- [75] A. Altland and M. R. Zirnbauer, *Physical Review B* **55**, 1142 (1997).
- [76] A. Kitaev, *AIP Conference Proceedings* **1134**, 22 (2009).
- [77] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. Ludwig, *Physical Review B* **78**, 195125 (2008).
- [78] G. W. Semenoff, *Physical Review Letters* **53**, 2449 (1984).
- [79] G. Cassabois, P. Valvin, and B. Gil, *Nature Photonics* 2016 10:4 **10**, 262 (2016).

- [80] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, P. J. Kelly, and J. Van Den Brink, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **76**, 073103 (2007).
- [81] S. Y. Zhou, G. H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. De Heer, D. H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, *Nature materials* **6**, 770 (2007).
- [82] R. Balog, B. Jørgensen, L. Nilsson, M. Andersen, E. Rienks, M. Bianchi, M. Fanetti, E. Lægsgaard, A. Baraldi, S. Lizzit, Z. Sljivancanin, F. Besenbacher, B. Hammer, T. G. Pedersen, P. Hofmann, and L. Hornekær, *Nature Materials* **2010** 9:4 **9**, 315 (2010).
- [83] L. E. J. Brouwer, *Mathematische Annalen* **71**, 97 (1912).
- [84] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics* (CRC Press, 2018).
- [85] M. S. Fuhrer, *Science* **340**, 1413 (2013).
- [86] B. Hunt, J. D. Sanchez-Yamagishi, A. F. Young, M. Yankowitz, B. J. LeRoy, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Moon, M. Koshino, P. Jarillo-Herrero, and R. C. Ashoori, *Science* **340**, 1427 (2013).
- [87] N. Hao, P. Zhang, Z. Wang, W. Zhang, and Y. Wang, *Physical Review B* **78**, 075438 (2008).
- [88] R. Peierls, *Zeitschrift für Physik* 1933 80:11 **80**, 763 (1933).
- [89] Y. Aharonov and D. Bohm, *Physical Review* **115**, 485 (1959).
- [90] M. Ramezani Masir, D. Moldovan, and F. Peeters, *Solid State Communications* **175-176**, 76 (2013).
- [91] G. G. Naumis, S. Barraza-Lopez, M. Oliva-Leyva, and H. Terrones, *Reports on Progress in Physics* **80**, 096501 (2017).
- [92] J. Sun, T. Liu, Y. Du, and H. Guo, *Physical Review B* **106**, 155417 (2022).
- [93] A. Hill, A. Sinner, and K. Ziegler, *New Journal of Physics* **13**, 035023 (2011).
- [94] P. Kapri, B. Dey, and T. K. Ghosh, *Physical Review B* **102**, 045417 (2020).
- [95] C. Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L. L. Wang, Z. Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S. C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X. C. Ma, and Q. K. Xue, *Science* **340**, 167 (2013).

- [96] G. Jotzu, M. Messer, R. Desbuquois, M. Lebrat, T. Uehlinger, D. Greif, and T. Esslinger, *Nature* **2014** *515*:7526 **515**, 237 (2014).
- [97] H. S. Kim and H. Y. Kee, *npj Quantum Materials* **2017** *2*:1 **2**, 1 (2017).
- [98] C. L. Kane and E. J. Mele, *Physical review letters* **95**, 146802 (2005).
- [99] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and A. Brataas, *Physical Review B* **74**, 155426 (2006).
- [100] H. Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, L. Kleinman, and A. H. MacDonald, *Physical Review B* **74**, 165310 (2006).
- [101] J. C. Boettger and S. B. Trickey, *Physical Review B* **75**, 121402 (2007).
- [102] M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler, C. Ambrosch-Draxl, and J. Fabian, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **80**, 235431 (2009).
- [103] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
- [104] M. Konig, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
- [105] L. N. Cooper, *Physical Review* **104**, 1189 (1956).
- [106] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Physical Review* **108**, 1175 (1957).
- [107] N. Armitage, E. Mele, and A. Vishwanath, *Reviews of Modern Physics* **90**, 015001 (2018).
- [108] M. Sato and Y. Ando, *Reports on Progress in Physics* **80**, 076501 (2017).
- [109] S. Pancharatnam, *Proceedings of the Indian Academy of Sciences - Section A* **44**, 247 (1956).
- [110] Longuet-Higgins H.C., Öpik U, Pryce M. H. L., and Sack R. A, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **244**, 1 (1958).
- [111] M. Born and V. Fock, *Zeitschrift für Physik* **51**, 165 (1928).
- [112] T. Kato, *Journal of the Physical Society of Japan* **5**, 435 (1950).
- [113] D. Xiao, M. C. Chang, and Q. Niu, *Reviews of Modern Physics* **82**, 1959 (2010).
- [114] R. Resta, *The European Physical Journal B* **79**, 121 (2011).

- [115] P. A. M. Dirac, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* **133**, 60 (1931).
- [116] D. Tong, (2016), 10.48550/arxiv.1606.06687.
- [117] Y. Hatsugai, *Physical Review Letters* **71**, 3697 (1993).
- [118] Y. Hatsugai, *Physical Review B* **48**, 11851 (1993).
- [119] X. L. Qi, Y. S. Wu, and S. C. Zhang, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **74**, 045125 (2006).
- [120] Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* 2005 438:7065 **438**, 201 (2005).
- [121] C. Hwang, C.-H. Park, D. A. Siegel, A. V. Fedorov, S. G. Louie, and A. Lanzara, *Physical Review B* **84**, 125422 (2011).
- [122] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, <https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.1674> **74**, 1674 (2013).
- [123] C.-H. Lin and Y.-C. Tsai, *Journal of Physics Communications* **2**, 085014 (2018).
- [124] M. J. Gilbert, *Communications Physics* 2021 4:1 **4**, 1 (2021).
- [125] Y. Tokura, M. Kawasaki, and N. Nagaosa, *Nature Physics* 2017 13:11 **13**, 1056 (2017).
- [126] F. Romeo, *Physical Review B* **102**, 195427 (2020).
- [127] B.-L. Wu, Z.-B. Wang, Z.-Q. Zhang, and H. Jiang, *Physical Review B* **104**, 195416 (2021).
- [128] C. Xiao, J. Tang, P. Zhao, Q. Tong, and W. Yao, *Physical Review B* **102**, 125409 (2020).
- [129] D. Ovchinnikov, J. Cai, Z. Lin, Z. Fei, Z. Liu, Y.-T. Cui, D. H. Cobden, J.-H. Chu, C.-Z. Chang, D. Xiao, J. Yan, and X. Xu, *Nature Communications* **13**, 5967 (2022).
- [130] J. Cai, D. Ovchinnikov, Z. Fei, M. He, T. Song, Z. Lin, C. Wang, D. Cobden, J.-H. Chu, Y.-T. Cui, C.-Z. Chang, D. Xiao, J. Yan, and X. Xu, *Nature Communications* **13**, 1668 (2022).
- [131] N. Varnava, J. H. Wilson, J. H. Pixley, and D. Vanderbilt, *Nature Communications* 2021 12:1 **12**, 1 (2021).
- [132] H. A. Kramers, *Proc. Acad. Amst* **33** (1930).

- [133] F. Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele, *Physical Review Letters* **111**, 056402 (2013).
- [134] L. Fu and C. L. Kane, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **74**, 195312 (2006).
- [135] T. Fukui and Y. Hatsugai, <https://doi.org/10.1143/JPSJ.76.053702> **76**, 53702 (2007).
- [136] T. Fukui, T. Fujiwara, and Y. Hatsugai, <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.77.123705> **77** (2008), 10.1143/JPSJ.77.123705.
- [137] X. L. Qi, T. L. Hughes, and S. C. Zhang, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **78**, 195424 (2008).
- [138] Z. Wang, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *New Journal of Physics* **12**, 065007 (2010).
- [139] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, *Physical Review Letters* **98**, 106803 (2007).
- [140] J. E. Moore and L. Balents, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **75**, 121306 (2007).
- [141] R. Roy, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **79**, 195322 (2009).
- [142] I. Tamm, *Phys. Z. Sowjetunion* **1**, 733 (1932).
- [143] W. Shockley, *Physical Review* **56**, 317 (1939).
- [144] R. Jackiw and C. Rebbi, *Physical Review D* **13**, 3398 (1976).
- [145] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, *Physical Review Letters* **42**, 1698 (1979).
- [146] A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer, and W. P. Su, *Reviews of Modern Physics* **60**, 781 (1988).
- [147] R. E. Peierls, *Quantum theory of solids* (Oxford University Press, 1955).
- [148] H. Nielsen and M. Ninomiya, *Physics Letters B* **105**, 219 (1981).
- [149] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada, and K. Kusakabe, *Journal of the Physical Society of Japan* **65**, 1920 (1996).
- [150] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical Review B* **54**, 17954 (1996).

- [151] K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki, and M. Sigrist, *Physical Review B* **59**, 8271 (1999).
- [152] C. H. Chiu and C. S. Chu, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **85**, 155444 (2012).
- [153] P. A. Maksimov, A. V. Rozhkov, and A. O. Sboychakov, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* **88**, 245421 (2013).
- [154] D. J. Klein, *Chemical Physics Letters* **217**, 261 (1994).
- [155] K. Wakabayashi, S. Okada, R. Tomita, S. Fujimoto, and Y. Natsume, <https://doi.org/10.1143/JPSJ.79.034706> **79** (2010), [10.1143/JPSJ.79.034706](https://doi.org/10.1143/JPSJ.79.034706).
- [156] A. Cresti, N. Nemec, B. Biel, G. Niebler, F. Triozon, G. Cuniberti, and S. Roche, *Nano Research* **1**, 361 (2008).
- [157] Y. W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Physical Review Letters* **97**, 216803 (2006).
- [158] Y. W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nature* 2006 444:7117 **444**, 347 (2006).
- [159] Y. Zhao, W. Li, and R. Tao, *Physica B: Condensed Matter* **407**, 724 (2012).
- [160] P. G. Harper, *Proceedings of the Physical Society. Section A* **68**, 874 (1955).
- [161] D. R. Hofstadter, *Physical Review B* **14**, 2239 (1976).
- [162] K. Wakabayashi, K. I. Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki, *Science and Technology of Advanced Materials* **11**, 054504 (2010).
- [163] A. Graf and F. Piéchon, *Physical Review B* **104**, 085114 (2021).